



HAL
open science

Modélisation mathématique et numérique de la combustion de brouillards de gouttes polydispersés

Frédérique Laurent

► **To cite this version:**

Frédérique Laurent. Modélisation mathématique et numérique de la combustion de brouillards de gouttes polydispersés. Mathématiques [math]. Université Claude Bernard - Lyon I, 2002. Français. NNT: . tel-00185806

HAL Id: tel-00185806

<https://theses.hal.science/tel-00185806>

Submitted on 7 Nov 2007

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.

THÈSE

présentée devant

l'UNIVERSITÉ CLAUDE BERNARD - LYON 1

pour l'obtention

du **DIPLÔME DE DOCTORAT**

(arrêté du 30 mars 1992)

Spécialité : **MATHÉMATIQUES APPLIQUÉES**

présentée et soutenue publiquement le 23 septembre 2002

par

Frédérique LAURENT

**Modélisation mathématique et numérique de la
combustion de brouillards de gouttes polydispersés**

Directeurs de thèse : Marc MASSOT
Vitaly VOLPERT

JURY :	MM.	V. GIOVANGIGLI	Président
		S. CORDIER	Rapporteur
		J.M. ROQUEJOFFRE	Rapporteur
		L. VEVERISCH	Rapporteur
		C. CHEVERRY	
		J.F. MAITRE	
		M. MASSOT	Directeur de thèse
		P. VILLEDIEU	
		V. VOLPERT	Directeur de thèse
		M. LANCE	invité
	Mme	M. SCHATZMAN	invitée

Remerciements

Je tiens d'abord à remercier Marc Massot, qui a principalement dirigé mes recherches. Par de nombreuses discussions scientifiques, il a su animer et motiver ce travail. Je lui suis également reconnaissante pour sa disponibilité, pour son enthousiasme communicatif et pour ses conseils.

Merci à Vitaly Volpert pour m'avoir initiée à l'utilisation de méthodes de degré topologique, ainsi que pour les discussions fructueuses que j'ai pu avoir avec lui.

Je remercie particulièrement Vincent Giovangigli de l'intérêt qu'il a porté à mes travaux. Il m'a fait un grand honneur en présidant mon jury de thèse.

Je souhaite exprimer ma reconnaissance et ma gratitude à Messieurs Stéphane Cordier, Jean-Michel Roquejoffre et Luc Vervisch qui ont bien voulu prendre sur leur temps pour être rapporteurs de cette thèse. Toute ma gratitude s'adresse également à Messieurs Christophe Cheverry, Jean-François Maître, Philippe Villedieu, Michel Lance et à Madame Michelle Schatzman qui ont bien voulu faire partie de ce jury.

Certains collègues ont participé aux travaux présentés dans ce manuscrit : l'équipe du Center for Combustion Studies de Yale University, et en particulier M.D. Smooke, A. Gomez et V. Santoro pour les comparaisons expérimentales du chapitre 3 ; Philippe Villedieu de l'ONERA, Centre de Toulouse, pour le cas des sprays denses, chapitre 4. Je les en remercie.

Je tiens à remercier Jean-François Maître pour les discussions que nous avons eu et pour ses conseils, concernant la partie analyse numérique. Je regrette qu'il n'ait pu assister à ma soutenance.

Merci à Mohand Moussaoui qui m'a orientée vers ce sujet, lorsque je cherchais mon stage de DEA. Je le remercie également du soutien qu'il m'a accordé ensuite.

Je remercie le CNRS pour avoir financé ma thèse en m'accordant une Bourse de Docteur Ingénieur.

Merci à Magali Ribot, à Claire Borde et aussi à Michaël Belk pour avoir relu certaines parties de ce manuscrit. Merci également à Thierry Dumont pour sa disponibilité, son aide et son efficacité, concernant notamment des problèmes d'informatique.

Merci à mon fiancé, Jérôme, à mon frère, Amaury et à mes parents pour l'aide qu'ils m'ont apporté, notamment le jour de ma soutenance, pour l'organisation du pot. Et un énorme merci à Jérôme qui m'a supportée et soutenue pendant toute ma thèse.

Enfin, je salue chaleureusement tous ceux que j'ai côtoyés pendant ces trois ans au sein du laboratoire de Mathématiques Appliquées de Lyon et notamment les personnels, aussi bien administratifs que scientifiques. En particulier, je remercie Magali Ribot, Adrien Petrov, Thierry Dumont, Stéphane Genieys et les autres, pour la bonne ambiance qu'ils génèrent à Lyon 1 et pour les parties de billard.

Table des matières

Remerciements	3
Introduction	13
1 Introduction à la modélisation et à la simulation	23
1.1 Mise en équation de la phase gazeuse	25
1.1.1 Équations de bilan	26
1.1.2 Lois de comportement, propriétés de transport	27
1.1.3 Relations thermodynamiques	28
1.1.4 Relations de cinétique chimique	29
1.1.5 Équations des flammes isobares	30
1.2 Modèle cinétique du brouillard de gouttelettes	31
1.2.1 Équation de transport	31
1.2.2 Modèle d'évaporation	32
1.2.3 Modèle de traînée	35
1.2.4 Opérateur de collision menant à la coalescence	35
1.2.5 Opérateur de fragmentation	36
1.2.6 Termes sources	38
1.3 Modèles pour la résolution numérique de la phase liquide	38
1.3.1 Méthodes généralement utilisées	38
1.3.2 Modèles multi-fluides eulériens	40
1.4 Flammes de diffusion à contre-courant	42
1.4.1 Équations stationnaires 2D axisymétriques	43
1.4.2 Transformation de similarité	43
1.4.3 Code utilisé	44
1.5 Discussion du modèle semi-cinétique	48
2 Multi-fluid modeling of laminar poly-disperse spray flames	53
2.1 Introduction	54
2.2 General modeling of the problem	56
2.3 Modeling of the dispersed phase	58
2.3.1 First multi-fluid model: the sectional approach	59
2.3.2 Second multi-fluid model: the sampling	62
2.4 Restrictions associated to the sectional approach	65

2.4.1	Refinement of the droplet model, history terms	65
2.4.2	A case out of the validity limit	66
2.5	Spray counterflow diffusion flames	68
2.5.1	Modeling	68
2.5.2	Two flames, inlet conditions	69
2.5.3	Numerical Approach	70
2.5.4	Cost, influence of droplet models and validity of the assumptions	72
2.5.5	Results and Discussion	74
2.6	A 1D stationary case with no dynamical effect	78
2.7	Conclusion and perspectives	80
3	Computations and experiments	85
3.1	Introduction	86
3.2	Experimental Technique	88
3.3	General modeling of the coupled two-phase system	89
3.3.1	Modeling of the gaseous phase	89
3.3.2	Modeling of the dispersed phase	90
3.3.3	Droplet model	93
3.4	Numerical methods	94
3.5	Optimal discretization for both multi-fluid models	95
3.5.1	Fundamentals	95
3.5.2	Application to multi-fluid methods	98
3.6	Numerical comparisons	99
3.6.1	A 1D stationary case with pure vaporization	100
3.6.2	Heptane Flames	101
3.6.3	Influence of discretization on a methanol flame model	104
3.6.4	Cost	106
3.7	Comparison with experiments	106
3.8	Conclusion	108
3.9	Acknowledgements	109
4	Eulerian multi-fluid modeling for dense sprays	113
4.1	Introduction	114
4.2	Modeling of the spray at the kinetic level	116
4.2.1	Williams transport equation	116
4.2.2	Coalescence operator	116
4.3	Eulerian Multi-fluid Model	118
4.3.1	Semi-kinetic model	118
4.3.2	Eulerian multi-fluid model	119
4.4	Precalculation of the various coefficients	121
4.4.1	Precalculation of the coalescence collisional integrals : Algorithm	122
4.4.2	Precalculation of the vaporization coefficients and mean drag	125
4.5	Validation through a reference Lagrangian solver: the nozzle test-case	126

4.5.1	Definition of configuration	126
4.5.2	A reference Lagrangian solver	128
4.5.3	Characteristic computation parameters, reference solution	131
4.5.4	Eulerian solver, computational cost	131
4.5.5	Eulerian results for the monomodal test case	133
4.5.6	Eulerian Results for the bimodal test case	134
4.6	Discussion and Conclusion	136
4.7	Appendix I	139
4.8	Appendix II	140
5	Analyse numérique	143
5.1	Introduction	143
5.2	Modèle cinétique	144
5.3	Analyse Numérique de la méthode sectionnelle	145
5.3.1	Méthode sectionnelle pour la configuration étudiée	146
5.3.2	Ordre du schéma semi-discretisé	146
5.3.3	Théta-schéma : stabilité et positivité	151
5.3.4	Choix optimal de la discrétisation et de la forme de la distribution dans chaque section	153
5.4	Simulations instationnaires de la méthode sectionnelle	154
5.4.1	Configuration et Modèle cinétique	154
5.4.2	Schéma numérique	155
5.4.3	Résultats	156
5.5	Méthodes d'ordre supérieur	160
5.5.1	Méthode à m moments	160
5.6	Conclusion	165
5.7	ANNEXE	167
5.7.1	Introduction	168
5.7.2	Modèle cinétique et méthode multi-fluide Eulérienne pour la configuration étudiée .	169
5.7.3	Ordre du schéma semi-discretisé	170
5.7.4	Théta-schéma : stabilité et positivité	171
6	Propagation de flammes ; limite d'un Lewis infini	175
6.1	Introduction	175
6.2	Formulation du problème : cas d'une réaction d'ordre n	176
6.3	Degré topologique	178
6.3.1	Opérateurs et espaces	178
6.3.2	Opérateurs linéaires	178
6.3.3	Opérateur propre	180
6.3.4	Existence du degré topologique	180
6.3.5	Système de réaction-diffusion	181
6.3.6	Introduction du système perturbé	182
6.4	Estimations a priori	183
6.4.1	Résultats préliminaires	183

6.4.2	Monotonie	185
6.4.3	Estimations	186
6.5	Existence de solution pour le système perturbé	188
6.5.1	Réduction du système transformé	189
6.5.2	Définition du degré topologique	189
6.5.3	Estimations dans l'espace à poids et conclusion	190
6.6	Passages à la limite	194
6.6.1	Résultat préliminaire	194
6.6.2	Existence de solution pour le problème avec diffusion	194
6.6.3	Passage à la diffusion nulle	195
6.7	Généralisation à une chimie complexe	196
6.7.1	Formulation du problème	196
6.7.2	Changement de variables	197
6.7.3	Estimations a priori	198
6.7.4	Existence de solutions pour le système secondaire	199
6.7.5	Passages à la limite	200
6.8	Conclusion	200
6.9	ANNEXE	203
6.9.1	Introduction	204
6.9.2	Estimations a priori	206
6.9.3	Existence de solution du système (\mathcal{S}_{sec})	207
6.9.4	Passages à la limite	208
7	Propagation of plane polydispersed Spray Flames.	211
7.1	Introduction	212
7.2	Polydispersed spray flame model	213
7.2.1	Polydispersed spray flame	213
7.2.2	Solutions as mono-dimensional traveling waves	216
7.2.3	Use of a Eulerian multi-fluid model for the spray	219
7.2.4	Introducing turbulence and diffusion	220
7.3	Topological degree	222
7.3.1	General reaction-diffusion operator	223
7.3.2	Introduction of a perturbed system	223
7.4	A priori estimates	225
7.4.1	Preliminary lemmas	226
7.4.2	Monotonicity	227
7.4.3	General estimates	229
7.4.4	Behavior of solutions at infinity	232
7.5	Existence result for the system ($\mathcal{S}_{\zeta, \epsilon, r}$)	232
7.5.1	Existence and uniqueness for the transformed system	233
7.5.2	Estimates in the Hölder space	234
7.5.3	Definition of the topological degree	235
7.5.4	Estimates in the weighted Hölder space	236

7.5.5	Conclusion	240
7.6	Limits	241
7.6.1	Limit on the parameter r	241
7.6.2	Limit on the parameter ϵ	242
7.6.3	Limit on the diffusion coefficient	243
7.6.4	Limit on the number of sections	243
7.7	Conclusion	247
7.8	Acknowledgments	248
8	Conclusions et Perspectives	253
8.1	Conclusions	253
8.2	Perspectives	254
8.2.1	Modélisation des écoulements à inclusions dispersés - Calcul scientifique	254
8.2.2	Analyse numériques	254
8.2.3	Propagation de flammes	254
	Bibliographie Générale	257

Introduction

L'étude des phénomènes de combustion présente un grand intérêt pour la compréhension et l'amélioration de nombreuses applications industrielles comme les moteurs diesels, les fours industriels ou les moteurs fusées. C'est pourquoi de plus en plus de travaux leur sont consacrés, qui permettent déjà une bonne modélisation de la combustion des mélanges gazeux que ce soit pour des flammes laminaires ou turbulentes, des flammes de prémélange ou de diffusion (voir par exemple [Gio99a], [SG92], [VP97], [Bou02]). Plus récemment, des chercheurs se sont intéressés à des systèmes présentant également une phase liquide sous forme d'inclusions dispersées. Ces systèmes sont importants car, dans la plupart des applications industrielles, le combustible est stocké sous forme condensée et est injecté, dans la chambre de combustion, sous forme d'un brouillard de gouttelettes. La présence de cette phase liquide a une forte influence sur la structure et la dynamique de flamme, ainsi que sur le rendement d'un moteur ou sur la quantité de polluants produits, et ce, même si le brouillard de gouttelettes est dilué, c'est-à-dire, même si la fraction volumique de liquide est typiquement inférieure à 10^{-3} .

Les phénomènes mis en jeu sur ce type de configuration sont alors complexes : on peut citer, par exemple, l'évaporation des gouttelettes, la traînée, les collisions entre gouttelettes ou leur fragmentation, tous ces phénomènes étant couplés entre eux et avec la phase gazeuse et sa turbulence. D'autre part, des phénomènes instationnaires sont aussi présents, comme des instabilités de combustion dans les réacteurs LPP conçus par SNECMA qui mettent en jeu des flammes gazeuses de prémélange pauvres où un flash-back peut se produire [SNLP02]. Les essais expérimentaux et la simulation numérique apportent une compréhension physique de tous ces phénomènes à une échelle globale et sont les outils de base de la recherche industrielle. Cette compréhension repose sur une modélisation de l'ensemble des phénomènes élémentaires qui interviennent dans ces configurations réalistes. Il s'agit donc, dans un premier temps, d'isoler ces phénomènes élémentaires, d'en comprendre la physique et d'en donner des modèles pertinents.

Dans un second temps, des asymptotiques peuvent être envisagées pour mieux comprendre le comportement qualitatif du système. Par exemple, l'asymptotique des grandes énergies d'activation a fait l'objet d'une vaste littérature. L'étude mathématique de la structure des équations aux dérivées partielles correspondant au modèle est un préliminaire important de cette étape. Elle permet également d'apporter des informations fondamentales sur la qualité du modèle et sur des schémas numériques adaptés pour le simuler. Ces études qualitatives sont faites sur des modèles les plus simples possibles, qui prennent en compte les principaux aspects physiques. Ainsi, des phénomènes comme la propagation de flammes font l'objet d'études mathématiques. Pour des systèmes simplifiés, sans convection, ces flammes sont décrites par des ondes progressives pour un système de réaction-diffusion avec un modèle thermo-diffusif. L'existence et l'unicité de telles ondes ont déjà été démontrées dans le cas de flammes purement gazeuses en faisant appel à des méthodes de degré topologique (voir par exemple [VVV94], [Gio99b], [BNS83], [Mar85], [Bon95], [BBL93]). Leur stabilité a également été montrée (voir, par exemple [VVV94], [Roq92], [BLS94]). Cependant, ces études

sont peu avancées dans le cas de milieux hétérogènes et notamment sur la propagation de flamme en présence d'un brouillard de gouttes, où seul le cas monodispersé a été abordé [BD02]. La raison principale de cette situation est que les méthodes utilisées dans le cas homogène, comme les méthodes de degré topologique, s'appliquent mal à ce type de configurations, modélisé par un couplage fluide-cinétique. En effet, une dimension supplémentaire de l'espace des phases est alors introduite, celle des tailles de gouttes, dimension selon laquelle aucun phénomène de diffusion n'a lieu, les opérateurs n'étant alors plus elliptiques.

La première étape de ce travail de thèse est donc la modélisation détaillée de phénomènes élémentaires intervenant dans les flammes diphasiques, comme l'évaporation couplée à la dynamique des gouttelettes. Les phénomènes d'atomisation, se produisant en général près des injecteurs, ne sont pas pris en compte dans cette thèse où la phase liquide est supposée dispersée et décrite de manière statistique. Pour ce type de phénomènes, des modèles eulériens ont été développés dans [VBB02]. Afin d'isoler les phénomènes liés à l'évaporation et la traînée des gouttes, on s'intéresse essentiellement à des flammes laminaires. Cependant, le but est bien sûr de généraliser ensuite les modèles au cas de la turbulence [MLB⁺02], qui fait, parallèlement, l'objet d'études, publiés principalement dans la littérature physique [RV00], [RMV01], [KG97]. Un aspect important de ce type de flamme est la polydispersion du brouillard (c'est-à-dire la coexistence de gouttelettes de tailles différentes) qui influence fortement la structure de flamme lorsqu'on a affaire à un large spectre de tailles de gouttelettes [MKGS98].

La modélisation des brouillards de gouttelettes repose sur une description cinétique sous forme d'une fonction densité de probabilité à chaque instant, dépendant de la position, de la taille, de la vitesse et de la température des gouttelettes. L'évolution du brouillard est alors décrite par une équation de transport, de type Boltzmann, introduite par Williams en 1958 [Wil58]. La méthode la plus souvent utilisée pour résoudre numériquement ce problème est une méthode de discrétisation stochastique lagrangienne. Elle commence avec les travaux de O'Rourke [O'R81] et Dukowicz [Duk80] au début des années 80 et est actuellement utilisée en pratique dans de nombreux codes industriels ou semi-industriels (voir par exemple [AOB89], [Hyl99]). Il s'agit d'une discrétisation numérique, de type particulière, de l'équation de transport qui permet de résoudre l'évolution du brouillard. Elle pose le problème du couplage entre une méthode eulérienne de description pour la phase gazeuse et une description lagrangienne de la phase dispersée. D'autre part, elle s'avère très coûteuse pour traiter les problèmes instationnaires.

Pour diminuer les coûts de calculs, en particulier pour des problèmes instationnaires et générer des codes implicites et optimisés, des modèles eulériens semblent une solution appropriée. Des méthodes de moments, ou modèles bi-fluides, ont été introduites dans le cadre de la description de la dynamique de particules. Elles peuvent être obtenues, dans le cas dilué, à partir de l'équation de transport. Cependant, dans le cas de brouillards de gouttelettes, l'inertie et donc la dynamique de chaque goutte dépend de manière essentielle de sa taille. Les méthodes de moments sont donc trop imprécises pour décrire une structure de flamme puisque l'on s'en tient à une description "en moyenne" de la granulométrie du brouillard. On peut alors prendre des moments en vitesse et considérer plusieurs échantillons dans l'espace des phases en taille [DS97], mais cela ne permet ni de traiter correctement les interactions des gouttes entre elles, ni de décrire précisément le couplage entre la dynamique du brouillard polydispersé et son évaporation.

L'idée consiste alors à considérer une approche alternative dite multi-fluides eulérienne qui consiste en une méthode de moments pour certaines variables de l'espace des phases, correspondant à la vitesse et la température des gouttes, tandis qu'une discrétisation type volumes finis est introduite pour la variable de taille des gouttes. Elle permet de conserver le maximum d'informations sur la granulométrie du brouillard

tout en préservant l'avantage d'un coût raisonnable des méthodes eulériennes. Elle nous sert également dans des études théorique sur l'existence d'onde progressive décrivant la propagation de flammes diphasiques. Enfin, cette méthode fait l'objet d'études dans le cadre d'un projet "recherche aéronautique sur le supersonique" [MLB⁺02] du Réseau de Recherche et d'Innovation Technologique, le but final étant de réaliser des simulations aux grandes échelles de flammes turbulentes instationnaires. Mais les applications possibles ne se limitent pas à la combustion en présence d'un brouillard de gouttes. Elles s'étendent aussi aux domaines de la propulsion solide, comme par exemple les réacteurs d'Ariane V, où des particules d'alumine forment la phase solide dispersée [Hy199]. Un modèle eulérien, tenant compte des différentes tailles de particules et capable de décrire les interactions entre particules présenterait encore une alternative avantageuse, surtout dans des configurations instationnaires, aux méthodes lagrangiennes actuellement utilisées [Gue01]. Dans le même ordre d'idée, d'autres applications sont en vue, comme l'étude de la formation des planètes dans les disques de turbulence stellaire [Cha00].

Cette thèse est consacrée, tout d'abord, à la mise en place de ces méthodes multi-fluides eulériennes, à leur simulation et leur validation par comparaisons expérimentales et numériques sur des cas test. Il est également indispensable de réaliser l'analyse numérique de la discrétisation dans l'espace des phases en taille, au moins sur des cas simplifiés ne prenant en compte que l'évaporation, afin d'étendre ce type d'approches à l'ordre élevé. Enfin, ces méthodes permettent des études théoriques sur la propagation de flammes dans les milieux hétérogènes. Détaillons les différentes étapes de ce travail.

Le premier chapitre est une introduction, en français, aux chapitres 2, 3 et 4 qui sont rédigés en anglais, sous forme d'articles publiés ou soumis. Il s'agit de présenter la problématique liée à la modélisation des flammes laminares diphasiques, problématique qui sera traitée dans les chapitres suivants. On y détaille la modélisation de flammes diphasiques et laminares, modélisation qui passe par une description précise de chacune des phases. Pour la phase gazeuse, il s'agit de considérer une chimie complexe, un transport détaillé et de décrire les échanges avec le liquide. On utilise donc les équations des flammes isobares [Gio99a], dérivées des équations de Navier-Stokes multi-espèces réactif [GM98], [Gio99a] sous l'hypothèse des faibles nombres de Mach, avec des conditions aux limites de pression constante. La phase liquide occupe un volume suffisamment faible pour que son influence sur le gaz soit bien décrite au travers de termes sources ajoutés à ces équations. Les termes décrivant le transport et la chimie sont alors détaillés.

Pour la phase liquide, il importe de bien décrire l'aspect polydispersé du brouillard de gouttes (large spectre de tailles de gouttes) qui influence la structure de flamme [MKGS98], mais aussi de décrire l'évaporation, le chauffage et la traînée des gouttes. On donne donc le modèle cinétique, en détaillant des modèles d'évaporation, de traînée, de coalescence et de fragmentation des gouttes. Les termes sources pour la phase gazeuse peuvent alors être évalués. Des modèles lagrangien ou eulérien ont été développés pour résoudre numériquement l'équation cinétique. Cependant, leur coût dans certaines situations ou leur imprécision nous amène à envisager des modèles eulériens plus précis : les méthodes multi-fluides eulériennes dont nous donnons, dans ce chapitre, les grandes lignes.

Une configuration particulière intéressante pour valider expérimentalement mais aussi numériquement ces modèles est la flamme de diffusion à contre-courant stationnaire [MKGS98], [GDS⁺96]. En effet, celle-ci fait l'objet de mesures expérimentales au Center for Combustion Studies de Yale University. De plus, ce cas se ramène à un cas monodimensionnel et permet des simulations détaillées. On peut ainsi utiliser les méthodes numériques spécialement développées pour la combustion en phase gazeuse avec une chimie

complexe et un transport détaillé (itération pseudo-instationnaire, méthodes de Newton amorties pour les systèmes mal conditionnés, bibliothèques optimisées d'évaluation de coefficients de transport et des taux de production chimique) [SCSG90].

On se consacre ensuite plus particulièrement à la modélisation de la phase liquide et, surtout, de son aspect polydispersé.

Le chapitre 2 est consacré aux modèles multi-fluides eulériens pour la phase liquide. Tambour et al. ont proposé et formalisé un premier modèle complètement eulérien qu'ils ont appelé l'approche sectionnelle [GAT86]. L'idée est de considérer la phase liquide comme un ensemble de milieux continus, les "fluides", chaque fluide correspondant à une moyenne statistique effectuée entre deux tailles de gouttes fixées, la section. Le fluide est alors gouverné par les équations de conservation de masse, de quantité de mouvement et d'enthalpie. Les calculs des différents termes d'échanges entre sections ou avec le gaz se font alors via le choix de la forme de la fonction de distribution dans chaque section, cette forme étant supposée invariante au cours du calcul. Greenberg et al. [GST93] ont tenté de faire le lien entre cette méthode et la description cinétique du spray. Cependant, ils n'ont jamais mené à terme l'obtention de ces équations multi-fluides à partir de l'approche cinétique, ni identifié les hypothèses sous-jacentes au modèle, ni enfin comparé ce type de modèle aux méthodes classiques d'échantillonnage.

Dans ce deuxième chapitre, nous présentons un cadre rigoureux d'hypothèses permettant l'obtention des équations de conservation de l'approche sectionnelle à partir du modèle cinétique. L'hypothèse importante est qu'en chaque endroit et à chaque instant, les gouttes de même taille sont caractérisée par une seule vitesse et une seule température. On montre, sur un cas test peu réaliste, que cette hypothèse peut être restrictive, l'approche sectionnelle ne permettant alors pas de décrire les couplages entre la dynamique des gouttes et leur évaporation. Dans le domaine d'application de l'approche sectionnelle, des comparaisons numériques avec une méthode eulérienne d'échantillonnage sont réalisées dans le cas réaliste d'une flamme de diffusion à contre-courant.

On constate alors que, si l'on raffine suffisamment la discrétisation de la fonction de distribution des gouttes en terme de taille, les deux méthodes (sectionnelle et échantillonnage) donnent des résultats similaires excepté pour le rayon de Sauter moyen (rapport entre le volume moyen et la surface moyenne des gouttes), surestimé par l'approche sectionnelle. Les comparaisons ont alors été effectuées dans le cadre d'un problème plus simple, purement 1D, sans effet dynamique ni thermique. Il s'agit de l'évaporation d'un spray polydispersé dans un gaz chaud, où les gouttes sont injectées à la température de saturation. Alors, la fonction de distribution du spray vérifie une équation d'advection à vitesse constante dans l'espace des phases et on dispose donc d'une solution analytique. On montre que la méthode d'échantillonnage est plus précise que la méthode sectionnelle ; elle génère cependant des oscillations dues intrinsèquement à la représentation d'une fonction continue par une somme de masses de Dirac. D'autre part, il apparaît que le choix de la forme de la fonction de distribution dans chaque section (constante en rayon, surface ou volume) est arbitraire, contrairement à ce qui a été écrit dans [GST93], [Dom01]. Ce point sera traité dans le chapitre 5, grâce à l'analyse numérique de la méthode.

Le chapitre 3 est consacré aux comparaisons expérimentales et à la réduction du nombre de degrés de liberté. En collaboration avec l'équipe du Center for Combustion Studies de Yale University, on propose une amélioration de l'approche sectionnelle permettant une diminution du nombre de variables ainsi que des comparaisons avec les données expérimentales. Cette diminution du nombre de variables est essentielle pour aller vers une application du modèle à des problèmes multi-dimensionnels.

Les comparaisons numériques du chapitre précédent semblent montrer que l'approche sectionnelle décrit mal l'évaporation des grosses gouttes. D'autre part, des comparaisons entre l'approche sectionnelle et des mesures expérimentales [GDS⁺96], [MKGS98] ont déjà été menées sur les flammes de diffusion à contre-courant. Elles montrent que même si la structure de flamme est bien décrite, l'approche sectionnelle sous-estime l'évaporation des grosses gouttes par rapport aux mesures expérimentales. Ceci est dû à l'approche sectionnelle elle-même, mais aussi aux faibles statistiques pour la queue de la fonction de distribution expérimentale, surtout près du front d'évaporation (il y a peu de grosses gouttes, mais elles apportent chacune une quantité non négligeable de masse).

Dans ce chapitre, le but est donc d'améliorer la description expérimentale, mais aussi la modélisation de la fonction de distribution des gouttes. D'un point de vue expérimental, un effort particulier a été fait sur les mesures afin d'obtenir des statistiques de grande qualité et une information complète sur la fonction de distribution de masse en fonction de la taille des gouttes. Un aspect important de ce travail était de déterminer le comportement de la queue de la fonction de distribution : on constate que la fonction de distribution décroît de manière exponentielle en fonction de la surface des gouttes, à partir d'une certaine taille de goutte. De plus, cette forme reste quasiment la même tout au long de l'évaporation. Cette constatation permet de traiter l'ensemble des tailles de gouttes, sans limite supérieure, évitant ainsi le problème de conditions aux limites, problème qui se pose pour la considération de la coalescence des gouttes (cf chapitre 4). D'autre part, cela permet de bien évaluer la quantité de masse initiale pour chaque section ou chaque groupe de gouttes dans les simulations avec la méthode sectionnelle et la méthode d'échantillonnage. On peut alors comparer les simulations aux expériences. Enfin, la connaissance précise du comportement de la fonction de distribution continue permet, pour l'approche sectionnelle, un bon choix de la position des sections et de la forme de la fonction de distribution modélisée. Cela entraîne une réduction significative du nombre d'inconnues (et donc, du temps de calcul) et ce, avec une précision équivalente : on passe de 30 à seulement 6 sections, pour une même précision. Finalement, les comparaisons entre les simulations pour les deux modèles de la phase liquide et les mesures expérimentales donnent d'excellents résultats, ce qui permet de valider les modèles.

Le chapitre 4 est consacré à la généralisation du modèle aux brouillards denses. En effet, dans les précédents chapitres, les brouillards de gouttes considérés sont dilués et on peut négliger les collisions entre les gouttes. Dans les brouillards denses qui voient un différentiel de vitesse raisonnable avec le milieu gazeux environnant, le spectre de taille de gouttes évolue du fait de la coalescence. La modélisation de ces termes fait intervenir de manière cruciale, pour les gouttes qui possèdent une certaine inertie, la vitesse relative des partenaires de collision. Dans une note [MV01] M. Massot et P. Villedieu (ONERA, Centre de Toulouse) justifient, à partir du modèle cinétique, un modèle multi-fluides eulérien qui prend en compte la dépendance des efficacités de collision en la vitesse relative des particules. Cette justification complète du modèle repose notamment sur les hypothèses faites dans le chapitre 3 sur la queue de la fonction de distribution du brouillard qui permet de traiter l'ensemble des tailles de gouttes.

Cela suggère une méthode numérique où toutes les intégrales de collision, d'apparition et de disparition par coalescence sont calculées dans un pré-traitement, une fois pour toutes. C'est ce qui est développé dans ce chapitre. Le modèle et le pré-traitement y sont détaillés. De plus, ce genre de méthode multi-fluides eulérienne y est comparé aux algorithmes stochastiques lagrangiens utilisés, par exemple, dans les codes de l'ONERA [VH97]. Pour cela, on a réalisé l'algorithme permettant d'effectuer le pré-traitement et implémenté le modèle avec coalescence dans le code existant. D'autre part, deux cas tests de comparaison ont été définis, sur des configurations de tuyère. Ils permettent de valider la méthode multi-fluides eulérienne dans

le cas de sprays denses. On obtient ainsi, pour la première fois, un modèle eulérien capable de décrire des interactions entre gouttes.

Le chapitre 5 est consacré à l'analyse numérique des méthodes multi-fluides eulériennes. En effet, ces méthodes ont été validées dans des cas particuliers par des comparaisons numériques ou expérimentales dans les chapitres précédents. Le chapitre 3 donne également un moyen de discrétiser la fonction de distribution avec un petit nombre de sections, afin d'avoir une bonne précision à faible coût. Cependant, ni la précision de ces méthodes, ni le choix de la discrétisation suivant la variable de taille des gouttelettes ou la forme de la fonction de distribution dans chaque section n'ont été discutés dans le cas général, lorsque l'on augmente le nombre de sections. C'est pourquoi il était important de réaliser leur analyse numérique.

Un aspect essentiel que doivent décrire les méthodes multi-fluides eulériennes est l'évaporation des gouttelettes : il est important de comprendre comment elle agit sur la masse de fuel en phase vapeur. Pour mieux isoler ses effets, on considère donc la configuration, déjà introduite dans [Dom01] et dans le chapitre 2, d'un écoulement 1D, stationnaire, sans effet dynamique ni thermique : l'évaporation d'un spray poly-dispersé dans un gaz chaud où les gouttelettes sont injectées à la température d'équilibre. L'espace des phases se réduit alors à la position et la taille des gouttes et la fonction de distribution des gouttes vérifie une équation d'advection à vitesse constante dont on connaît une solution analytique. Dans ce cas simplifié, et moyennant une hypothèse de régularité de la fonction de distribution, on montre que le schéma correspondant à la méthode sectionnelle est d'ordre 1, moyennant une compatibilité entre la variable (rayon, surface, volume des gouttelettes...) en laquelle la répartition des sections est choisie uniforme et celle en laquelle la fonction de distribution approchée est choisie constante dans chaque section. D'autre part, les conditions CFL nécessaires à la stabilité du θ -schéma pour la discrétisation en espace ainsi que la positivité des variables sont précisées. Cette étude nous a permis de conclure que le 'bon choix' de discrétisation (meilleur compromis entre précision, stabilité et positivité) est une discrétisation uniforme en surface et une distribution choisie constante en rayon.

Elle nous a ensuite menés à définir d'autres méthodes multi-fluides eulériennes d'ordre plus élevé, qui conservent les avantages de l'approche sectionnelle. Le principe est alors de considérer non plus directement la densité massique pour chaque section, mais des moments en surface pour chaque section. La fonction de distribution du spray est alors approchée à partir de ces moments (elle est prise polynômiale dans chaque section) et la masse est calculée à partir de cette distribution approchée. Dans le cas d'une fonction de distribution régulière, on aboutit à des méthodes d'ordres arbitrairement élevés, toujours dans une configuration 1D sans effet dynamique ni thermique. On s'intéresse alors plus particulièrement à la méthode d'ordre 2. Il s'agit de l'adapter de sorte qu'elle respecte le principe du maximum discret.

Cette analyse nous permet de considérer la propagation de flammes en présence d'un spray polydispersé. Cette configuration est décrite par un système de réaction-diffusion pour un modèle thermo-diffusif du gaz, couplé au modèle cinétique du spray, le couplage s'effectuant au travers d'un terme source de combustible dans les équations du gaz et au travers du terme d'évaporation dans l'équation du liquide. Les flammes qui se propagent sont alors décrites par des ondes progressives du système complet. L'existence de telles ondes a été démontrée dans le cas purement gazeux, dans [BNS83] pour une chimie simple, dans [VVV94] pour un système de réactions irréversibles, formant un graphe ouvert et dans [Gio99b] pour une chimie complexe formée de réactions réversibles et avec un transport détaillé. Les démonstrations utilisent des méthodes de degré topologique : le degré de Leray-Schauder pour [BNS83] et [Gio99b] ou un degré topologique pour des opérateurs elliptiques dans des domaines non bornés dans [VVV94].

Cependant, ces méthodes s'adaptent mal au cas diphasique. En effet, le système obtenu est un couplage d'équations différentielles ordinaires pour la phase gazeuse avec une équation aux dérivées partielles pour la phase liquide, à cause de la présence de la variable de taille des gouttes. Une discrétisation par une méthode multi-fluides eulérienne permet de résoudre ce problème puisque l'on passe d'une équation aux dérivées partielles à un système dynamique d'équations différentielles ordinaires. Mais, à cause de l'absence de diffusion de la phase liquide, les opérateurs ne sont pas elliptiques. L'idée est alors de rajouter une diffusion que l'on fait tendre ensuite vers 0.

Avant d'étudier la propagation de flammes diphasiques, une première étape, traitée dans le chapitre 6, est le passage à la limite d'une diffusion nulle, sur une configuration plus simple de flamme gazeuse. On rejoint alors des études sur les ondes progressives dans des milieux condensés [LL96]. Un problème qui se pose dans ces conditions est la continuité de l'onde lors de ce passage à la limite.

On commence par démontrer une nouvelle fois l'existence d'ondes pour le système avec diffusion en utilisant une nouvelle méthode, basée sur un ajout de petits termes et sur la définition du degré topologique pour des opérateurs elliptiques dans des domaines non bornés [VVC99]. D'autre part, on montre que l'on peut passer à la limite quand le coefficient de diffusion tend vers 0 et qu'on obtient ainsi une solution pour le système sans diffusion faisant aussi le lien entre les ondes progressives des deux types de systèmes.

Le chapitre 7 est alors consacré à la démonstration l'existence de la propagation de flammes planes, en présence d'un brouillard de gouttes polydispersé. Pour éviter les problèmes liés au nombre infini de taille de gouttelettes, on introduit une discrétisation de la fonction de distribution : une méthode multi-fluides eulérienne. On a vu au chapitre 5 que cette méthode est d'ordre 1 et l'on pourra ainsi passer à la limite sur le nombre de sections pour retrouver le modèle cinétique.

Les méthodes utilisées sont alors les mêmes que dans le chapitre précédent : on introduit une diffusion sur les gouttelettes (qui peut s'interpréter comme une légère agitation due à de la turbulence), on ajoute des petits termes supplémentaires bien choisis et on utilise une méthode de degré topologique. Ainsi, dans le cas d'un nombre de Lewis supérieur à $1 + p$ où p est un réel non négatif lié à la forme de la fraction de vapeur saturante et à la température des gaz froids, on montre l'existence d'ondes. Ce résultat ouvre sur des perspectives d'études de propriétés qualitatives de telles flammes, comme des études de stabilité. Il amène également à des études asymptotiques, dans la limite des hautes énergies d'activation.

Les travaux présentés dans ce mémoire ont été menés dans le cadre de cinq projets financés :

- *Bonus Qualité Recherche de l'Université Claude Bernard Lyon 1 2001-2002 ("Modélisation des milieux réactifs : Interaction des Mathématiques avec Biologie, Chimie et Physique" ; coordonnateur scientifique : M. Massot ; responsables scientifiques : S. Génieys, M. Massot et V. Volpert)*
- *Abondement ANVAR ("Modélisation des Milieux réactifs : Interaction des Mathématiques avec Chimie et Physique" ; responsable : M. Massot),*
- *Projet Supersonique 2001-2003 (Second Appel à Proposition "Recherche aéronautique sur le supersonique", Réseau de Recherche et d'Innovation Technologique, Ministère de la Recherche ; responsable : M. Massot),*
- *Projet Jeunes CNRS (responsables : M. Massot et V. Volpert) "Modélisation mathématique et numérique des milieux réactifs" (1999-2001),*
- *Bourse OTAN (Collaborative Research Grant CRG972212, project coordinator : M. Massot, 1998-2001) rassemblant le "Center for Combustion Studies" de Yale University, USA, le Centre de Math. Appli. de l'Ecole Polytechnique et MAPLY sur le sujet "Laminar spray diffusion flames : Modelling, Computations and Experiments".*

Bibliographie

- [AOB89] A.A. Amsden, P. J. O'Rourke, and T. D. Butler. Kiva II, a computer program for chemically reactive flows with sprays. Technical Report LA-11560-MS, Report Los Alamos National Laboratory, Los Alamos, New Mexico, 1989.
- [BBL93] Henri Berestycki, Alexis Bonnet, and Bernard Larrouturou. Unicité des flammes planes en chimie complexe. *C. R. Acad. Sci. Paris Sér. I Math.*, 317(12) :1185–1190, 1993.
- [BD02] P. Berthouaud and K. Domelevo. Existence et stabilité d'ondes planes pour un système de combustion diphasique monodimensionnel. prépublication 18, MIP UMR 5640, Toulouse, 2002.
- [BLS94] A. Bonnet, B. Larrouturou, and L. Sainsaulieu. Sur la stabilité des flammes planes stationnaires dans un cas de solutions multiples lorsque le nombre de Lewis est inférieur à 1. In *Les grands systèmes des sciences et de la technologie*, pages 107–118. Masson, Paris, 1994.
- [BNS83] Henri Berestycki, Basil Nicolaenko, and Bruno Scheurer. Traveling wave solutions to reaction-diffusion systems modeling combustion. In *Nonlinear partial differential equations (Durham, N.H., 1982)*, pages 189–208. Amer. Math. Soc., Providence, R.I., 1983.
- [Bon95] Alexis Bonnet. Non-uniqueness for flame propagation when the Lewis number is less than 1. *European J. Appl. Math.*, 6(4) :287–306, 1995.
- [Bou02] Joan Boulanger. *Caractérisation de l'extrémité d'une flamme de diffusion. Analyse asymptotique et simulation directe de la combustion partiellement prémélangée*. PhD thesis, Laboratoire de Mécanique des Fluides Numérique, UMR 6614 CNRS CORIA, 2002.
- [Cha00] P. H. Chavanis. Trapping of dust by coherent vortices in the solar nebula. *Astron. Astrophys.*, 356 :1089–1111, 2000.
- [Dom01] K. Domelevo. The kinetic sectional approach for noncolliding evaporating sprays. *Atomization and Sprays*, 11 :291–303, 2001.
- [DS97] K. Domelevo and L. Sainsaulieu. A numerical method for the computation of the dispersion of a cloud of particles by a turbulent gas flow field. *J. Comput. Phys.*, 133(2) :256–278, 1997.
- [Duk80] John K. Dukowicz. A particle-fluid numerical model for liquid sprays. *J. Comput. Phys.*, 35(2) :229–253, 1980.
- [GAT86] J.B. Greenberg, D. Albagli, and Y. Tambour. An opposed jet quasi-monodisperse spray diffusion flame. *Combust. Sci. Technol.*, 50 :255–270, 1986.
- [GDS⁺96] L. P. Gao, Y. D'Angelo, I. Silverman, A. Gomez, and M. D. Smooke. Quantitative comparison of detailed numerical computations and experiments in counterflow spray diffusion flames.

- In *Proceedings of the 26th Symp. (International) on Combustion, The Comb. Institute*, pages 1739–1746, 1996.
- [Gio99a] Vincent Giovangigli. *Multicomponent flow modeling*. Birkhäuser Boston Inc., Boston, MA, 1999.
- [Gio99b] Vincent Giovangigli. Plane laminar flames with multicomponent transport and complex chemistry. *Math. Models Methods Appl. Sci.*, 9(3) :337–378, 1999.
- [GM98] Vincent Giovangigli and Marc Massot. Asymptotic stability of equilibrium states for multicomponent reactive flows. *Math. Models Methods Appl. Sci.*, 8(2) :251–297, 1998.
- [GST93] J.B. Greenberg, I. Silverman, and Y. Tambour. On the origin of spray sectional conservation equations. *Combustion and Flame*, 93 :90–96, 1993.
- [Gue01] J. F. Guery. Simulation eulérienne des écoulements diphasiques dans les moteurs à propergol solide. In *Modélisation Numérique de Brouillards Polydispersés*, Dec. 2001.
- [Hyl99] J. Hylkema. *Modélisation cinétique et simulation numérique d'un brouillard dense de gouttelettes. Application aux propulseurs à poudre*. PhD thesis, ENSAE, 1999.
- [KG97] A. Kalma and J. B. Greenberg. Special features of the combustion of a propagating flame in a polydisperse fuel spray cloud. *International Journal of Turbo and Jet Engines*, 14 :201–216, 1997.
- [LL96] Elisabeth Logak and Vincent Loubeau. Travelling wave solutions to a condensed phase combustion model. *Asymptotic Anal.*, 12(4) :259–294, 1996.
- [Mar85] Martine Marion. Qualitative properties of a nonlinear system for laminar flames without ignition temperature. *Nonlinear Anal.*, 9(11) :1269–1292, 1985.
- [MKGS98] M. Massot, M. Kumar, A. Gomez, and M. D. Smooke. Counterflow spray diffusion flames of heptane : computations and experiments. In *Proceedings of the 27th Symp. (International) on Combustion, The Comb. Institute*, pages 1975–1983, 1998.
- [MLB⁺02] M. Massot, F. Laurent, J.-P. Bertoglio, M. Lance, J.-L. Marié, and L. Shao. Modélisation des couplages "dynamiques de gouttes/évaporation" pour la prédiction des champs de concentration en combustion diphasique polydispersée. In *Recherche Aéronautique sur le Supersonique, 1er Colloque National*, pages 227–232, 2002.
- [MV01] Marc Massot and Philippe Villedieu. Modélisation multi-fluide eulérienne pour la simulation de brouillards denses polydispersés. *C. R. Acad. Sci. Paris Sér. I Math.*, 332(9) :869–874, 2001.
- [O'R81] P. J. O'Rourke. *Collective drop effects on vaporizing liquid sprays*. PhD thesis, Los Alamos National Laboratory 87545, University of Princeton, 1981.
- [RMV01] J. Réveillon, M. Massot, and L. Vervisch. Direct numerical simulation of turbulent sprays. In *Proceedings of the workshop : Trends in Numerical and Physical Modeling for Industrial Multiphase Flows*, Sept. 2001.
- [Roq92] Jean-Michel Roquejoffre. Stability of travelling fronts in a model for flame propagation. II. Nonlinear stability. *Arch. Rational Mech. Anal.*, 117(2) :119–153, 1992.
- [RV00] J. Réveillon and L. Vervisch. Spray vaporization in nonpremixed turbulent combustion modeling : a single droplet model. *Combustion and Flame*, 121 :75–90, 2000.

- [SCSG90] M. D. Smooke, J. Crump, K. Seshadri, and V. Giovangigli. Comparison between experimental measurements and numerical calculations of the structure of counterflow, diluted, methane-air, premixed flames. In *Proceedings of the 23rd Symp. (International) on Combustion, The Comb. Institute*, pages 503–511, 1990.
- [SG92] M. D. Smooke and V. Giovangigli. Numerical modeling of axisymmetric laminar diffusion flames. *Impact Comput. Sci. Eng.*, 4(1) :46–79, 1992.
- [SNLP02] Y. Sommerer, F. Nicoud, J. P. L egier, and T. Poinso. Simulations aux grandes  echelles de la combustion instationnaire dans les syst emes partiellement pr em elangs pauvres. In *Recherche A eronautique sur le Supersonique, 1er Colloque National*, pages 71–78, 2002.
- [VBB02] A. Vallet, A. A. Burluka, and R. Borghi. Development of an Eulerian model for the "atomization" of a liquid jet. Technical report, Coria, Universit e de Rouen, 2002.
- [VH97] Philippe Villedieu and Jouke Hylkema. Une m ethode particulaire al eatoire reposant sur une  equation cin etique pour la simulation num erique des sprays denses de gouttelettes liquides. *C. R. Acad. Sci. Paris S er. I Math.*, 325(3) :323–328, 1997.
- [VP97] D. Veynante and T. Poinso. Reynolds averaged and large eddy simulation modeling for turbulent combustion. In *New tools in turbulence modelling (Les Houches, 1996)*, pages 105–140. Springer, Berlin, 1997.
- [VVC99] V. A. Volpert, A. I. Volpert, and J. F. Collet. Topological degree for elliptic operators in unbounded cylinders. *Adv. Differential Equations*, 4(6) :777–812, 1999.
- [VVV94] Aizik I. Volpert, Vitaly A. Volpert, and Vladimir A. Volpert. *Traveling wave solutions of parabolic systems*. American Mathematical Society, Providence, RI, 1994. Translated from the Russian manuscript by James F. Heyda.
- [Wil58] F.A. Williams. Spray combustion and atomization. *Phys. Fluids*, 1 :541–545, 1958.

Chapitre 1

Introduction à la modélisation et à la simulation de flammes diphasiques laminaires

Dans la plupart des applications industrielles de la combustion, comme les moteurs diesels, les fours industriels ou les moteurs fusée, les combustibles sont stockés sous forme condensée et sont injectés dans la chambre de combustion, sous forme d'un brouillard de gouttelettes (appelé aussi spray). Le milieu est alors constitué d'une phase gazeuse continue (la phase porteuse) dans laquelle se trouve une phase liquide discontinue formée de gouttelettes (la phase dispersée). Ceci est encore vrai dans le cadre des particules d'alumine dans les Boosters de la fusée Ariane [Hyl99] où le spray est constitué de particules de tailles très différentes et où la coalescence des particules joue un rôle important dans la modélisation de la flaque d'alumine dans le fond du Booster.

Un aspect fondamental de ce type d'écoulement est que la fraction volumique α_l de la phase liquide est très petite, sans que sa fraction massique soit négligeable. En effet, pour les hydrocarbures par exemple, la masse volumique de la phase liquide étant très grande par rapport à celle du gaz (avec un rapport d'environ 10^3), même lorsqu'on se trouve aux proportions stœchiométriques, le volume occupé par le gaz est bien plus important que celui de la phase liquide. La valeur de α_l définit les différents types de sprays [O'R81] : par exemple, s'il est de l'ordre de 10^{-4} , on a affaire à un spray dilué (thin spray) et s'il est de l'ordre de 10^{-2} , on a affaire à un spray dense (thick spray). Dans tous les cas, la présence de cette phase liquide a une forte influence sur la structure de la flamme ou de l'écoulement et doit être prise en compte dans la modélisation.

Dans le but de comprendre les paramètres physiques importants pour la description de flammes diphasiques ou de manière plus générale pour la description d'écoulement diphasiques à inclusions dispersées, nous avons pris le parti de commencer par étudier et modéliser de manière détaillée des écoulements laminaires. Cela permet d'isoler les difficultés liées à la modélisation de la turbulence dans un premier temps. L'extension des travaux présentés dans ce mémoire au cas turbulent est en cours [RMV01], [MLB⁺02], [RM02]. Le cadre des écoulements laminaires reste physiquement très riche : des interactions variées subsistent, la plus importante pour les flammes homogènes que nous considérons, étant l'interaction entre gouttes et flammes à travers le processus de vaporisation couplé à la dynamique et au chauffage des gouttelettes. Mais nous voulons aussi pouvoir décrire tant les interactions de gouttes à travers le phénomène de coalescence que leur fragmentation ou l'interaction goutte-paroi, phénomènes dont nous avons géné-

ralement des modèles à un niveau cinétique de description. On constate alors qu'un aspect important des brouillards considérés est leur polydispersion, c'est-à-dire la présence d'un large spectre de tailles de goutte, qui influence fortement la structure de flamme [MKGS98]. Cet aspect sera d'autant plus important dans des configurations turbulentes comme on peut le constater dans [ML01]. Finalement, il s'agit de proposer une alternative, de moindre coût en terme de résolution, aux discrétisations particulières pour des configurations instationnaires qui sont monnaie courante dans les applications industrielles [SNLP02].

Le but de la première partie de ce mémoire se dégage alors clairement. Il s'agit mettre en place un modèle décrivant un mélange gazeux multi-espèces transportant un spray polydispersé avec un modèle eulérien tant pour la phase gazeuse que pour la phase dispersée selon quatre critères : décrire aussi précisément que possible la granulométrie du brouillard, préserver le lien avec le niveau cinétique de description, modéliser les interactions de gouttes et enfin être capable de reproduire des phénomènes instationnaires. L'ensemble de ces travaux représente trois articles publiés ou soumis dans des journaux internationaux qui seront reproduits dans les chapitres 2, 3 et 4. Ce chapitre 1 donne une introduction générale à l'ensemble de ces travaux. Nous reprenons brièvement les problématiques abordées avant d'entrer dans le détail.

On considère les équations de conservation pour un écoulement gazeux multi-espèces réactif [GM98], [Gio99], dans l'approximation des faibles nombres de Mach pour une flamme non confinée avec des conditions aux limites de pression constante, ce qui nous mène aux équations des flammes isobares [Gio99]. Comme le brouillard de gouttes forme une phase dispersée, le couplage entre les phases se traduit uniquement par des termes sources décrivant les échanges de masse, de quantité de mouvement et de chaleur entre les deux phases (voir la Figure 1.1). C'est grâce à une modélisation de la phase liquide que pourront être exprimés ces termes sources.

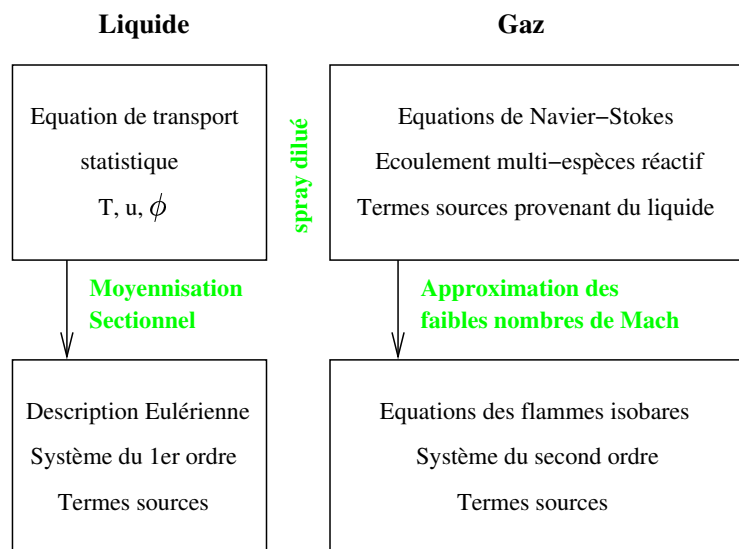


FIG. 1.1 – Schéma de la mise en équation

Le modèle de base pour le brouillard de gouttelettes est le modèle cinétique : le brouillard est décrit par sa fonction densité de probabilité (aussi appelée fonction de distribution) satisfaisant une équation de type Boltzmann [Wil58], [Wil85]. Cette équation n'est généralement pas résolue directement, ce qui serait trop coûteux et souvent inutile. Différentes méthodes sont possibles. Parmi elles figurent les modèles multi-

fluides eulériens : la phase dispersée est décrite comme un ensemble de milieux continus : les “fluides”, chaque “fluide” correspondant à une moyenne statistique entre deux tailles de gouttes fixée (cet intervalle est appelé section, d’où le nom de méthode sectionnelle donné à ce modèle par Tambour et al. qui l’ont introduit [GAT86]). Ce modèle sera dérivé de manière rigoureuse à partir du niveau cinétique dans le chapitre 2 pour les sprays dilués et dans le chapitre 4 pour des sprays denses où la coalescence des gouttes doit être prise en compte. Nous verrons que ce modèle répond aux critères énoncés plus haut.

Afin de valider ce type de modèle, on utilise une réalisation expérimentale d’un type particulier de flamme laminaire : les flammes de diffusion à contre-courant stationnaires. Le dispositif expérimental a été mis au point par A. Gomez et V. Santoro au Center for Combustion Studies de Yale University. Ce cas est intéressant car il se ramène à un cas 1D ; il peut ainsi faire l’objet un ensemble de simulations détaillées et permet d’envisager des comparaisons quantitatives avec des mesures expérimentales. Les comparaisons entre les simulations et les mesures expérimentales sur ce type de flammes et pour des variables significatives sont faites dans le chapitre 3.

Après avoir présenté, dans une première partie, les équations de la phase gazeuse, pour une chimie complexe et un transport détaillé, et sous l’hypothèse des faibles nombres de Mach, on donne le modèle cinétique pour le brouillard de gouttes. Dans une troisième partie, on présente les différents modèles de résolution numérique pour la phase liquide et en particulier, les modèles multi-fluides eulériens. On s’intéresse alors au cas particulier des flammes de diffusion à contre-courant stationnaires. Le modèle est détaillé dans la partie 4 et le code dans la partie 5. Cela permet d’introduire le chapitre 3 où sera menée la validation du modèle multi-fluides eulérien par comparaisons avec les mesures expérimentales et la réduction du nombre de degrés de liberté pour décrire la polydispersion en taille des brouillards.

1.1 Mise en équation de la phase gazeuse

On considère une description eulérienne de la phase gazeuse par les équations de Navier-Stokes dans le cadre d’un écoulement multi-espèces réactif de gaz dilués polyatomiques. Ces équations peuvent être formellement dérivées à partir de la théorie cinétique des gaz [Gio99], [EG94], [Mas96]. Elles forment un système mixte hyperbolique parabolique décrivant l’hydrodynamique, des phénomènes complexes de dissipation comme la dissipation visqueuse, la diffusion de masse et de chaleur, et enfin la chimie à travers des termes sources Maxwelliens. La structure mathématique de ce système a été étudiée dans [GM98]. Dans le cas de la présence d’un brouillard de gouttelettes (par brouillard de gouttelettes, on entend une phase dispersée de gouttelettes liquides, c’est-à-dire où la fraction volumique de liquide est petite devant 1), l’interaction avec le liquide apparaît uniquement sous la forme de termes sources ajoutés aux équations. Cette hypothèse est justifiée par le fait que la masse du gaz par unité de volume de gaz est alors pratiquement égale à la masse de gaz par unité de volume total.

Dans le but de modéliser des flammes laminaires non confinées, à pression constante, on utilise les équations des flammes isobares. Celles-ci se déduisent du système précédent dans la limite des faibles nombres de Mach (c’est-à-dire quand la vitesse de l’écoulement est petite par rapport à la vitesse du son). On donne, dans cette section, les équations de Navier-Stokes et le passage aux équations des flammes isobares. D’autre part, les formules donnant ces flux ainsi que les autres relations de transport, les lois de comportement et les relations de cinétique chimiques dans le cas d’une chimie complexe sont détaillées ici et permettent de fermer le problème.

1.1.1 Équations de bilan

Les équations de bilan pour le gaz traduisent la conservation de la masse totale et de celle de chaque constituant, la conservation de l'impulsion et la conservation de l'énergie, et ce, en tenant compte des échanges entre les phases gaz et liquide.

– Conservation de la masse :

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho u) = -S^m \quad (1.1)$$

où t désigne le temps, ρ est la masse volumique, u est la vitesse moyenne de masse et S^m est le terme d'échange de masse entre les gouttes et le gaz par évaporation.

– Conservation des espèces chimiques :

$$\frac{\partial \rho_k}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho_k u) = -\nabla \cdot (\rho_k \Upsilon_k) + m_k \omega_k - S_k^{species} \quad k = 1 \dots n_S \quad (1.2)$$

où ρ_k est la densité de la $k^{\text{ème}}$ espèce, Υ_k sa vitesse de diffusion, m_k sa masse molaire, ω_k le taux molaire de production de la $k^{\text{ème}}$ espèce, n_S est le nombre d'espèces et $S_k^{species}$ le terme d'échanges de masse de la $k^{\text{ème}}$ espèce dû à l'évaporation. Soient Y_k la fraction massique et u_k la vitesse hydrodynamique de la $k^{\text{ème}}$ espèce. On a alors les relations suivantes :

$$\rho = \sum_{k=1}^{n_S} \rho_k, \quad \rho u = \sum_{k=1}^{n_S} \rho_k u_k, \quad Y_k = \frac{\rho_k}{\rho}, \quad \Upsilon_k = u_k - u,$$

d'où l'on déduit les identités :

$$\sum_{k=1}^{n_S} Y_k = 1, \quad \sum_{k=1}^{n_S} \rho_k \Upsilon_k = 0, \quad \sum_{k=1}^{n_S} S_k^{species} = S^m, \quad (1.3)$$

dites de 'conservation de la masse'. En anticipant la relation $\sum_{k=1}^{n_S} m_k \omega_k = 0$ entre les taux de productions massiques, on peut donc noter que les n_S équations de conservation de masse des espèces chimiques (1.2) sont a priori linéairement dépendantes, leur somme étant nulle à cause de l'équation de conservation de la masse totale (1.1). Il apparaît donc possible de ne considérer que $n_S - 1$ fractions massiques comme inconnues et de calculer la fraction massique restante par (1.3a). Mais il est néanmoins possible de considérer toutes les fractions massiques comme inconnues. Dans cette situation, la relation $\sum_{k=1}^{n_S} Y_k = 1$, qui est une conséquence de la définition des fractions massiques, doit être un résultat des calculs. C'est cette dernière solution qui est adoptée.

– Conservation de l'impulsion :

$$\frac{\partial \rho u}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho u \otimes u) = -\nabla \cdot \mathbf{P} - S^{mom}, \quad (1.4)$$

où \mathbf{P} est le tenseur des pressions et S^{mom} est le terme d'échanges de quantité de mouvement dû à la vaporisation et à la force de traînée entre les gouttes et le gaz.

– Conservation de l'énergie :

$$\frac{\partial \rho e}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho e u) = -\nabla \cdot q - \mathbf{P} : \nabla u - S^{enth} - S^{trav}, \quad (1.5)$$

où e est l'énergie interne massique, q est le flux de chaleur, S^{enth} est le terme d'échanges d'enthalpie dû à la vaporisation et aux échanges de chaleur entre la goutte et le gaz et S^{trav} représente le travail de la force de traînée et l'échange d'énergie cinétique entre les deux phases.

Ce système de lois de conservation est alors fermé par les lois de comportement donnant les flux de diffusion, par la thermodynamique et par la chimie. C'est ce qui va être détaillé dans la suite.

1.1.2 Lois de comportement, propriétés de transport

La loi de comportement utilisée ici est celle des fluides visqueux newtoniens :

$$\mathbf{P} = p\mathbf{I} + \mathbf{\Pi},$$

où \mathbf{I} est le tenseur unité, p est la pression thermodynamique et $\mathbf{\Pi}$ est le tenseur des contraintes de viscosité avec :

$$\mathbf{\Pi} = \frac{2}{3}\eta(\nabla \cdot u)\mathbf{I} - \eta(\nabla u + (\nabla u)^t),$$

où η est la viscosité de cisaillement.

D'autre part, l'expression du flux de chaleur q est la suivante :

$$q = -\lambda \nabla T + \sum_{k=1}^{n_s} \rho_k h_k \Upsilon_k, \quad (1.6)$$

où λ est le coefficient de conductivité thermique du mélange gazeux. On a négligé ici le flux de chaleur dû au rayonnement et l'effet Dufour, c'est-à-dire la diffusion de la chaleur due au gradient des espèces car celui-ci est toujours très faible.

Enfin, les vitesses de diffusion Υ_k peuvent s'écrire [Mas96] :

$$\Upsilon_k = - \sum_{l=1}^{n_s} D_{kl} d_l, \quad (1.7)$$

avec

$$d_k = \nabla \log X_k + X_k \frac{\nabla p}{p},$$

où D_{kl} est la matrice de diffusion multi-espèces, X_k est la fraction molaire de la $k^{\text{ème}}$ espèce, d_k est la force d'orientation de la diffusion de la $k^{\text{ème}}$ espèce. On suppose que l'effet Soret est négligeable dans ce problème.

Ces lois nous permettent de réécrire l'équation de conservation de l'impulsion (1.4) :

$$\frac{\partial \rho u}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho u \otimes u) = -\nabla p - \nabla \cdot \left(\frac{2}{3}\eta(\nabla \cdot u)\mathbf{I} - \eta(\nabla u + (\nabla u)^t) \right) - S^{mom}. \quad (1.8)$$

Pour l'équation de conservation de l'énergie (1.5), si on introduit de plus l'enthalpie $h = e + \frac{p}{\rho}$ du mélange, on obtient alors l'équation :

$$\frac{\partial \rho h}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho h u) = \nabla \cdot (\lambda \nabla T) - \sum_{k=1}^{n_S} \nabla \cdot (\rho_k h_k \Upsilon_k) - \mathbf{\Pi} : \nabla u + \frac{\partial p}{\partial t} + u \cdot \nabla p - S^{enth} - S^{trav}. \quad (1.9)$$

Or, on étudie un écoulement où les vitesses sont faibles par rapport à la vitesse du son. Le nombre de Mach M (rapport de la vitesse de l'écoulement sur la vitesse du son dans le mélange gazeux) est donc très petit devant 1. On est alors dans le cadre de l'hypothèse des faibles nombres de Mach. Un développement formel des variables en fonction des puissances du petit paramètre M montre alors [Gio88] que les variations spatiales de la pression sont négligeables, elles sont de l'ordre du nombre de Mach au carré. Ainsi, la pression peut s'écrire : $p(x, t) = p_{atm}(t) + \tilde{p}(x, t)$ où p_{atm} est indépendant de la variable d'espace et où \tilde{p} est une perturbation ($\frac{\tilde{p}}{p_{atm}} = O(M^2) \ll 1$).

D'autre part, l'hypothèse des faibles nombres de Mach nous permet de montrer que les termes $\mathbf{\Pi} : \nabla u$ et $u \cdot \nabla p$ de (1.9) sont négligeables par rapport aux autres termes de l'équation (ils sont aussi de l'ordre du nombre de Mach au carré). Cette hypothèse nous permet enfin de négliger le terme S^{trav} si la différence de vitesse entre les gouttes et le gaz est au plus du même ordre de grandeur que la vitesse moyenne du gaz (on verra dans la suite que c'est le cas) ainsi que le terme de barodiffusion $X_k \frac{\nabla p}{p}$ intervenant dans l'expression des vitesses de diffusion (1.7). Les deux équations précédentes se réécrivent donc :

$$\frac{\partial \rho u}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho u \otimes u) = -\nabla \tilde{p} - \nabla \cdot \left(\frac{2}{3} \eta (\nabla \cdot u) \mathbf{I} - \eta (\nabla u + (\nabla u)^t) \right) - S^{mom}, \quad (1.10)$$

et

$$\frac{\partial \rho h}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho h u) = \nabla \cdot (\lambda \nabla T) - \sum_{k=1}^{n_S} \nabla \cdot (\rho_k h_k \Upsilon_k) + \frac{\partial p}{\partial t} - S^{enth}. \quad (1.11)$$

Les vitesses de diffusion s'écrivent :

$$\Upsilon_k = - \sum_{l=1}^{n_S} D_{kl} \nabla \log X_l.$$

Remarquons que, lorsque la pression est constante, comme c'est le cas pour des configurations stationnaires à faibles nombres de Mach, les bonnes variables thermodynamiques à considérer sont l'enthalpie et la pression et non l'énergie interne et le volume [Gio99].

1.1.3 Relations thermodynamiques

La thermodynamique permet de relier différentes grandeurs thermodynamiques comme ρ ou h aux variables d'état T , p , Y_k . En premier lieu, on suppose que le gaz est un gaz parfait :

$$\rho = \frac{p_{atm} m}{RT}$$

où R est la constante universelle des gaz et m est la masse molaire du mélange :

$$m = \left(\sum_{k=1}^{n_S} \frac{Y_k}{m_k} \right)^{-1}.$$

L'enthalpie massique du mélange h s'exprime en fonction des enthalpies massiques h_k des espèces par la relation :

$$h = \sum_{k=1}^{n_S} Y_k h_k,$$

et h_k est donnée par :

$$h_k = h_k^0 + \int_{T_0}^T c_{pk}(T') dT',$$

où $h_k^0 = h_k(T_0)$ est l'enthalpie standard de formation de la $k^{\text{ème}}$ espèce et $c_{pk}(T)$ est la chaleur massique à pression constante de la $k^{\text{ème}}$ espèce. La chaleur massique à pression constante c_p du mélange peut s'écrire :

$$c_p = \sum_{k=1}^{n_S} Y_k c_{pk}.$$

A partir de là, on peut réécrire l'équation de conservation de l'énergie (1.11), en utilisant l'équation de conservation des espèces (1.2) :

$$\rho c_p \left(\frac{\partial T}{\partial t} + u \cdot \nabla T \right) = \nabla \cdot (\lambda \nabla T) + \frac{\partial p}{\partial t} - S^{\text{enth}} + S^{\text{enth-liq}} - \sum_{k=1}^{n_S} h_k m_k \omega_k - \left(\sum_{k=1}^{n_S} \rho_k Y_k c_{pk} \right) \cdot \nabla T, \quad (1.12)$$

où $S^{\text{enth-liq}} = \sum h_k S_k^{\text{species}}$ est le terme de transfert de température du gaz au liquide du fait que certaines molécules de l'espèce k passent de l'état liquide à l'état gazeux.

1.1.4 Relations de cinétique chimique

Les relations de la cinétique chimique vont nous donner l'expression des taux de production $(\omega_k)_{k=1..n_S}$. On considère une cinétique chimique à n_R réactions élémentaires et n_S espèces chimiques, qui peut s'écrire :

$$\sum_{k=1}^{n_S} \nu'_{ki} \chi_k = \sum_{k=1}^{n_S} \nu''_{ki} \chi_k \quad k = 1 \cdots n_R,$$

où χ_k est le symbole de la $k^{\text{ème}}$ espèce et ν'_{ik} et ν''_{ik} sont les coefficients stœchiométriques. Ces coefficients sont des entiers positifs et vérifient les n_R relations de conservation de la masse :

$$\sum_{k=1}^{n_S} \nu'_{ki} m_k = \sum_{k=1}^{n_S} \nu''_{ki} m_k \quad k = 1 \cdots n_R.$$

Le taux de production de la $k^{\text{ème}}$ espèce s'écrit alors :

$$\omega_k = \sum_{i=1}^{n_R} \nu_{ki} \tau_i,$$

où $\nu_{ki} = \nu''_{ki} - \nu'_{ki}$ et où τ_i est le taux d'avancement de la $i^{\text{ème}}$ réaction. On en déduit aisément que :

$$\sum_{k=1}^{n_S} m_k \omega_k = \sum_{i=1}^{n_R} \sum_{k=1}^{n_S} \tau_i m_k (\nu''_{ki} - \nu'_{ki}) = 0,$$

ce qui traduit la conservation de la masse totale.

Le taux d'avancement τ_i est la différence entre les taux d'avancement direct et inverse et est donné par :

$$\tau_i = K_i^f \prod_{k=1}^{n_S} [\chi_k]^{\nu'_{ki}} - K_i^r \prod_{k=1}^{n_S} [\chi_k]^{\nu''_{ki}},$$

où $[\chi_k] = \frac{\rho_k}{m_k}$ est la concentration de la $k^{\text{ème}}$ espèce et K_i^f et K_i^r sont les constantes de vitesse directe et inverse de la $i^{\text{ème}}$ réaction.

La constante de vitesse K_i^f de la $i^{\text{ème}}$ réaction est donnée par la loi d'Arrhénius :

$$K_i^f = A_i T^{b_i} \exp\left(-\frac{E_i}{RT}\right),$$

où A_i est le facteur pré-exponentiel, b_i l'exposant pré-exponentiel et E_i l'énergie d'activation de la $i^{\text{ème}}$ réaction. La constante de réaction inverse K_i^r est reliée à la constante d'équilibre K_i^e par la relation :

$$K_i^r = \frac{K_i^f}{K_i^e},$$

la constante d'équilibre K_i^e étant donné par la thermodynamique :

$$K_i^e = \exp\left(-\sum_{k=1}^{n_S} \frac{\nu_{ki} \mu_k(T, [\chi_k] = 1)}{r_k T}\right),$$

où μ_k est le potentiel chimique de la $k^{\text{ème}}$ espèce et $r_k = \frac{R}{m_k}$.

On peut remarquer que cette axiomatique thermo-chimique est réaliste. D'autre part, elle donne lieu à des équations bien posées [GM98], [Mas02], [Mas96].

1.1.5 Équations des flammes isobares

On obtient donc finalement, en rassemblant les équations de conservation (1.1), (1.2), (1.10) et (1.12) et en simplifiant (1.2) et (1.10) grâce à l'équation de conservation de la masse (1.1) :

$$\begin{aligned} \frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho u) &= -S^m, \\ \rho \frac{\partial Y_k}{\partial t} + \rho u \cdot \nabla Y_k &= -\nabla \cdot (\rho Y_k \Upsilon_k) + m_k \omega_k - S_k^{\text{species}} + Y_k S^m, \quad k \in S, \\ \rho \frac{\partial u}{\partial t} + \rho u \cdot \nabla u &= -\nabla \tilde{p} - \nabla \cdot \left(\frac{2}{3} \eta (\nabla \cdot u) \mathbf{I} - \eta (\nabla u + (\nabla u)^t) \right) - S^{\text{mom}} + u S^m, \\ \rho c_p \left(\frac{\partial T}{\partial t} + u \cdot \nabla T \right) &= \nabla \cdot (\lambda \nabla T) + \frac{\partial p}{\partial t} - \sum_{k=1}^{n_S} h_k m_k \omega_k - \left(\sum_{k=1}^{n_S} \rho_k \Upsilon_k c_{pk} \right) \cdot \nabla T - S^{\text{enth}} + \sum_{k=1}^{n_S} h_k S_k^{\text{species}}. \end{aligned}$$

Il ne reste plus qu'à expliciter les termes sources.

1.2 Modèle cinétique du brouillard de gouttelettes

Afin d'évaluer les termes sources des équations du gaz, on a besoin d'un modèle pour la phase liquide. Différents modèles peuvent être utilisés, comme on le verra dans la section suivante. Mais la plupart ont une base commune appelée modèle cinétique : il s'agit d'une description statistique basée sur un concept proposé par Williams [Wil58], [Wil85]. L'idée est de décrire le brouillard de façon globale en utilisant une fonction continue : sa densité de probabilité f^ϕ , aussi appelé fonction de distribution, qui satisfait une équation de transport de type Boltzmann.

1.2.1 Équation de transport

Chaque goutte est supposée sphérique et de température interne décrite par une seule variable. Ainsi, elle est entièrement décrite par sa position x , sa taille ϕ proportionnelle à une puissance du rayon des gouttes, sa vitesse u_l et sa température T_l . La quantité $f^\phi(t, x, \phi, u_l, T_l) dx d\phi du_l dT_l$ désigne alors le nombre probable de gouttes au temps t se trouvant dans un espace de taille dx autour de x , ayant une vitesse u_l à du_l près, ayant une température T_l à dT_l près et ayant une taille ϕ à $d\phi$ près.

Généralement, on prend pour ϕ le rayon R , la surface S ou le volume V des gouttes. De façon un peu arbitraire, Williams et Greenberg [Wil85], [GST93] ont choisi le volume. Les trois fonctions de distribution f^R , f^S et f^V décrivent le même brouillard de gouttes et donc vérifient la relation : $f^R dR = f^S dS = f^V dV$. C'est-à-dire que l'on a :

$$f^R = 8\pi R f^S = 4\pi R^2 f^V. \quad (1.13)$$

L'évolution du brouillard de gouttelettes est alors décrite par une équation de transport sur sa fonction de distribution. Celle-ci est de type Boltzmann et est une généralisation au cas où f^ϕ dépend aussi de la température de l'équation donnée par Williams [Wil58], [Wil85] :

$$\frac{\partial f^\phi}{\partial t} + \nabla \cdot (u_l f^\phi) + \frac{\partial R_\phi f^\phi}{\partial \phi} + \nabla_{u_l} \cdot (F f^\phi) + \frac{\partial E f^\phi}{\partial T_l} = \Gamma + Q, \quad (1.14)$$

où $R_\phi(t, x, \phi, u_l, T_l) = \frac{d\phi}{dt}$ désigne le taux de variation de ϕ due à l'évaporation, $F(t, x, \phi, u_l, T_l)$ est la traînée exercée par le gaz sur la goutte, $E(t, x, \phi, u_l, T_l)$ est le taux de chaleur échangé entre les deux phases, $\Gamma(t, x, \phi, u_l, T_l)$ est l'opérateur intégral de collision menant à la coalescence ou à la dissociation et $Q(t, x, \phi, u_l, T_l)$ est l'opérateur intégral de collision élastique.

On a de plus les relations suivantes entre $R_R = \frac{dR}{dt}$, $R_S = \frac{dS}{dt}$ et $R_V = \frac{dV}{dt}$: $R_R f^R = R_S f^S = R_V f^V$, c'est-à-dire :

$$R_R = \frac{R_S}{8\pi R} = \frac{R_V}{4\pi R^2}. \quad (1.15)$$

Ces quantités, ainsi que E , sont données par un modèle de l'évaporation.

Remarque 1 Le couplage avec la phase gazeuse est réalisé au travers des coefficients R_ϕ , F et E qui dépendent de la température et de la composition du gaz au point où se trouve la goutte. Cela se traduit par la dépendance en t et x de ces coefficients.

Revenons sur la description des gouttes. Elles sont supposées sphériques et donc de taille décrite par le seul rayon (ou toute autre puissance positive du rayon). Or, deux facteurs peuvent entraîner des déformations

de la goutte : les collisions avec d'autres gouttes et des différences de vitesse importante avec le gaz. Dans le cas des brouillards dilués, les collisions entre les gouttes sont suffisamment rares pour que les oscillations induites soient amorties rapidement vers une amplitude quasi nulle. Cette hypothèse est souvent valide dans le cas de la combustion des brouillards de gouttelettes d'hydrocarbures dans la mesure où la masse de liquide nécessaire à la stœchiométrie est très faible par rapport à celle du gaz. Pour des brouillards denses, où la coalescence doit être prise en compte, on suppose que les gouttes retrouvent vite leur forme sphérique. Le deuxième facteur peut être quantifié par le nombre de Weber We , rapport entre les forces dynamiques et les forces de tension surfacique : $We = 2R\rho|u - u_l|^2/\mathcal{S}$ où \mathcal{S} est la tension surfacique du liquide et ρ la densité du gaz. C'est de lui que dépendent le degré de déformation et l'amplitude des oscillations d'une goutte. Lorsque $We \ll 12$, les gouttes sont pratiquement sphériques. Mais si We est plus grand, les gouttes se déforment et peuvent éclater si We approche de 12. Cependant, dans les cas considérés, la différence de vitesse entre les deux phases est suffisamment faible pour que l'hypothèse de gouttes sphériques soit valide. Les phénomènes de fragmentation sont pris en compte dans une étude menée par G. Dufour [Duf02], dans le cadre de son DEA, qui prolonge le présent travail.

D'autre part, on a supposé que la température de la goutte peut être décrite par un seul paramètre. Cette hypothèse est valide si on suppose que la goutte est de température uniforme ou si le profil interne de température peut être calculé à partir d'une seule valeur. Cela peut interdire certains modèles de gouttes qui font intervenir des termes d'histoire, comme on le verra dans la section suivante.

Remarquons enfin que, pour un brouillard dilué, il est raisonnable de ne pas tenir compte des termes de collision et de dissociation des gouttes. C'est pourquoi ils seront négligés dans la plupart des chapitres, excepté le chapitre 4 qui concerne les sprays denses et où la coalescence des gouttes doit être prise en compte.

1.2.2 Modèle d'évaporation

De nombreuses études ont été menées sur l'évaporation d'une goutte isolée et en particulier pour une goutte composée uniquement d'un combustible F (voir par exemple [AS89], [Ver96]). Trois modèles seront décrits ici : la loi du d^2 , le modèle de conduction infinie, modèle qui permet de tenir compte de manière simple du chauffage instationnaire des gouttelettes et qui sera utilisé dans la plupart des chapitres suivants. Enfin, un modèle plus fin sera présenté : le modèle de conductivité effective. Ces modèles permettent d'évaluer les coefficients R_ϕ et E .

La loi du d^2

Le modèle le plus simple est la loi du d^2 [God53], [Spa53]. Le diamètre d de la goutte est alors supposé décroître linéairement en temps : $\frac{d}{dt}(d^2) = -K$, où K est supposée indépendante de d , mais dépend des conditions locales du gaz. Cela se traduit par l'indépendance en la surface des gouttes S de la quantité R_S . Cependant, il faut en général tenir compte de la dépendance R_S en la composition et en la température du gaz environnant, ce qui est noté par une dépendance en t, x .

Ce modèle est aussi un modèle de conductivité nulle : $E = 0$. On introduit les nombres de transfert de Spalding de chaleur et de masse :

$$B_T = \frac{c_{p,F}(T_\infty - T_s)}{L(T_s)}, \quad B_M = \frac{Y_{F,s} - Y_{F,\infty}}{1 - Y_{F,s}},$$

où L est la chaleur latente d'évaporation, $c_{p,F}$ est la chaleur massique à pression constante du gaz, T_s et $Y_{F,s}$ sont la température et la fraction massique de combustible à la surface de la goutte, T_∞ et $Y_{F,\infty}$ sont la température et la fraction massique de combustible loin de la goutte. La température de surface de la goutte est alors calculée en résolvant :

$$\frac{c_{p,F}(T - T_s)}{B_T(T_s)} = L(T_s).$$

On peut alors calculer le coefficient R_S :

$$R_S = -8\pi \frac{\rho}{\rho_l} D \ln(1 + B_M), \quad (1.16)$$

où D est le coefficient de diffusion binaire entre le combustible et le gaz.

Cependant, cette approche qui néglige la période de chauffage de la goutte est très imprécise [AS89].

Modèle de conduction infinie

La façon la plus simple de tenir compte des effets instationnaires du chauffage des gouttelettes est d'utiliser le modèle de conduction infinie [AS89], [Ver96]. Ce modèle suppose que la température T_l de la goutte est spatialement uniforme mais fonction du temps. Le coefficient d'évaporation et le nombre de Spalding de masse s'écrivent alors :

$$R_S = -4\pi \frac{\rho}{\rho_l} D S h^* \ln(1 + B_M), \quad B_M = \frac{Y_{F,s} - Y_{F,\infty}}{1 - Y_{F,s}}, \quad (1.17)$$

où $S h^*$ est le nombre de Sherwood modifié : $S h^* = 2 + (S h - 2)/F_M$, avec $F_M = (1 + B_M)^{0.7} \ln(1 + B_M)/B_M$. Pour un nombre de Sherwood égal à 2, on retrouve les mêmes formules que pour la loi du d^2 . Par contre, le taux de chaleur échangé entre les deux phases est :

$$E = \frac{3 \rho D}{2 R^2 \rho_l c_{p,l}} S h^* \ln(1 + B_M) \left(\frac{c_{p,F}(T - T_s)}{B_T(T_s)} - L(T_s) \right). \quad (1.18)$$

où le nombre de transfert de Spalding de chaleur est calculé à partir de B_M par la formule $B_T = (1 + B_M)^\Phi - 1$ avec $\Phi = \frac{c_{p,F} S h^*}{c_p N u^*} L e^{-1}$.

Afin de prendre en compte les variations des propriétés de transport près de la goutte, on utilise la "règle de 1/3" [HDM75] : il s'agit en fait de calculer les valeurs de ρ , D , $c_{p,F}$, $S h$, $L e$ pour une température T_r et une composition du gaz, décrite par les fractions massiques $Y_{j,r}$ intermédiaires entre les valeurs à la surface de la goutte et les valeurs loin de la goutte :

$$T_r = (1 - a) T_s + a T_\infty, \quad Y_{j,r} = (1 - a) Y_{j,s} + a Y_{j,\infty}, \quad (1.19)$$

avec $a = 1/3$. On tient ainsi compte de la présence d'une couche limite autour de la goutte. Cependant, on a négligé l'effet Soret [BDGR00], [BDGR02].

Ce modèle est compatible avec la description cinétique du brouillard telle qu'elle a été présentée ci-dessus puisque la température interne de la goutte est bien décrite par une seule variable. De plus, on montrera au chapitre 2 que sa précision est suffisante pour les applications considérées. C'est pourquoi il est utilisé dans la plupart des chapitres suivants.

Modèle de conduction effective

Afin de mieux suivre l'évolution instationnaire de la température de surface de la goutte, on résout l'équation de la chaleur avec une condition de Neumann homogène au centre de la goutte et des conditions de flux au bord [AS89]. La température interne de la goutte est supposée à symétrie sphérique : $T_l(r, x)$, où r est la distance au centre de la goutte, et x est sa position. Cependant, les circulations internes du liquide sont prises en compte grâce à l'introduction de valeur "efficace" des coefficients [AS89]. La température de surface $T_s(x) = T_l(r = R, x)$ fixe alors le flux de chaleur et donc sa propre évolution.

$$u_l \frac{dS}{dx} = R_S \quad (1.20)$$

$$u_l \frac{\partial T_l}{\partial x} = \alpha_l \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial T_l}{\partial r} \right) \quad (1.21)$$

$$\left. \frac{\partial T_l}{\partial r} \right|_{r=0} = 0, \quad \left. \frac{\partial T_l}{\partial r} \right|_{r=R(z)} = \frac{R E(T_s)}{3\alpha_l} \quad (1.22)$$

$$T_l(r, z = 0) = T_0, \quad (1.23)$$

où $\alpha_l = \lambda_{eff}/(\rho_l c_{p,l})$, avec λ_{eff} la valeur efficace de la conductivité [AS89].

La méthode itérative utilisée par Sirignano dans [AS89] est incompatible avec l'utilisation de solveur du type de LSODE [Hin83]. On utilise une méthode des lignes avec N points de discrétisation intérieurs sur l'équation adimensionnée. On introduit pour cela le paramètre d'adimensionnement : $\eta = \frac{r}{R(z)}$. L'équation dans les variables η et $\bar{x} = x$ s'écrit alors :

$$\xi \frac{\partial \bar{T}_l}{\partial \bar{x}} = \left(\beta \eta + \frac{2}{\eta} \right) \frac{\partial \bar{T}_l}{\partial \eta} + \frac{\partial^2 \bar{T}_l}{\partial \eta^2} \quad (1.24)$$

$$\left. \frac{\partial \bar{T}_l}{\partial \eta} \right|_{\eta=0} = 0, \quad \left. \frac{\partial \bar{T}_l}{\partial \eta} \right|_{\eta=1} = \frac{R^2 E(T_s)}{3\alpha_l} \quad (1.25)$$

$$\bar{T}_l(\eta, z = 0) = T_0 \quad (1.26)$$

où $\xi = \frac{R^2 u_l}{\alpha_l}$ et $\beta = -\frac{R_S}{8\pi \alpha_l}$.

Le problème est singulier en $r = 0$. Il est donc résolu en discrétisant sur $\eta_i = \frac{i - 1/2}{n}$, $i = 1, \dots, n$ en utilisant un schéma centré. La température de surface est alors calculée, les $\bar{T}_l(\eta_i)$ étant donnés, par une méthode itérative :

- extrapolation linéaire : $T_s^1 = \frac{3}{2} \bar{T}_l(\eta_n) - \frac{1}{2} \bar{T}_l(\eta_{n-1})$. T_s^1 permet de calculer R_S^1, E^1 et donc $\left. \frac{\partial \bar{T}_l}{\partial \eta} \right|_{\eta=1}^1$.
- $T_s^2 = \bar{T}_l(\eta_n) + \frac{1}{2n} \left. \frac{\partial \bar{T}_l}{\partial \eta} \right|_{\eta=1}^1$. T_s^2 permet de calculer R_S^2, E^2 et donc $\left. \frac{\partial \bar{T}_l}{\partial \eta} \right|_{\eta=1}^2$.
- ... jusqu'à ce que $|T_s^{j+1} - T_s^j| < 0.1K$.

Là encore, on utilise la "règle du 1/3" [HDM75] : les coefficients de transport sont évalués pour une température et une composition du gaz données par les T_r et $Y_{j,r}$ de (1.19), avec $a = 1/3$.

Cependant, ce modèle qui décrit de manière plus précise l'évaporation d'une goutte est incompatible avec la description cinétique du brouillard de goutte donnée précédemment. En effet, il faudrait alors faire

intervenir dans la densité de probabilité le profil de température interne de goutte. Aucun modèle de ce type n'a encore été formulé, pour la simple raison que l'espace des phases devient de dimension infinie. D'autre part, les méthodes lagrangiennes d'échantillonnage sont souvent présentées comme avantageuses car elles permettent de prendre en compte ce genre de modèle plus précis d'évaporation, chaque échantillon étant alors identifié à un groupe de gouttes identiques (même position, même taille, même vitesse et même température). Cependant, si le modèle de conduction effective est plus précis pour l'évaporation d'une goutte, il n'est pas évident qu'il le soit pour la résolution numérique du brouillard tout entier, avec une méthode d'échantillonnage. En effet, l'ensemble des échantillons correspond en fait à une discrétisation de la fonction de distribution des gouttes. Or, sans modèle cinétique sous-jacent, il est difficile de justifier rigoureusement la méthode d'échantillonnage. L'erreur commise pourrait alors très bien être plus importante que dans le cas de la conduction infinie, par exemple.

1.2.3 Modèle de traînée

La différence de vitesse entre les deux phases est supposée suffisamment petite pour que l'on ne soit pas loin d'un régime de Stokes. Le nombre de Reynolds relatif Re est donné par :

$$Re = \frac{2\rho R \|u - u_l\|}{\mu},$$

où la viscosité de cisaillement du gaz μ est évaluée pour des concentrations et une température du gaz, données dans une couche limite par la règle du 1/3. Typiquement, il sera de l'ordre de 1 dans les cas étudiés. Le coefficient de traînée est donc décrit par une loi de Stokes avec des termes de correction basés sur le nombre de Reynolds relatif (pour $Re \leq 1000$). Une loi souvent retenue est celle de Schiller et Nauman [YC73], [LM01] qui s'écrit :

$$F(R, u, u_l) = \frac{3\rho}{8R\rho_l} C_d \|u - u_l\| (u - u_l), \quad C_d = \frac{24}{Re} \left(1 + \frac{(Re)^{2/3}}{6} \right). \quad (1.27)$$

C'est-à-dire que l'on a :

$$F(R, u, u_l) = \frac{9}{2} \left(1 + \frac{(Re)^{2/3}}{6} \right) \frac{\mu}{\rho_l R^2} (u - u_l). \quad (1.28)$$

1.2.4 Opérateur de collision menant à la coalescence

Le modèle cinétique de coalescence pour les brouillards de gouttes est détaillé dans [VH97]. Sa dérivation utilise des arguments similaires à la dérivation de l'équation de Boltzmann pour les gaz raréfiés (voir, par exemple, [Cer88] [CIP94] [Vil02]). Nous reprenons ici ce modèle, en négligeant l'influence du paramètre d'impact sur la probabilité de rebond de deux partenaires de collision. Les hypothèses sont alors les suivantes :

- [Co1] On ne tient compte que des collisions binaires (faible fraction volumique de la phase liquide).
- [Co2] Le temps moyen de collision est très faible comparé au temps moyen entre deux collisions.
- [Co3] Toute collision mène à la coalescence.
- [Co4] Lors de la coalescence, la masse et la quantité de mouvement sont conservées.

L'opérateur de collision se décompose de la façon suivante :

$$\Gamma = Q_{\text{coll}}^- + Q_{\text{coll}}^+,$$

où Q_{coll}^- et Q_{coll}^+ correspondent respectivement à la création et à la destruction de gouttes dues à la coalescence. Il s'écrivent [Hyl99], [VH97] :

$$Q_{\text{coll}}^- = - \int_{v^*} \int_{u^*} f(t, x, v, u) f(t, x, v^*, u^*) B(|u - u^*|, v, v^*) dv^* du^*, \quad (1.29)$$

$$Q_{\text{coll}}^+ = \frac{1}{2} \int_{v^* \in [0, v]} \int_{u^*} f(t, x, v^\diamond(v, v^*), u^\diamond(v, v^*, u)) f(t, x, v^*, u^*) B(|u^\diamond - u^*|, v^\diamond, v^*) J dv^* du^*, \quad (1.30)$$

Ainsi, $Q_{\text{coll}}^-(v, u)$ représente la "disparition" d'une goutte de volume v et de vitesse u qui coalesce avec une goutte de volume v^* et de vitesse u^* tandis que $Q_{\text{coll}}^+(v, u)$ représente la création d'une goutte de volume v et de vitesse u par coalescence d'une goutte de volume v^* et de vitesse u^* avec une goutte de volume v^\diamond et de vitesse u^\diamond .

Les valeurs de v^\diamond et u^\diamond sont données par la conservation de la masse et de la quantité de mouvement :

$$v^\diamond(v, v^*) = v - v^*, \quad u^\diamond = \frac{vu - v^*u^*}{v - v^*}. \quad (1.31)$$

J est alors le jacobien de la transformation $(v, u) \rightarrow (v^\diamond, u^\diamond)$, à (v^*, u^*) fixé : $J = (v/v^\diamond)^K$, avec K la dimension de l'espace des phases en vitesse.

Enfin, la section efficace de collision s'écrit :

$$B(|u - u^*|, v, v^*) = \beta(v, v^*) |u - u^*|, \quad \beta(v, v^*) = \pi \left(\left(\frac{3v}{4\pi} \right)^{1/3} + \left(\frac{3v^*}{4\pi} \right)^{1/3} \right)^2, \quad (1.32)$$

1.2.5 Opérateur de fragmentation

L'opérateur de fragmentation, pour des nombres de Weber supérieurs à 12 doit être pris en compte. Les grandes lignes de sa modélisation sont données par G. Dufour dans son mémoire de DEA encadré par M. Massot et P. Villedieu [Duf02] et celle-ci est détaillée dans [Ach99], [VH00] [Hyl99]. On donne ici les principaux aspects du modèle pour lequel G. Dufour a généralisé les méthodes multi-fluides eulériennes décrites dans la suite.

L'opérateur de fragmentation peut s'écrire sous la forme :

$$\Gamma_F(r, u_l) = -\nu^{bup}(r, u_l) f^R(r, u_l) + \int_{\Omega_v} \nu^{bup}(r^*, u_l^*) h(r, u_l, r^*, u_l^*) f^R(r^*, u_l^*) du_l^* dr^*, \quad (1.33)$$

où $\Omega_v = \mathbb{R}_{u_l}^d \times]r, +\infty[$, où ν^{bup} est la fréquence moyenne de fragmentation d'une goutte de rayon r et de vitesse u_l et $h(r, u_l, r^*, u_l^*)$ est le nombre de gouttes de vitesse u_l et de rayon r produites par une goutte de vitesse u_l^* et de rayon r^* . Ainsi, le premier terme de (1.33) modélise la destruction des gouttes de rayon r et de vitesse u_l par fragmentation, tandis que le second terme modélise la création de telles gouttes par fragmentation de gouttes de vitesse u_l^* et de rayon r^* .

La fréquence de rupture des gouttes peut être donnée par [Ach99] :

$$\nu^{bup}(r, u_l) = \frac{\|u - u_l\|}{10r} \sqrt{\frac{\rho}{\rho_l}},$$

où u est toujours la vitesse du gaz et ρ , sa densité.

La modélisation de la taille des fragments et de leur nombre se fait de la manière suivante : on écrit h sous la forme :

$$h(r, u_l, r^*, u_l^*) = g_{u_l}(r, u_l, r^*, u_l^*) g_r(r, r^*, u_l^*), \quad (1.34)$$

où $\int g_{u_l}(r, u_l, r^*, u_l^*) du_l = 1$. Différents choix peuvent être proposés pour la forme de la fonction g_r . L'un d'eux est donné dans [OA87] et un autre dans [Duf02], déterminé en accord avec les résultats expérimentaux du chapitre 3. La donnée exacte de la fonction g_r dépend alors, en général, de deux coefficients, évalués via le rayon de Sauter

$$r_{32}(r^*, u_l^*) = \frac{\int_0^{+\infty} r^3 g_r(r, r^*, u_l^*) dr}{\int_0^{+\infty} r^2 g_r(r, r^*, u_l^*) dr},$$

et grâce à la conservation de la masse :

$$\int_0^{+\infty} r^3 g_r(r, r^*, u_l^*) dr = r^*.$$

D'autre part, ce rayon de Sauter peut être lui-même évalué en utilisant la corrélation proposée par Wert dans [Wer95] :

$$\frac{r_{32}}{r^*} = \begin{cases} 0.32(We^*)^{-1/3} \left(\frac{4.1}{(We^* - 12)^{1/4}} \right)^{2/3} & \text{si } We^* \in]12, 18] \\ 0.32(We^*)^{-1/3} \left(\frac{2.45\sqrt{We^* - 12} - 1.9}{(We^* - 12)^{1/4}} \right)^{2/3} & \text{si } We^* \in]18, 45] \\ 0.32(We^*)^{-1/3} \left(\frac{12.2}{(We^* - 12)^{1/4}} \right)^{2/3} & \text{si } We^* \in]45, +\infty[\end{cases}$$

où We^* désigne le nombre de Weber associé à la goutte de rayon r^* et de vitesse u_l^* .

Il reste à donner un modèle pour g_{u_l} . Il n'y a pas, a priori d'expression pour ce terme. On peut prendre :

$$g_{u_l}(r, u_l, r^*, u_l^*) = \delta_{u_l - u_l^{bup}(r, r^*, u_l^*)}.$$

La vitesse moyenne des gouttes après rupture u_l^{bup} peut alors être donnée par la corrélation proposée par Faeth dans [HF93] :

$$u_l^{bup}(r, r^*, u_l^*) = u + \frac{u_l^* - u}{1 + 2.7 \left(\frac{\rho r^*}{\rho_l r} \right)^{2/3}}.$$

1.2.6 Termes sources

Les termes sources correspondant aux échanges de masse, de quantité de mouvement et d'énergie, du gaz vers le liquide, sont donnés par :

$$S^m = \iiint \rho_l R_\phi f^\phi d\phi du_l dT_l \quad (1.35)$$

$$S_k^{species} = \iiint \rho_l R_\phi \Omega_{k,Surf} f^\phi d\phi du_l dT_l \quad (1.36)$$

$$S^{mom} = \iiint \rho_l V F f^\phi d\phi du_l dT_l + \iiint \rho_l R_\phi u_l f^\phi d\phi du_l dT_l \quad (1.37)$$

$$S^{enth} = \iiint \rho_l V c_{p,l} E f^\phi d\phi du_l dT_l + \iiint \rho_l R_\phi h_{Surf} f^\phi d\phi du_l dT_l \quad (1.38)$$

où $\Omega_{k,Surf}$ est la fraction de flux de l'espèce k de la surface du liquide au gaz (ici, les gouttes ne sont constituées que d'une seule espèce, aussi, $\Omega_{k,Surf}$ vaut 0 ou 1) et h_{Surf} est l'enthalpie par unité de masse de matière s'évaporant qui passe de la surface de la goutte vers le gaz. Ici aucune réaction de surface ne se produit sur la goutte : en effet, il ne s'agit pas de la combustion d'une goutte isolée, mais d'un ensemble de gouttes qui s'évaporent avant de brûler. Aussi, h_{Surf} est simplement l'enthalpie du liquide. $c_{p,l}$ est la capacité calorifique à pression constante du liquide.

On constate ici un couplage entre les équations du gaz et celle des gouttes à cause des termes sources et des coefficients R_ϕ , F et E qui interviennent dans l'équation (1.14) vérifiée par f^ϕ et qui dépendent des caractéristiques du liquide et du gaz.

1.3 Modèles pour la résolution numérique de la phase liquide

Il a été envisagé de résoudre directement l'équation de transport (1.14) en subdivisant une partie de l'espace des phases en cellules de calcul et en utilisant des schémas eulériens classiques, comme des différences finies ou des volumes finis. Cette méthode a été nommée par O'Rourke [O'R81] : "full spray equation method". Cependant, elle a vite été abandonnée car elle est en général trop coûteuse tant du point de vue du temps de calcul que de la place mémoire. En effet, rien que pour un cas 1D, l'espace des phases est déjà de dimension 4 et il est de dimension 8 pour un cas 3D.

D'autre part, on n'a généralement pas besoin de toute l'information donnée par le modèle cinétique. L'aspect principal à prendre en compte est la polydispersion en taille car la taille détermine tant l'évaporation que le chauffage ou la dynamique des gouttes [MKGS98]. C'est pourquoi d'autres méthodes, lagrangiennes ou eulériennes, ont été développées, moins précises mais aussi moins coûteuses que la "full spray equation method". On se propose ici de les passer en revue, en montrant leurs avantages et inconvénients. On se focalisera sur les modèles multi-fluides eulériens qui sont au cœur de la thèse.

1.3.1 Méthodes généralement utilisées

Trois types de méthodes ont été considérés dans la littérature. Le premier est lagrangien et de type particulaire. Il a été décrit originellement dans [CSS77], [Duk80], [O'R81] et [AOB89]. Il est appelé 'particle fluid' dans [Duk80] et 'stochastic parcel method' dans [O'R81]. La fonction de distribution continue des gouttes est approchée en utilisant un nombre fini d'échantillons de calcul ; chaque échantillon représente un

nombre de gouttes de même taille, vitesse et température. Ainsi, les propriétés des échantillons injectés et l'évolution de ces propriétés sont choisies de manière stochastique à partir de la distribution des gouttelettes. Ce type de méthode est actuellement utilisé dans de nombreux codes (voir par exemple [Hyl99]). Il a l'avantage d'être utilisable dans la plupart des cas, mais il peut parfois être, lui aussi, très coûteux, dans des cas instationnaires notamment, où il faut un grand nombre d'échantillons pour avoir une bonne précision. On reviendra sur ce type de modèles ainsi que sur leur coût dans le chapitre 4. Un autre inconvénient provient de l'aspect lagrangien de la méthode : il oblige à résoudre séparément, sur des grilles différentes, les systèmes du gaz et du liquide et à utiliser des méthodes d'interpolation pour les couplages. Il ne permet donc pas d'obtenir des codes implicites ou optimisés. C'est pourquoi des méthodes eulériennes ont été développées.

Un second type de méthodes sont des méthodes de moments, dans ce que l'on peut appeler les modèles de "Population Balance" [RF00], [WMR01], [MVF02]. Elles sont appliquées, en général, à des ensembles de particules suffisamment petites, de telle manière que leur inertie peut être considérée comme nulle, leur dynamique étant totalement pilotée par celle du gaz environnant. On peut citer les problèmes de coagulation-fragmentation avec un exemple plus particulier : celui de la formation des suies dans les flammes [MSL⁺98], [HSC97]. La dynamique des particules est donc en général indépendante de leur taille comme c'est le cas pour des particules de suies nanométriques assez petites pour "voir" l'agitation thermique des molécules de gaz. Dans ces configurations, apparaissent parfois des distributions d'équilibre dans l'espace des phases en taille et une approche de type méthode de moment est très raisonnable, même si la méthode sectionnelle est parfois employée comme dans [MSL⁺98], [GST93]. Cependant dans le cas où l'on considère des gouttes de fuel ayant leur propre inertie et dont la réponse dynamique aux changements de vitesse du gaz dépend de la taille, il devient nécessaire d'avoir une variable qui décrit la vitesse des particules. Dans ces conditions les méthodes de type moment dans l'espace des phases en taille deviennent très discutables.

On s'oriente alors vers ce que l'on appelle les méthodes de type bi-fluides qui font l'objet d'une vaste littérature [Des00], [Ram00]. Les équations sont alors écrites seulement pour certains moments en taille et vitesse de la fonction de distribution du brouillard de gouttes et résolues grâce à des schémas eulériens classiques. Elles peuvent être obtenues, dans le cas dilué, à partir de l'équation de transport. Cependant, dans le cas de brouillards de gouttelettes, l'inertie et donc la dynamique de chaque goutte dépend de manière essentielle de sa taille. Les méthodes de moments sont donc trop imprécises pour décrire une structure de flamme puisque l'on s'en tient à une description "en moyenne" de la granulométrie du brouillard. Par exemple, beaucoup de modèles eulériens, qui sont utilisés dans le but de réduire le coût de calcul par rapport aux modèles lagrangiens, en supposant souvent que le brouillard de gouttelettes est monodispersé (une seule taille de gouttes) [RS95], hypothèse bien trop grossière pour la combustion de brouillard de gouttelettes polydispersé [MKGS98]. On peut alors prendre des moments en vitesse et considérer plusieurs échantillons dans l'espace des phases en taille, comme dans [DS97] : une méthode semi-fluide basée sur une fermeture des moments en vitesse de la distribution échantillonnée est alors utilisée. Cependant cela ne permet pas de traiter correctement les interactions des gouttes entre elles : la taille de la nouvelle goutte n'a en effet pas de raison d'être celle d'un échantillon déjà présent. Cette méthode ne permet pas non plus de décrire précisément le couplage entre la dynamique du brouillard polydispersé et son évaporation.

L'idée consiste alors à considérer une approche alternative dite multi-fluides eulérienne qui consiste en une méthode de moments pour certaines variables de l'espace des phases, tandis qu'une discrétisation type volumes finis est introduite pour la variable de taille des gouttes.

1.3.2 Modèles multi-fluides eulériens

L'étape suivante dans les modèles eulériens est naturellement l'utilisation de modèles intermédiaires entre le "full spray equation model" et les méthodes de moments. Ainsi, certaines dimensions de l'espace des phases (correspondant à la température des gouttes et à leur vitesse) sont traitées via des équations de moments tandis que d'autre (la taille des gouttelettes et leur position) sont discrétisées comme pour le "full spray equation model". Cela permet d'obtenir une bonne précision à un coût relativement faible.

Par exemple, dans le cas des sprays dilués où on ne tient pas compte des interactions entre gouttes, on commence par écrire les équations sur les moments en vitesse et en température d'ordre 0 : $n^\phi = \iint f^\phi dT_l du_l$ et d'ordre 1 : $n^\phi u_d = \iint f^\phi u_l dT_l du_l$ et $n^\phi T_d = \iint f^\phi T_l dT_l du_l$. On suppose préalablement que la distribution f^ϕ est de la forme :

$$f^\phi(t, x, \phi, T_l, u_l) = n^\phi(t, x, \phi) \psi(T_l - T_d(t, x, \phi)) \varphi(u_l - u_d(t, x, \phi)),$$

où ψ et φ sont des fonctions d'intégrale égale à 1 et de moyenne nulle. On obtient le modèle semi-cinétique :

$$\begin{aligned} \frac{\partial n^\phi}{\partial t} + \nabla \cdot (n^\phi u_d) + \frac{\partial n^\phi \overline{R_\phi}}{\partial \phi} &= 0, \\ \frac{\partial n^\phi u_d}{\partial t} + \nabla \cdot (n^\phi u_d \otimes u_d) + \nabla \cdot (n^\phi P) + \frac{\partial n^\phi \overline{R_\phi} u_d}{\partial \phi} &= n^\phi \overline{F}, \\ \frac{\partial n^\phi \overline{h_l}}{\partial t} + \nabla \cdot (n^\phi u_d \overline{h_l}) + \frac{\partial n^\phi \overline{R_\phi} \overline{h_l}}{\partial \phi} &= \overline{nc_{p,l} E}, \end{aligned}$$

où h_l est l'enthalpie des gouttes, où les quantités surmontées d'une barre sont des valeurs moyennes

$$\overline{g}(t, x, \phi) = \int g(t, x, \phi, u_l, T_l) \varphi(u_l - u_d(t, x, \phi)) \psi(T_l - T_d(t, x, \phi)) dT_l du_l,$$

et où P est un tenseur équivalent à un terme de pression, décrivant la dispersion en vitesse des gouttes :

$$P_{i,j} = \int_{-\infty}^{+\infty} v^2 \varphi_i(v) \varphi_j(v) dv,$$

φ_i étant la $i^{\text{ème}}$ composante du vecteur φ . Ce tenseur est supposé nul pour les écoulements laminaires que nous considérons, tout comme la dispersion en température (et ainsi les quantités surmontées d'une barre sont en fait les valeurs des fonctions en u_d et T_d). Pour appliquer ce type de méthode à des écoulements turbulents, il faudra donner un modèle pour ce tenseur et une façon de le faire est de supposer φ gaussienne. On introduit alors une nouvelle variable, équivalente à une température du brouillard à taille de gouttes fixée, qui est la variance $\sigma(t, x, \phi)$ de φ à taille ϕ fixée et dont l'équation complète le modèle semi-cinétique.

Pour un écoulement laminaire, on obtient des équations du même type de celles des gaz sans pression :

$$\begin{aligned} \frac{\partial n^\phi}{\partial t} + \nabla \cdot (n^\phi u_d) + \frac{\partial n^\phi \overline{R_\phi}}{\partial \phi} &= 0, \\ \frac{\partial n^\phi u_d}{\partial t} + \nabla \cdot (n^\phi u_d \otimes u_d) + \frac{\partial n^\phi \overline{R_\phi} u_d}{\partial \phi} &= n^\phi \overline{F}, \\ \frac{\partial n^\phi \overline{h_l}}{\partial t} + \nabla \cdot (n^\phi u_d \overline{h_l}) + \frac{\partial n^\phi \overline{R_\phi} \overline{h_l}}{\partial \phi} &= \overline{nc_{p,l} E}, \end{aligned}$$

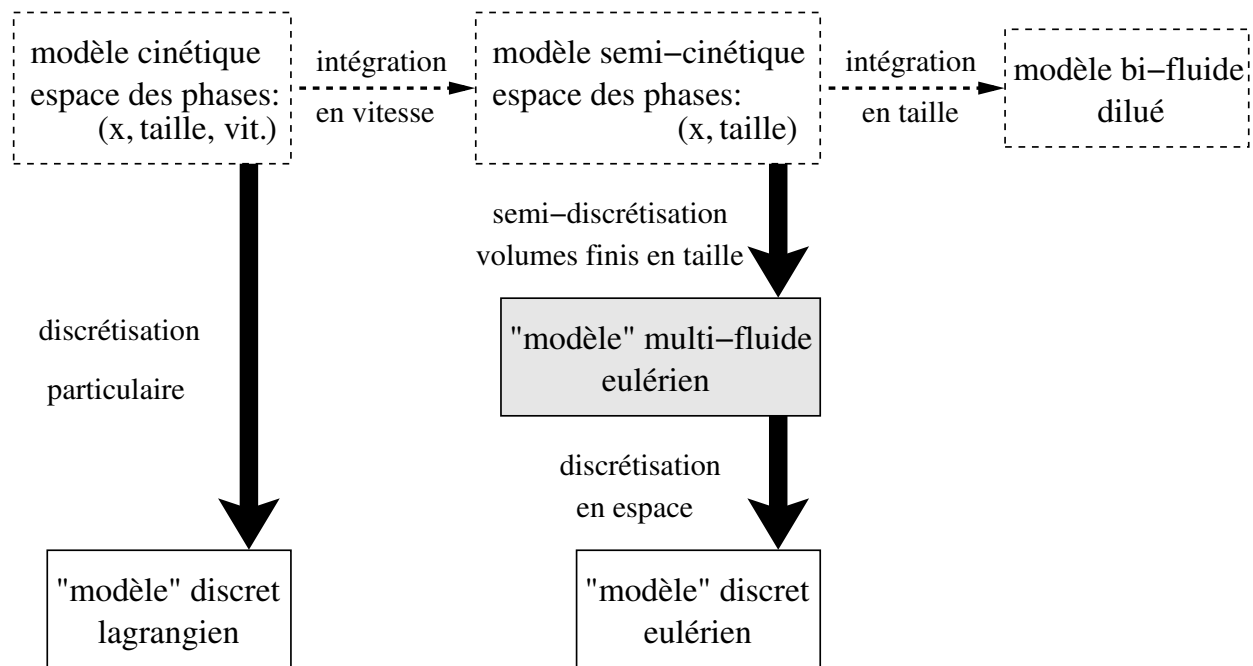


FIG. 1.2 – Hiérarchie des modèles pour la résolution numérique de la phase liquide.

où, cette fois, pour une fonction g , \bar{g} désigne la valeur de g en $T_l = T_d$ et $u_l = u_d$.

Une nouvelle intégration suivant les tailles de gouttes donnerait le modèle bi-fluides (cf Figure 1.2). Les modèles multi-fluides eulériens sont obtenus par une discrétisation type volumes finis des équations du modèle semi-cinétique. La dérivation complète ainsi que le détail des hypothèses nécessaires sont données dans le chapitre 2. On y montre que ce type de modèle se comporte bien tant que l'on n'a pas une situation où des gouttes de tailles proches mais de vitesses différentes se retrouvent au même endroit, au même moment.

Pour le cas des sprays denses où la coalescence est prise en compte, on peut encore mettre en évidence un modèle semi-cinétique. Cela est détaillé dans le chapitre 4, où on n'a plus tenu compte, pour simplifier, de la dépendance de la fonction de distribution en la température des gouttelettes, c'est-à-dire que l'on a utilisé la loi du d^2 afin de simplifier la présentation. Cependant, cette température peut être prise en compte et traitée de la même manière.

1.4 Flammes de diffusion à contre-courant

Avant de passer à des cas instationnaires, il est important de valider les méthodes considérées sur un cas stationnaire, de montrer qu'elles permettent de capter la dynamique et la structure de flamme. On utilise alors le cas test suivant : la combustion d'un brouillard de gouttes polydispersé dans une flamme de diffusion laminaire. Ce cas est particulièrement intéressant car il faut l'objet d'expériences au Center for Combustion Studies à Yale University d'une part et se réduit à un cas 1D permettant des simulations détaillées, d'autre part.

On considère d'un côté un jet de combustible sous forme condensée convecté par un gaz inerte, de l'autre, un jet d'oxydant à contre-courant et une flamme quasi plane entre ces deux flux (voir la figure 1.3). On montre ici comment on peut se ramener à un problème 1D et quel type de code peut être utilisé pour résoudre numériquement les équations stationnaires obtenues.

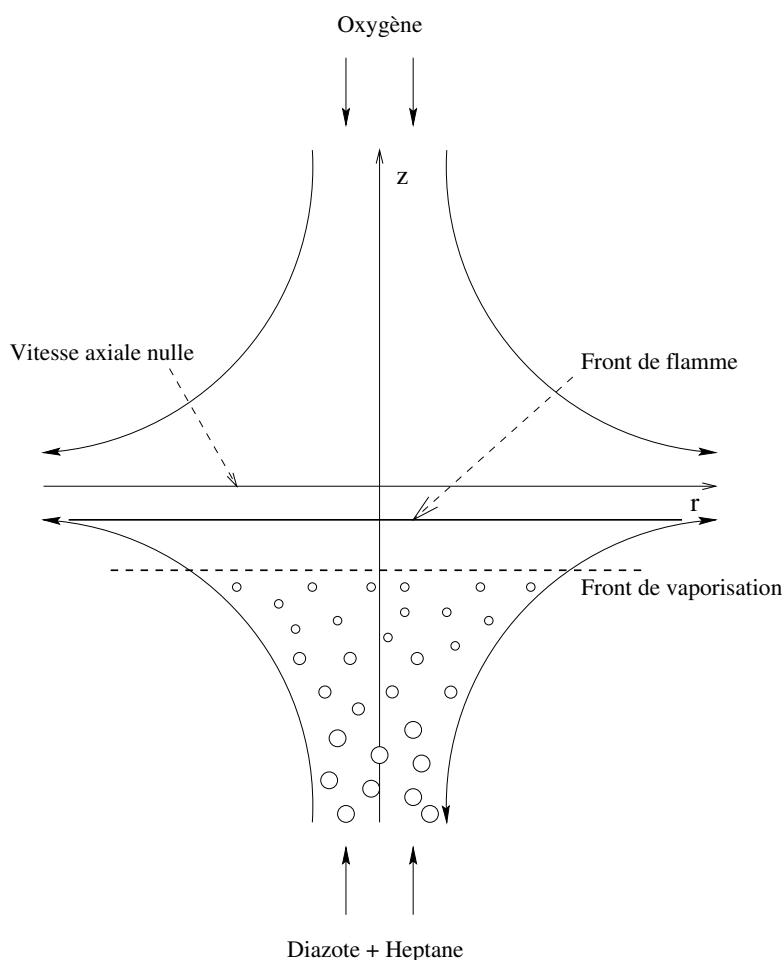


FIG. 1.3 – Schéma de la flamme de diffusion diphasique à contre-courant

1.4.1 Équations stationnaires 2D axisymétriques

Tout d'abord, on étudie un écoulement stationnaire, ce qui nous permet de simplifier le système en éliminant toutes les dérivées partielles en temps. De plus, le système physique étudié présente une symétrie de révolution autour de l'axe (Oz) (voir la figure 2). On adopte donc les coordonnées cylindriques (r, θ, z) et, sachant qu'à cause de cette symétrie, aucune des variables ne dépend de θ , les équations peuvent s'écrire :

$$\frac{1}{r} \frac{\partial r \rho u_r}{\partial r} + \frac{\partial \rho u_z}{\partial z} = -S^m, \quad (1.39)$$

$$\rho u_r \frac{\partial Y_k}{\partial r} + \rho u_z \frac{\partial Y_k}{\partial z} = -\frac{1}{r} \frac{\partial r \rho Y_k \Upsilon_{r,k}}{\partial r} - \frac{\partial \rho Y_k \Upsilon_{z,k}}{\partial z} + m_k \omega_k - S_k^{species} + Y_k S^m, \quad (1.40)$$

$$\begin{aligned} \rho u_r \frac{\partial u_r}{\partial r} + \rho u_z \frac{\partial u_r}{\partial z} = & -\frac{\partial \tilde{p}}{\partial r} + \frac{2}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r \eta \frac{\partial u_r}{\partial r} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(\eta \left(\frac{\partial u_z}{\partial r} + \frac{\partial u_r}{\partial z} \right) \right) - \frac{2u_r \eta}{r^2} \\ & - \frac{2}{3} \frac{\partial}{\partial r} \left(\eta \left(\frac{1}{r} \frac{\partial r u_r}{\partial r} + \frac{\partial u_z}{\partial z} \right) \right) - S_r^{mom} + u_r S^m, \end{aligned} \quad (1.41)$$

$$\begin{aligned} \rho u_r \frac{\partial u_z}{\partial r} + \rho u_z \frac{\partial u_z}{\partial z} = & -\frac{\partial \tilde{p}}{\partial z} + 2 \frac{\partial}{\partial z} \left(\eta \frac{\partial u_z}{\partial z} \right) + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r \eta \left(\frac{\partial u_z}{\partial r} + \frac{\partial u_r}{\partial z} \right) \right) \\ & - \frac{2}{3} \frac{\partial}{\partial z} \left(\eta \left(\frac{1}{r} \frac{\partial r u_r}{\partial r} + \frac{\partial u_z}{\partial z} \right) \right) - S_z^{mom} + u_z S^m, \end{aligned} \quad (1.42)$$

$$\begin{aligned} \rho c_p u_r \frac{\partial T}{\partial r} + \rho c_p u_z \frac{\partial T}{\partial z} - \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r \lambda \frac{\partial T}{\partial r} \right) - \frac{\partial}{\partial z} \left(\lambda \frac{\partial T}{\partial z} \right) = & - \sum_{k=1}^{n_S} h_k m_k \omega_k - \sum_{k=1}^{n_S} \rho Y_k c_{pk} \Upsilon_k \cdot \nabla T \\ & - S^{enth} + \sum_{k=1}^{n_S} h_k S_k^{species}, \end{aligned} \quad (1.43)$$

où l'indice r désigne la composante radiale et l'indice z la composante axiale.

1.4.2 Transformation de similarité

Les équations précédentes sont difficiles à résoudre en l'état à cause de problèmes de conditions aux limites. En effet, le domaine considéré est alors cylindrique et les conditions aux limites sur la surface latérale sont difficiles à définir. C'est pourquoi on cherche à se ramener à un problème unidimensionnel (avec seulement deux conditions aux limites, ponctuelles). Pour cela, on cherche une solution similaire du problème, c'est-à-dire une solution particulière vérifiant les conditions de similarités suivantes :

$$\rho = \rho(z), \quad T = T(z), \quad Y = Y(z) \quad (1.44)$$

$$\rho u_z = V(z), \quad u_r = rU(z) \quad (1.45)$$

et

$$\tilde{p} = -J \frac{r^2}{2} + \hat{p}(z) \quad (1.46)$$

Les équations du gaz deviennent alors, en remarquant qu'avec les hypothèses, $\Upsilon_{r,k} = 0$:

$$2\rho U + \frac{\partial V}{\partial z} = -S^m, \quad (1.47)$$

$$V \frac{\partial Y_k}{\partial z} + \frac{\partial}{\partial z} (\rho Y_k \Upsilon_{z,k}) = m_k \omega_k - S_k^{species} + Y_k S^m, \quad (1.48)$$

$$\rho U^2 + V \frac{\partial U}{\partial z} = J + \frac{\partial}{\partial z} \left(\eta \frac{\partial U}{\partial z} \right) - \frac{1}{r} S_r^{mom} + U S^m, \quad (1.49)$$

$$V \frac{\partial u_z}{\partial z} = -\frac{\partial \hat{p}}{\partial z} + 2 \frac{\partial}{\partial z} \left(\eta \frac{\partial u_z}{\partial z} \right) + 2\eta \frac{\partial U}{\partial z} - \frac{2}{3} \frac{\partial}{\partial z} \left(\eta \left(2U + \frac{\partial u_z}{\partial z} \right) \right) - S_z^{mom} + u_z S^m, \quad (1.50)$$

$$c_p V \frac{\partial T}{\partial z} - \frac{\partial}{\partial z} \left(\lambda \frac{\partial T}{\partial z} \right) = - \sum_{k=1}^{n_s} h_k m_k \omega_k - \sum_{k=1}^{n_s} \rho Y_k c_{p,k} \Upsilon_{z,k} \frac{\partial T}{\partial z} - S^{enth} + \sum_{k=1}^{n_s} h_k S_k^{species} \quad (1.51)$$

Il est à noter que, dans le cadre des faibles nombres de Mach, et puisque $p_{atm} = \rho \frac{RT}{m}$, la quatrième équation n'apporte rien si on ne cherche pas le profil de pression. C'est pourquoi elle ne sera pas résolue.

D'autre part, comme nous spécifions le débit de masse de chaque côté du domaine de calcul, au lieu de se donner la valeur de J , on cherche J comme une valeur propre du problème et on résout l'équation :

$$\frac{\partial J}{\partial z} = 0 \quad (1.52)$$

On obtient alors bien un système d'équations en z si les termes sources sont tels que S^m , $S_k^{species}$, $\frac{1}{r} S_r^{mom}$, S_z^{mom} et S^{enth} ne dépendent que de z . Pour cela, on fait des hypothèses de similarité du même type sur les variables décrivant les gouttes. On verra, dans le chapitre 3, sous quelle hypothèse les termes sources ne dépendent bien que de z . Dans ce cas, la solution du système unidimensionnel obtenu est une solution particulière exacte du système 2D axisymétrique vu au paragraphe précédent. D'autre part, pour pouvoir comparer les simulations numériques à des résultats expérimentaux, les expériences sont réalisées de telle manière que le profil des vitesses vérifie bien les conditions de similarité.

1.4.3 Code utilisé

Pour les calculs numériques sur les flammes de diffusion stationnaires à contre-courant, les termes qui interviennent dans ces relations de transport et de cinétique chimique sont calculés grâce à une librairie optimisée pour la vectorisation de type Chemkin [DG88].

Pour intégrer le système obtenu dans le cas de l'approche sectionnelle, un code a déjà été développé et des premières validations par comparaison avec des résultats expérimentaux ont été menées [MKGS98]. Ce code a ensuite été enrichi, dans le cadre de ce travail, et nous présentons sa version actuelle.

Solveur général

On a montré, dans la première partie, que l'on obtient deux systèmes d'équations (un pour le gaz et un pour le liquide) couplés à cause de termes d'échanges entre les deux phases. Et c'est de manière découplée que le système complet va être résolu ; c'est-à-dire que chacun des deux systèmes d'équations va être résolu séparément, la solution courante de l'autre système étant utilisée pour calculer les termes d'échanges entre les phases. La méthode de résolution est résumée dans la figure 1.4.

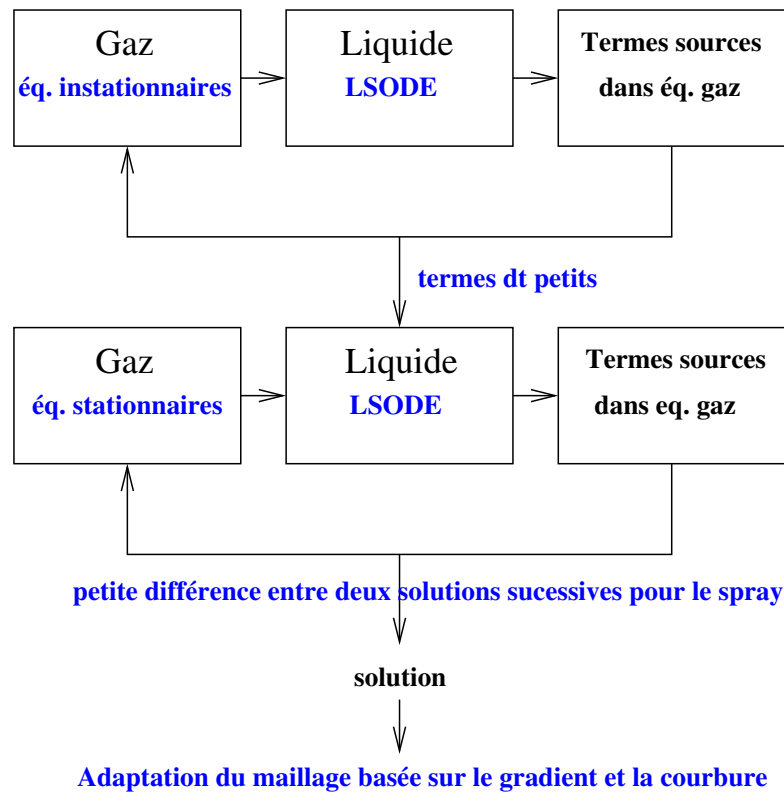


FIG. 1.4 – Schéma du fonctionnement du code utilisé

Le point de départ est une estimation pour les variables du gaz suffisamment proche de la solution. Celle-ci peut provenir d'une solution convergée précédente avec d'autres paramètres ; elle peut aussi être réalisée comme suit : d'abord, grâce à un modèle développé par Smooke et Keyes, on résout le problème en considérant que la phase liquide est absente et pour une chimie simple et infiniment rapide (seuls les principales espèces sont présentes et la flamme est concentrée sur un plan). Ensuite, on perturbe ce champs par le liquide : un modèle simplifié permet alors de calculer une estimation pour le gaz (en ajoutant les autres espèces).

A partir de cette estimation pour le gaz, on itère la procédure composée des deux étapes suivantes :

- Le système d'équations du liquide est résolu par un solveur d'équations différentielles raides, LSODE issu de la bibliothèque ODEPACK [Hin83], avec des termes sources fixes calculés à l'aide de la solution pour le gaz. La solution est calculée depuis l'entrée de chambre jusqu'à ce que la densité totale de liquide atteigne un millième de sa densité d'entrée.
- Le système d'équations instationnaires du gaz est résolu jusqu'à un nombre de pas de temps fixé par l'utilisateur. La méthode utilisée est une méthode de Newton. Les termes sources sont calculés au début, à partir de la solution précédente pour le liquide, et restent fixes.

Cette première phase permet de se rapprocher de la solution. Physiquement, cela correspondrait à une phase de relaxation menant à l'état stationnaire. Elle rend le code plus robuste, ce qui est nécessaire dans la mesure où l'estimation initiale est en générale trop éloignée de la solution pour que la méthode de Newton utilisée pour les équations stationnaires du gaz converge directement.

Dès que les termes instationnaires sont suffisamment petits, on ne résout plus les équations instationnaires du gaz, mais les équations stationnaires, avec une méthode de Newton modifiée [Deu74] et ce, encore en alternance avec la résolution des équations du liquide par LSODE. Et lorsque deux solutions successives pour le liquide sont suffisamment proches, le calcul est stoppé.

Une dernière phase vise alors à adapter le maillage : si dans une partie du domaine, la solution à un gradient ou une courbure trop grande, on raffine le maillage à cet endroit.

Les méthodes numériques sont décrites plus précisément dans la suite.

Solveur de Newton pour la phase gazeuse

Pour la phase gazeuse, il faut résoudre sur $[0, z_{OX}]$ un système d'équations 1D avec des conditions aux limites aux extrémités ($z = 0$ à l'entrée de la chambre de combustion et $z = z_{OX}$ à l'endroit où est injecté l'oxydant).

- *Méthode de Newton modifiée*

Les équations des flammes monodimensionnelles, stationnaires ou instationnaires peuvent être résolues de manière très efficace par la méthode de Newton. Le but est de calculer une solution discrète du système sur un maillage \mathcal{M} de $[0, z_{OX}]$:

$$\mathcal{M} = \{0 = z_0 < z_1 < \dots < z_m = z_{OX}\} \quad (1.53)$$

avec un opérateur différentiel continu discrétisé par différences finies. Ainsi, on va chercher une approximation en chaque point du maillage de la solution du système d'équations régissant l'écoulement. Cette approximation, notée U_h^* , est alors solution d'un système non-linéaire d'équations aux différences finies :

$$F(U_h^*) = 0 \quad (1.54)$$

où U_h^* est un vecteur composé de toutes les variables sur tous les points du maillage. Pour une donnée initiale U^0 suffisamment proche de la solution U_h^* , le système d'équations (1.54) est résolu par une méthode de Newton :

$$J(U^k) (U^{k+1} - U^k) = -\lambda_k F(U^k) \quad k = 1, 2, \dots, \quad (1.55)$$

où λ_k est le coefficient d'amortissement ($0 < \lambda \leq 1$) et $J(U^k) = \frac{\partial F}{\partial U}(U^k)$ est la matrice Jacobienne de F . Ce λ_k est pris de tel sorte que $\|J(U^k)^{-1}F(U^k)\| < \|J(U^k)^{-1}F(U^{k+1})\|$. Les raisons de ce choix sont détaillées dans [Deu74]. En pratique, on commence par comparer ces deux normes avec $\lambda_k = 1$ et on divise λ_k par deux tant que la condition précédente n'est pas réalisée.

Dans la mesure où les relations écrites au rang i ne dépendent que des valeurs de U^k aux rangs $i - 1$, i et $i + 1$, F et donc $J(U^k)$ seront tridiagonales par blocs. $J(U^k)$ peut alors être calculé de manière efficace et, pour résoudre le système (1.55), il existe des algorithmes, eux aussi très efficaces, pour inverser des matrices tridiagonales par blocs (LU par exemple).

Cependant, dans notre problème, le coût pour former la matrice Jacobienne et pour la factoriser représente encore une part substantielle du coût total de résolution. C'est pour diminuer ce coût de calcul que l'on adopte donc une méthode de Newton modifiée où la matrice Jacobienne n'est réévaluée que périodiquement et non à chaque itération. Cette méthode est détaillée dans [Smo83].

La résolution d'un tel problème nécessite une adaptation du maillage à la solution courante. La méthode utilisée ici est une méthode dite de remaillage statique [Ver96].

- *Remaillage statique*

Comme beaucoup d'autres méthodes utilisées pour calculer des maillages adaptatifs dans le cadre de la résolution de problèmes aux limites 1D, le remaillage statique peut s'interpréter en termes d'équidistribution d'une fonction de poids sur un intervalle donné.

Le maillage \mathcal{M} est équidistribué sur $[0, z_{OX}]$ selon une fonction positive W et une constante C si :

$$\int_{z_i}^{z_{i+1}} W dz = C, \quad j = 0, 1, \dots, m - 1 \quad (1.56)$$

Les nœuds sont ainsi choisis avec soit un nombre de points m fixé (alors $C = \frac{1}{m+1} \int_0^{z_{OX}} W dz$), soit une constante d'équidistribution C fixée (alors m est la partie entière de $= \frac{1}{C} \int_0^{z_{OX}} W dz + 1$).

La fonction de poids est choisie en se basant sur la courbure et sur le gradient de chaque composante de la solution : elle équidistribue la différence entre les composantes de la solution discrète et de ses gradients entre deux points de maillage.

Ainsi, si $\tilde{U}_1, \tilde{U}_2, \dots, \tilde{U}_N$ sont les composantes de l'inconnue \tilde{U} , on va chercher un maillage \mathcal{M} tel que :

$$\int_{z_i}^{z_{i+1}} \left| \frac{d\tilde{U}_i}{dz} \right| \leq \delta \left| \frac{\max_{0 \leq z \leq z_{OX}} \tilde{U}_i - \min_{0 \leq z \leq z_{OX}} \tilde{U}_i}{dz} \right| \quad j = 0, 1, \dots, m - 1 \quad i = 1, 2, \dots, N \quad (1.57)$$

$$\int_{z_i}^{z_{i+1}} \left| \frac{d^2 \tilde{U}_i}{dz^2} \right| \leq \gamma \left| \frac{\max_{0 \leq z \leq z_{OX}} \frac{d\tilde{U}_i}{dz} - \min_{0 \leq z \leq z_{OX}} \frac{d\tilde{U}_i}{dz}}{dz} \right| \quad j = 1, 2, \dots, m - 1 \quad i = 1, 2, \dots, N \quad (1.58)$$

où δ et γ sont des nombres positifs petits et les valeurs de maximum et de minimum de \tilde{U}_1 et $\frac{d\tilde{U}_i}{dz}$ sont obtenues à partir d'une solution convergée sur un maillage précédent.

Méthode BDF pour la phase liquide

Pour la phase liquide, il faut résoudre un système d'équations 1D sur $[0, z_{final}]$, c'est-à-dire depuis l'entrée de la chambre de combustion où l'on dispose d'une condition aux limites et jusqu'à ce que le liquide puisse être considéré comme entièrement évaporé.

Les équations associées à la phase liquide sont raides. C'est pourquoi l'on utilise une méthode implicite bien adaptée à ce type de problèmes : la méthode BDF (Backward Differentiation Formulas). Celle-ci est expliquée en détails dans [HNW87].

On peut mettre le système d'équations de la phase liquide sous la forme :

$$\frac{dY}{dz} = g \quad (1.59)$$

où les composantes de Y sont des valeurs approchées des valeurs sur tous les points du maillage des fonctions considérées ($V_l^{(j)}$, $U_l^{(j)} V_l^{(j)}$, $u_{l,z}^{(j)} V_l^{(j)}$ et $T_l^{(j)}$ pour l'approche sectionnelle et $S_S^{(i)}$, $V_l^{(i)}$, $U_l^{(i)} V_l^{(i)}$, $u_{S,z}^{(i)} V_l^{(i)}$ et $T_S^{(i)}$ pour d'échantillonnage).

On veut ici résoudre le système à partir d'une condition initiale et jusqu'à ce que la masse restante soit au-dessous d'une tolérance donnée. On se donne donc un maillage \mathcal{M}_l tel que

$$\mathcal{M}_l = \{0 = z_{l,0} < z_{l,1} < \dots < z_{l,p} < \dots\} \quad (1.60)$$

La méthode BDF est une méthode multipas basée sur la différenciation. Supposons que l'on ait une approximation Y_{n-k+1}, \dots, Y_n de la solution exacte de (1.59). On introduit alors le polynôme $q(z)$ qui interpole les valeurs $\{(z_{l,i}, Y_i), \quad i = n - k + 1, \dots, n + 1\}$. On sait alors que q s'écrit :

$$q(z) = \sum_{j=0}^k \prod_{i=0}^{j-1} (z - z_{l,n+1-i}) Y[z_{l,n+1}, z_{l,n}, \dots, z_{l,n-j+1}] \quad (1.61)$$

où, pour une fonction f , on définit $f[x_n, \dots, x_{n-j}]$ par :

$$f[x_n] = f(x_n) \quad (1.62)$$

$$f[x_n, \dots, x_{n-j}] = \frac{f[x_n, \dots, x_{n-j+1}] - f[x_{n-1}, \dots, x_{n-j}]}{x_n - x_{n-j}} \quad (1.63)$$

L'inconnue Y_{n+1} est alors déterminée de telle sorte que le polynôme q vérifie :

$$q'(z_{l,n+1}) = g(z_{l,n+1}, Y_{n+1}) \quad (1.64)$$

On obtient alors la formule :

$$\sum_{j=1}^k h_n \prod_{i=1}^{j-1} (z_{l,n+1} - z_{l,n+1-i}) Y[z_{l,n+1}, z_{l,n}, \dots, z_{l,n-j+1}] = h_n g(z_{l,n+1}, Y_{n+1}) \quad (1.65)$$

où h_n est le pas du maillage.

Ici, à chaque pas, h_n est calculé de telle sorte que l'erreur commise soit petite (connaissant l'ordre de la méthode, on peut évaluer l'erreur commise en prenant deux pas différents).

1.5 Discussion du modèle semi-cinétique

On a vu que les méthodes multi-fluides eulériennes sont en fait des discrétisations type volumes finis du modèle semi-cinétique. Celui-ci est du même type que le système des gaz sans pression qui a fait l'objet d'une vaste littérature [Bou94], [CL01], [Sev01], [Gre95]. Des méthodes de discrétisations volumes finis ont été développées par Bouchut [BJL02]. Elles ont été implémentées dans le cadre du DEA de G. Dufour [Duf02], pour simuler le transport des gouttes par le gaz, et feront l'objet de simulations 2D dans un proche avenir.

Bibliographie

- [Ach99] P. Achim. *Simulation de collisions, coalescence et rupture de gouttes par une approche lagrangienne : application aux moteurs à propergol solide*. PhD thesis, Faculté des Sciences de l'Université de Rouen, 1999.
- [AOB89] A.A. Amsden, P. J. O'Rourke, and T. D. Butler. Kiva II, a computer program for chemically reactive flows with sprays. Technical Report LA-11560-MS, Report Los Alamos National Laboratory, Los Alamos, New Mexico, 1989.
- [AS89] B. Abramzon and W.A. Sirignano. Droplet vaporization model for spray combustion calculations. *Int. J. Heat Mass Transfer*, 32 :1605–1618, 1989.
- [BDGR00] R. Ben-Dakhli, V. Giovangigli, and D. Rosner. Soret effect in counterflow spray diffusion flames. In *Proceedings of the 28th Symp. (International) on Combustion, The Comb. Institute*, 2000.
- [BDGR02] R. Ben-Dakhli, V. Giovangigli, and D. Rosner. Soret effects in laminar counterflow spray diffusion flames. *Combust. Theory and Modelling*, 6 :1–17, 2002.
- [BJL02] F. Bouchut, S. Jin, and X. Li. Numerical approximations of pressureless and isothermal gas dynamics. *SIAM J. Num. Anal.*, 2002. to appear.
- [Bou94] F. Bouchut. On zero pressure gas dynamics. In *Advances in kinetic theory and computing*, pages 171–190. World Sci. Publishing, River Edge, NJ, 1994.
- [Cer88] Carlo Cercignani. *The Boltzmann equation and its applications*. Springer-Verlag, New York, 1988.
- [CIP94] Carlo Cercignani, Reinhard Illner, and Mario Pulvirenti. *The mathematical theory of dilute gases*. Springer-Verlag, New York, 1994.
- [CL01] G.-Q. Chen and H. Liu. Formation of delta-shocks and vacuum states in the vanishing pressure limit of solutions to the isentropic Euler equations. report, UCLA CAM, 2001.
- [CSS77] C. T. Crowe, M. P. Sharma, and D. E. Stock. The particle-source-in cell (psi-cell) model for gas-droplet flows. *J. Fluids Eng.*, pages 325–332, 1977.
- [Des00] L. Desvillettes. About the modelling of complex flows by gas-particle methods. In *Proceedings of the workshop : Trends in Numerical and Physical Modeling for Industrial Multiphase Flows*, Cargèse, 2000.
- [Deu74] P. Deuffhard. A modified Newton method for the solution of ill-conditioned systems of nonlinear equations with application to multiple shooting. *Numer. Math.*, 22 :289–315, 1974.

- [DG88] N. Darabiha and V. Giovangigli. Vector computers and complex chemistry combustion. *Mathematical Modeling in Combustion and Related Topics*, pages 491–503, 1988.
- [DS97] K. Domelevo and L. Sainsaulieu. A numerical method for the computation of the dispersion of a cloud of particles by a turbulent gas flow field. *J. Comput. Phys.*, 133(2) :256–278, 1997.
- [Duf02] Guillaume Dufour. Un modèle multi-fluide eulérien pour la fragmentation de gouttes dans un spray dense. rapport de DEA, Université Paul Sabatier Toulouse III, ONERA Centre de Toulouse, MAPLY Université Claude Bernard Lyon 1, 2002.
- [Duk80] John K. Dukowicz. A particle-fluid numerical model for liquid sprays. *J. Comput. Phys.*, 35(2) :229–253, 1980.
- [EG94] Alexandre Ern and Vincent Giovangigli. *Multicomponent transport algorithms*. Springer-Verlag, Berlin, 1994.
- [GAT86] J.B. Greenberg, D. Albagli, and Y. Tambour. An opposed jet quasi-monodisperse spray diffusion flame. *Combust. Sci. Technol.*, 50 :255–270, 1986.
- [Gio88] Vincent Giovangigli. *Structure et Extinctions de Flamme Laminaire Prémélangées*. Thèse d’État, Université Pierre et Marie Curie, Paris VI, 1988.
- [Gio99] Vincent Giovangigli. *Multicomponent flow modeling*. Birkhäuser Boston Inc., Boston, MA, 1999.
- [GM98] Vincent Giovangigli and Marc Massot. Asymptotic stability of equilibrium states for multi-component reactive flows. *Math. Models Methods Appl. Sci.*, 8(2) :251–297, 1998.
- [God53] G. A. E. Godsave. Studies of the combustion of drops in a fuel spray : the burning of single drops of fuel. In *Proceedings of the 4th Symp. (International) on Combustion, The Comb. Institute*, pages 818–830, Baltimore, 1953.
- [Gre95] Emmanuel Grenier. Existence globale pour le système des gaz sans pression. *C. R. Acad. Sci. Paris Sér. I Math.*, 321(2) :171–174, 1995.
- [GST93] J.B. Greenberg, I. Silverman, and Y. Tambour. On the origin of spray sectional conservation equations. *Combustion and Flame*, 93 :90–96, 1993.
- [HDM75] G. L. Hubbard, V. E. Denny, and A. F. Mills. Droplet evaporation : effects of transients and variable properties. *Int. J. Heat Mass Transfer*, 18 :1003–1008, 1975.
- [HF93] L.-P. Hsiang and G. M. Faeth. Drop properties after secondary breakup. *Int. J. Multiphase Flow*, 19(5) :721–735, 1993.
- [Hin83] Alan C. Hindmarsh. ODEPACK, a systematized collection of ODE solvers. In *Scientific computing (Montreal, Que., 1982)*, pages 55–64. IMACS, New Brunswick, NJ, 1983.
- [HNW87] E. Hairer, S. P. Nørsett, and G. Wanner. *Solving ordinary differential equations. I*. Springer-Verlag, Berlin, 1987. Nonstiff problems.
- [HSC97] R. J. Hall, M. D. Smooke, and M. B. Colket. Predictions of soot dynamics in opposed jet diffusion flames, a tribute to irvin glassman. In *Physical and Chemical Aspects of Combustion*, chapter 8, pages 189–230. Gordon and Breach Science Publishers, 1997.
- [Hyl99] J. Hylkema. *Modélisation cinétique et simulation numérique d’un brouillard dense de gouttelettes. Application aux propulseurs à poudre*. PhD thesis, ENSAE, 1999.

- [LM01] Frédérique Laurent and Marc Massot. Multi-fluid modeling of laminar poly-dispersed spray flames : origin, assumptions and comparison of the sectional and sampling methods. *Combust. Theory and Modelling*, 5 :537–572, 2001.
- [Mas96] M. Massot. *Modélisation Mathématique et Numérique de la Combustion des Mélanges Gazeux*. PhD thesis, Thèse de l’Ecole Polytechnique, 1996.
- [Mas02] M. Massot. Singular perturbation analysis for the reduction of complex chemistry in gaseous mixtures using the entropic structure. *Discrete and Continuous Dynamical Systems - Series B*, 2(3) :433–456, 2002.
- [MKGS98] M. Massot, M. Kumar, A. Gomez, and M. D. Smooke. Counterflow spray diffusion flames of heptane : computations and experiments. In *Proceedings of the 27th Symp. (International) on Combustion, The Comb. Institute*, pages 1975–1983, 1998.
- [ML01] M. Massot and F. Laurent. Derivation of Eulerian multi-fluid models from a kinetic description for polydisperse sprays. In *Proceedings of the workshop : Trends in Numerical and Physical Modeling for Industrial Multiphase Flows*, Sept. 2001.
- [MLB⁺02] M. Massot, F. Laurent, J.-P. Bertoglio, M. Lance, J.-L. Marié, and L. Shao. Modélisation des couplages "dynamiques de gouttes/évaporation" pour la prédiction des champs de concentration en combustion diphasique polydispersée. In *Recherche Aéronautique sur le Supersonique, 1er Colloque National*, pages 227–232, 2002.
- [MSL⁺98] C. McEnally, A. Shaffer, M. B. Long, L. Pfefferle, M.D. Smooke, M.B. Colket, and R.J. Hall. Computational and experimental study of soot formation in a coflow laminar ethylene diffusion flame. In *Proceedings of the 27th Symp. (International) on Combustion, The Comb. Institute*, pages 664–672, 1998.
- [MVF02] D. L. Marchisio, R. D. Vigil, and R. O. Fox. Quadrature method of moments for aggregation-breakage processes. *Journal of Colloid and Interface Science*, 2002. to appear.
- [OA87] P. J. O’Rourke and A. Amsden. The tab method for numerical calculation of spray droplet breakup. Technical Report 87545, Los Alamos National Laboratory, Los Alamos, New Mexico, 1987.
- [O’R81] P. J. O’Rourke. *Collective drop effects on vaporizing liquid sprays*. PhD thesis, Los Alamos National Laboratory 87545, University of Princeton, 1981.
- [Ram00] D. Ramos. Un modèle à cinq équations : Application au cas test du robinet de ransom. In *Proceedings of the workshop : Trends in Numerical and Physical Modeling for Industrial Multiphase Flows*, Sept. 2000.
- [RF00] Doraiswami Ramkrishna and Arnold G. Fredrickson. *Population Balances : Theory and Applications to Particulate Systems in Engineering*. Academic Press, 2000.
- [RM02] J. Réveillon and M. Massot. Lagrangian/Eulerian analysis of the subgrid dispersion of vaporizing polydispersed sprays in turbulent flows. CTR summer, Center for Turbulence Research, Stanford University, 2002.
- [RMV01] J. Réveillon, M. Massot, and L. Vervisch. Direct numerical simulation of turbulent sprays. In *Proceedings of the workshop : Trends in Numerical and Physical Modeling for Industrial Multiphase Flows*, Sept. 2001.

- [RS95] Pierre-Arnaud Raviart and Lionel Sainsaulieu. A nonconservative hyperbolic system modeling spray dynamics. I. Solution of the Riemann problem. *Math. Models Methods Appl. Sci.*, 5(3) :297–333, 1995.
- [Sev01] Michael Sever. An existence theorem in the large for zero-pressure gas dynamics. *Differential Integral Equations*, 14(9) :1077–1092, 2001.
- [Smo83] M. D. Smooke. Error estimate for the modified Newton method with applications to the solution of nonlinear, two-point boundary value problems. *J. Optim. Theory Appl.*, 39(4) :489–511, 1983.
- [SNLP02] Y. Sommerer, F. Nicoud, J. P. L egier, and T. Poinso. Simulations aux grandes  echelles de la combustion instationnaire dans les syst emes partiellement pr em elang es pauvres. In *Recherche A eronautique sur le Supersonique, 1er Colloque National*, pages 71–78, 2002.
- [Spa53] D. B. Spalding. The combustion of liquid fuels. In *Proceedings of the 4th Symp. (International) on Combustion, The Comb. Institute*, pages 847–864, Baltimore, 1953.
- [Ver96] P. Versaevel. *Combustion laminaire diphasique : Etude th eorique et exp erimentale*. PhD thesis, Th ese de l’Ecole Centrale Paris, 1996.
- [VH97] Philippe Villedieu and Jouke Hylkema. Une m ethode particulaire al eatoire reposant sur une  equation cin etique pour la simulation num erique des sprays denses de gouttelettes liquides. *C. R. Acad. Sci. Paris S er. I Math.*, 325(3) :323–328, 1997.
- [VH00] Philippe Villedieu and Jouke Hylkema. Mod eles num eriques lagrangiens pour la phase dispers ee dans les propulseurs  a poudre. Rapport Final 1/3784.00/DTIM, ONERA, 2000.
- [Vil02] C edric Villani. *A review of mathematical topics in collisional kinetic theory*. S. Friedlander and D. Serre Eds., 2002. Handbook of Fluid Mechanics.
- [Wer95] K. L. Wert. A rationally-based correlation of mean fragment size for drop secondary breakup. *Int. J. Multiphase Flow*, 21(6) :1063–1071, 1995.
- [Wil58] F.A. Williams. Spray combustion and atomization. *Phys. Fluids*, 1 :541–545, 1958.
- [Wil85] F.A. Williams. *Combustion Theory (Combustion Science and Engineering Series)*. ed F A Williams (Reading, MA : Addison-Wesley), 1985.
- [WMR01] D. L. Wright, R. McGraw, and D. E. Rosner. Bivariate extension of the quadrature method of moments for modeling simultaneous coagulation and sintering of particle populations. *J. of Colloid and Interface Sci.*, 236 :242–251, 2001.
- [YC73] M. C. Yuen and L. W. Chen. On drag of evaporating liquid droplets. *Combustion Science and Technology*, 14 :147–154, 1973.

Chapter 2

Multi-fluid modeling of laminar poly-disperse spray flames: origin, assumptions and comparison of sectional and sampling methods

Article publié dans Combustion Theory and Modelling:

F. LAURENT, M. MASSOT, *Multi-fluid Modeling of Laminar Poly-dispersed Spray Flames: Origin, Assumptions and Comparison of the Sectional and Sampling Methods*, Combustion Theory and Modelling, volume 5, 4 (2001) 537-572

Abstract. *A first attempt at deriving a fully Eulerian model for poly-disperse evaporating sprays was developed by Tambour et al. with the so-called sectional approach. However the complete derivation of the sectional “multi-fluid” conservation equations from the Boltzmann type spray equation was never provided, neither was the set of underlying assumptions nor the comparison with the classical Lagrangian model : the sampling method. In this paper, we first clarify the set of assumptions necessary in order to derive the multi-fluid sectional model from the spray equation at the “kinetic level” and provide the derivation of the whole set of conservation equations describing the dispersed liquid phase. Whereas the previous derivation is conducted in any space dimension, we restrict ourselves to 1D stationary flows where the droplets do not turn back and derive a Eulerian sampling model which is equivalent in this context to the usual Lagrangian particle approach. We then identify some situations, even in this restrictive framework, where the sectional approach fails to reproduce the coupling of the vaporization and dynamics of the spray, the sampling method being then required. In the domain of applicability of the sectional approach, the two methods are then compared numerically in the configuration of counterflow spray diffusion flames. The two methods, if refined enough, give quite similar results, except for some small differences, the origin of which are identified. It is proved that the sampling method is more precise even if it generates oscillations due to the intrinsic representation of a continuous function by Dirac Delta functions. We thus provide a comprehensive analysis of the sectional approach from both the modeling and numerical point of view.*

2.1 Introduction

A broad literature has been devoted to gaseous diffusion flames, a class of flames which are widely studied and well modeled. However in a lot of industrial applications such as Diesel engines, fuel is stocked in condensed form and injected as a spray; spray is understood in the following as a dispersed liquid phase, i.e. we assume that the volume fraction occupied by the liquid is small compared to the one of the gas mixture. Two phase effects can significantly influence spray flame structures, even in the case of relatively thin sprays. It is then necessary to model the liquid phase in order to be able to predict spray combustion.

To this purpose, two general approaches have been classically considered; on the one side, modeling practical spray combustion systems involves difficulties stemming from the two-phase nature of the flow, its turbulence and the strong coupling of atomization and flow field. Consequently, even if experimental measurements are still possible, they do not lend themselves to well-controlled studies from which to extract the effects of individual variables. At the other end of the spectrum are the classical studies on single droplet burning, that have been the subject of a vast literature over the past forty years.

Intermediate in complexity between these two extremes are laminar spray flames which provides rich physical scenarios amenable to detailed modeling. Without turbulence complications, they can mimic various interactions that can occur in practical flames, the most important one for homogeneous flames being the droplet-flame interaction through the vaporization process coupled to the dynamics of droplets. In this context, an important feature of the sprays we consider is the poly-disperse character of the droplet distribution in sizes, which can strongly influence the spray flame structure if far from mono-disperse. We then have to model a poly-disperse spray carried by a multicomponent reactive gas flow. We consider the conservation equations governing multicomponent reactive gaseous mixtures [GM98] [Gio99], under the Low Mach Number approximation for an unconfined flame with constant pressure boundary conditions, so that it yields the isobaric flame equations [Gio99]. Because the spray is a dispersed phase, the coupling of the phases only occurs in additional source terms describing mass, momentum and heat exchanges between the two phases.

These exchange terms have to be evaluated, a description of the dispersed phase, chosen. Two types of models have been considered in the literature. The first one is of Lagrangian and particular type as it is described originally in [CSS77] [Duk80] [O'R81] [AOB89]. It is called "particle-fluid" in [Duk80] and "stochastic parcel method" in [O'R81]. The continuous distribution of droplets is approximated using a finite number of computational parcels; each parcel represent a number of droplets of identical size, velocity and temperature. Subsequently, the properties of the parcels injected at the upstream boundary and the changes the parcel properties undergo in time are chosen stochastically from the distribution that governs droplets behavior. This kind of method is currently used in many codes (See for example [Hy199]). The second one is of Eulerian type and can be subdivided into two classes. The first class was called by O'Rourke [O'R81] the full spray equations method. The principle is to subdivide the portion of the droplet phase space into computational cells and to use classical Eulerian schemes (finite difference, volumes..) in order to resolve the time evolution of the spray distribution function [GB78] [HW78]. The second class of methods was called the moment equation methods, where equations for only some moments of the spray distribution function are derived and solved through classical Eulerian schemes [THA76]. It has become classical that on the one hand, the full spray equations are too expensive from both the time consumption and the memory storage point of view (even in a 1D case, the phase space is of dimension 4), and that on the other hand, the moment equation method do not provide sufficient precision for most applications. For example many

Eulerian models which were defined in order to reduce the cost of fully Lagrangian models, usually relied on the approximation that the spray is mono-disperse [RS95], a very severe assumption for poly-disperse spray combustion [MKGS98]. Even in the case of some extensions such as [DS97] where a Eulerian semi-fluid method based on velocity moment closure of the probability density function at sampled size was used, the sampling in size prevents the possible interaction of droplet numerical particles and phenomena like coalescence can not be described.

The natural step forward is then the use of models, intermediate between the full spray equations model and the moment equations model, where some dimensions of the phase space are treated using moment equations and some others using the full spray equation method in such a way that enough precision with relatively low cost is reached. A first attempt at deriving such a model for sprays poly-disperse in size, was developed by Tambour et al. [GAT86]. They considered the first moments in the phase space corresponding to velocity and temperature, and discretized the continuous size phase space using a finite volume formulation. We can call such a method a multi-fluid method in that the dispersed phase is described as a set of continuous media : “fluids”, each “fluid” corresponding to a statistical average in a section : the cell defined by two fixed droplet sizes. Hence the method was named the sectional approach. The evolution of these coupled sections or “fluids” is governed by conservation equations for mass, momentum and enthalpy.

Most of these spray models have a common basis at what can be called “the kinetic level” under the form of a probability density function (also called the distribution function) satisfying the Williams equation [Wil58] [Wil85], which is of Boltzmann type. It is at this level that the link between Lagrangian particular methods based on ensemble average and the Eulerian Williams type equations based on either space or time average can be conducted (See [Duk80] [O’R81]). Greenberg et al. noticed in [GST93] that their model had also its origin at the “kinetic level”, trying to make the link with the Williams spray equation. However, this paper only provided the complete derivation of the sectional “multi-fluid” equations for the conservation of mass and number of droplets. Besides, the set of underlying assumptions was not provided at the “kinetic level” in such a way that the derivation of the momentum and energy equations for the various sections was out of reach.

In the present paper, we provide a theoretical basis for the sectional model at the “kinetic level”. It will be essential in order to extend this model to more complex situations, for example when coalescence is present [MV01] [LMV01]. We first clarify the set of assumptions necessary in order to derive the multi-fluid sectional model from the spray equation at the “kinetic level” and provide the derivation of the whole set of conservation equations describing the dispersed liquid phase. We then restrict ourselves to the context of 1D stationary flows where the droplets do not turn back. In this configuration, a Eulerian sampling approach and the usual particular methods are equivalent so that the comparison with the sectional method can be easily conducted. We then identify some situations, even in this restrictive framework, where the sectional approach fails to precisely reproduce the coupling of the vaporization and dynamics of the spray, the sampling method being then required.

In the domain of applicability of the sectional approach, the sectional and Eulerian sampling methods are then compared numerically in the configuration of counterflow spray diffusion flames. The two methods, if refined enough, give quite similar results, except for the Sauter Mean diameter where differences are to be found. We then switch to the simpler case of a purely mono-dimensional case where the dynamics and heating effects do not play any role: the vaporization of a poly-disperse spray in a hot gaseous environment where the droplets are injected at the saturation temperature with only one-way coupling. In such a case, the spray distribution function satisfies an advection equation in the phase space with constant speed so that

analytical solutions are available. The differences between the methods are then identified in this framework. It is then shown that the Eulerian sampling method is more precise even if it generates oscillations due to the intrinsic representation of a continuous function by Dirac Delta functions. We also emphasize that the choice of the projection step on constant functions of radius, surface as in [Dom98], volume as in [GST93] or some other power of the radius, the sectional approach is based on, is intrinsically arbitrary. We thus provide a comprehensive analysis of the sectional approach from both the modeling and numerical point of view, as well as a comparison of this method with the sampling approach.

The paper is organized as follows : we first present the general modeling of the problem in section 2. The derivation of the dispersed liquid phase conservation equations is investigated in section 3; the restrictions on the sectional approach are then presented in section 4. The numerical comparisons are conducted in section 5, in the context of counterflow spray diffusion flames and in section 6 for the case of the hot surrounding gas with no dynamical effects.

2.2 General modeling of the problem

The set of equations governing multicomponent reactive mixtures of dilute poly-atomic gases can be formally derived from the kinetic theory of gases [Gio99] [EG94] and yield a system of mixed hyperbolic parabolic equations describing hydrodynamics, complex dissipation phenomena such as viscous dissipation, multicomponent mass and heat diffusion, as well as chemistry through Maxwellian chemical source terms. The mathematical structure of this system has been studied in [GM98]. For the purpose of modeling laminar unconfined diffusion flames, we use the isobaric flames equations which is the Low Mach Number limit of the previous set of equations with constant pressure boundary conditions. Under this assumption, the pressure reads $p(t, x) = p_{atm} + \tilde{p}(t, x)$, \tilde{p} being a perturbation of the atmospheric pressure; the work of the pressure forces and of the viscous forces can be neglected, thus decoupling the energy equation from the hydrodynamics. The gas mixture is suppose to carry a dispersed liquid phase. For the flames we want to model, the zone of high chemical activity is usually located far enough from the injection and atomization area; besides, we deal with hydrocarbons so that the volume fraction occupied by the liquid is very small compared to the one of the gas at the stoichiometry, even if the specific densities with respect to the total volume, are of the same order. We can then assume that the coupling of the spray with the gaseous phase only occurs through added source terms in the set of equations describing isobaric purely gaseous flames. These source terms S^m , $S_k^{species}$, S^{mom} and S^{enth} represent the exchange of total mass, species, momentum and enthalpy. The corresponding system of Eulerian equations reads:

$$\partial_t \rho + \partial_x \cdot (\rho u) = -S^m, \quad (2.1)$$

$$\partial_t \rho_k + \partial_x \cdot (\rho_k u) = -\partial_x \cdot (\rho_k \mathcal{V}_k) + m_k \omega_k - S_k^{species}, \quad k \in S, \quad (2.2)$$

$$\partial_t (\rho u) + \partial_x \cdot (\rho u \otimes u) = -\partial_x \cdot \Pi - \partial_x \tilde{p} - S^{mom}, \quad (2.3)$$

$$\partial_t (\rho h) + \partial_x \cdot (\rho h u) = -\partial_x \cdot q - S^{enth}, \quad (2.4)$$

where ρ_k is the specific density of the k^{th} species, m_k its molar mass, ρ is the density of the gaseous mixture $\rho = \sum_{k \in S} \rho_k$, S is the set of species indices, u the mass averaged velocity of the mixture, ω_k the molar chemical production rate, h_k the enthalpy of the k^{th} species, $\rho h = \sum \rho_k h_k$ the enthalpy of the mixture. The dissipation fluxes : \mathcal{V}_k , the diffusion velocity of the k^{th} species, Π , the viscous stress tensor and q , the

heat flux, are given by the following expressions [EG94] :

$$\mathcal{V}_k = - \sum_{l \in S} D_{kl} (\partial_x X_l + \chi_l \partial_x \log T), \quad k \in S,$$

$$\mathbf{\Pi} = -(\kappa - \frac{2}{3}\eta)(\partial_x \cdot v)\mathbf{I} - \eta (\partial_x v + (\partial_x v)^t),$$

$$q = -\lambda \partial_x T + p \sum_{l \in S} \chi_l \mathcal{V}_l + \sum_{k \in S} \rho_k h_k \mathcal{V}_k,$$

where η and κ are respectively the shear and the bulk viscosities, where λ is the heat conductivity, $(D_{kl})_{k,l \in S}$ is the multicomponent diffusion matrix, $(\chi_l)_{l \in S}$ the thermal diffusion ratios and X_k the mole fraction of the k^{th} species, and where we have omitted the barodiffusion terms under the Low Mach Number approximation. It is important to note that the Dufour and Soret effects are symmetric one of the other [GM98]; they are associated with the coupling of thermal and mass diffusion, the Soret effect being of importance in some configurations [EG98] [BDGR00]. The other relations to be provided for the system of equations to be closed are the thermodynamics as well as the complex chemistry source terms which are to be found in [Gio99] [GM98].

At this point we need to express the source terms in (1-4) by modeling the evolution of the dispersed phase. It can be described by a probability density function at the ‘‘kinetic level’’ [Wil58] [Wil85] [Duk80] [DS97] [VH97]. So, assuming that the spray is constituted of spherical droplets characterized only by one geometry parameter ϕ , one velocity u_l and one temperature T_l , at low Weber number, the spray is characterized by a distribution function $f^\phi(t, x, \phi, u_l, T_l)$, also called probability density function, so that $f^\phi dx d\phi du_l dT_l$ is the probable number of droplets at time t , in the phase space elementary volume $dx d\phi du_l dT_l$ around the point (x, ϕ, u_l, T_l) . This distribution function f^ϕ satisfies the following transport equation [Wil58] :

$$\partial_t f^\phi + \partial_x \cdot (u_l f^\phi) + \partial_\phi (R_\phi f^\phi) + \partial_{u_l} \cdot (F f^\phi) + \partial_{T_l} (E f^\phi) = \Gamma + Q \quad (2.5)$$

where $R_\phi(t, x, \phi, u_l, T_l)$ is the rate of change of the droplet geometry, $F(t, x, \phi, u_l, T_l)$, the drag force applied by the gas on the droplet, $E(t, x, \phi, u_l, T_l)$, the rate of heat exchange between the two media, $\Gamma(t, x, \phi, u_l, T_l, f^\phi)$, the coalescence and dissociation collision integral operator, and $Q(t, x, \phi, u_l, T_l, f^\phi)$, the elastic collision integral operator. It is important to note that the two phases are coupled through the dependence of R_ϕ , F and E on the local gas composition, velocity and temperature; however for the sake of legibility, it is implicitly present in the (t, x) dependence of these coefficients.

We restrict our attention to thin sprays where coalescence, dissociation and elastic collisions can be considered as negligible; this is supposed to be reasonable in the configurations we are going to consider. It has to be noticed that the sectional approach can be extended to dense sprays, where droplets coalesce, in the context of the present derivation [MV01] [LMV01].

Besides, the velocity difference between the phases is supposed to be small enough so that we are not far from a Stokes regime. The drag coefficient can then be described by a Stokes law with convective corrections based on a relative Reynolds number, where the viscosity is evaluated at the mixture concentration and temperature in the boundary layer close to the surface (using the 1/3 rule) [CGW78] [AS89] [YC73] [LLW91]; for the configurations we consider, it is of order unity.

The vaporization rate R_ϕ and the heating rate E are taken from [AS89] in the framework of the infinite conductivity model; it allows to take into account the effect of convective transport, transient liquid heating

and Stefan flow using a modified “film theory”. For sprays in combustion environments, the heating history of the droplets has been shown to be important in order to correctly describe the vaporization process and a non-stationary evolution of the droplet temperature is necessary. The fact that we consider that only one temperature T_l completely characterizes the heating status of the droplet in the framework of a “kinetic” description restricts the transient heating models available to the infinite conductivity (See the discussion in subsection 4.1). For mono-component droplets, we then have :

$$S^m = \iiint \rho_l d_\phi V R_\phi f^\phi d\phi du_l dT_l, \quad (2.6)$$

$$S^{mom} = \iiint \rho_l V F f^\phi d\phi du_l dT_l + \iiint \rho_l d_\phi V R_\phi u_l f^\phi d\phi du_l dT_l \quad (2.7)$$

$$S_k^{species} = \delta_{k,F} S^m, \quad (2.8)$$

$$S^{enth} = \iiint \rho_l V c_{p,l} E f^\phi d\phi du_l dT_l + \iiint \rho_l d_\phi V R_\phi h_l f^\phi d\phi du_l dT_l \quad (2.9)$$

where $V(\phi)$ is the volume of the droplet, h_l the enthalpy of the liquid, $c_{p,l}$ the heat capacity of liquid at constant pressure and $\delta_{k,F}$ is taken to be one if the k^{th} species is the fuel, and zero otherwise. The source terms for momentum and heat are due to exchange through drag force and heating of the droplets but also to the vaporization process, the two phases having different velocities and temperature.

2.3 Modeling of the dispersed phase

In the following we derive the sectional conservation equations in d dimensions, $d = 1, 2, 3$ from the “kinetic level” of description.

We then make the link between the usual particular method and a Eulerian sampling approach in the restrictive framework of a mono-dimensional stationary situation where the droplets do not turn back. In this Eulerian sampled formulation, the trajectories of the groups of various size sampling the droplet distribution function at the entrance are followed with time (or equivalently space) and do not “see” each other along their trajectories, whereas in the sectional formulation, the sections are fixed in size and exchange mass, momentum and heat along the vaporization process. The principle of both approaches have been represented on Fig. 2.1.

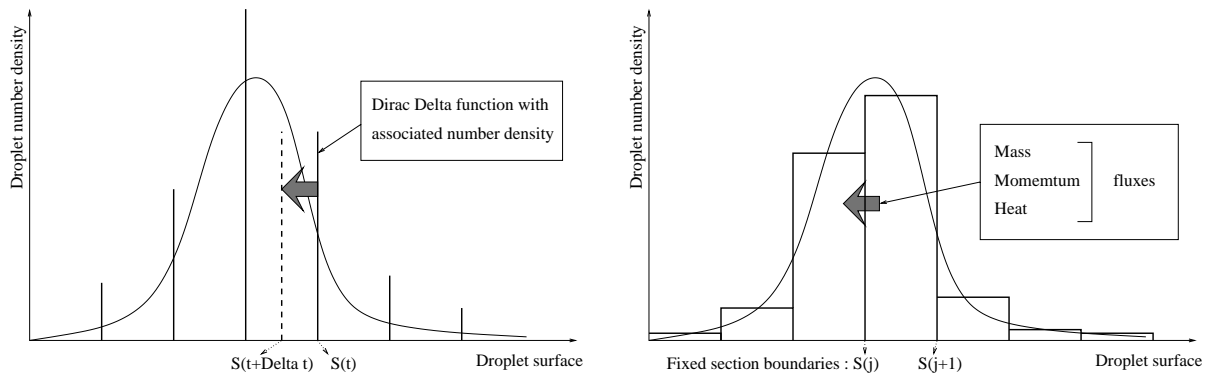


Figure 2.1: Principle of the Eulerian sampling (left) and of the Eulerian sectional (right) methods.

Let us mention that the framework of a 1D Eulerian sampling approach can include configurations where similarity is present and where the general solution of the problem can be obtained by similarity from a generic 1D stationary solution, such as counterflow flames. It is going to be well-suited and convenient for comparison purposes between the two approaches.

2.3.1 First multi-fluid model: the sectional approach

The sectional model, developed by Tambour and al. [GAT86] [GST93], is a discretization, in fixed radii sections, of the averaged value $n(t, x, \phi) = \iint f^\phi du_l dT_l$, the form of n as a function of the geometry being independent of t and x in a given section, thus decoupling the evolution of the mass concentration in a section from the repartition in terms of sizes. The set of droplet sizes is then divided in a few sections, the j^{th} section being defined by $\phi^{(j)} \leq \phi < \phi^{(j+1)}$.

It is interesting to note that in the original papers by Tambour and Greenberg, the natural variable chosen in order to describe the geometry of the droplet is the volume. In our approach, it can be taken as the volume, but also the surface or the radius of the droplet. One first choice is the one of the points $\phi^{(j)}$ which is the subject of a subsequent paper [LSN⁺02], the second one being the choice of the size variable in the phase space knowing that:

$$f^V(t, x, V, T_l, u_l) dV = f^R(t, x, R, T_l, u_l) dR = f^S(t, x, S, T_l, u_l) dS, \quad (2.10)$$

in such a way that the three distribution functions describe the same spray.

The purpose of this sub-section is to recover the usual equations of sectional approach [MKGS98] [GDS⁺96] from transport equation (2.5) by considering various moments in velocity and temperature and by using a finite volume formulation for the size phase space. This was done partially in [GST93] with mass and number density conservation equations. In this article, because no restriction was made on the structure of the distribution function, the derivation of the momentum and heat conservation equations were skipped.

At first, the structure of f^ϕ has to be simplified : we decouple the distribution in term of geometry, temperature and velocity. This is natural because the principle of the sectional approach is to take the first moments at a given size of the distribution function with velocity and temperature. f^ϕ then reads:

$$f^\phi(t, x, \phi, T_l, u_l) = n(t, x, \phi) \psi^\phi(T_l - T_d(t, x, \phi)) \prod_{k=1}^3 \varphi_k^\phi(u_{l,k} - u_{d,k}(t, x, \phi)) \quad (2.11)$$

where $T_d(t, x, \phi)$ and $u_d(t, x, \phi)$ are averaged quantities at a given size ϕ . The functions ψ^ϕ and φ_k^ϕ are taken positive of integral one and of zero first moment. φ_k^ϕ will be taken a Gaussian distribution around 0. The support of ψ^ϕ has to be included in $[-T_1, +\infty[$ if the function $T_d(t, x, \phi)$ is varying in $[T_1, T_2]$ because there is no negative temperature. It can be proved that such a function exists and that its dispersion around the mean value can be characterized.

Remark. These assumptions on the form of f^ϕ could be physically related to the existence of an equilibrium in some sense at the “kinetic level”. However, in the present configuration of laminar flows, such an assumption is not likely to be met. It is, in fact, of technical type in order to explain and justify the underlying assumptions on the sectional approach. It yields a natural derivation of a closed semi-kinetic system of equations; the influence of the dispersion around the mean value for the velocity and temperature can then be easily characterized.

Remark. It is natural to assume the form (2.11), with a ϕ dependence of the functions φ_k and ψ (for example the dispersion around the mean value). In the following, for the sake of clarity, we omit the ϕ dependence. It has no influence on the derivation itself.

We then derive a system of conservation equations on n , u_d and T_d (through the corresponding enthalpy). Equation (2.5) is multiplied by 1, u_l and $h_l(T_l)$ and integrated over velocity and temperature. We get:

$$\partial_t n + \partial_x \cdot (n u_d) + \partial_\phi (n \overline{R_\phi}) = 0 \quad (2.12)$$

$$\partial_t (n u_d) + \partial_x \cdot (n u_d \otimes u_d + n P) + \partial_\phi (n \overline{R_\phi u_l}) = n \overline{F} \quad (2.13)$$

$$\partial_t (n \overline{h_l}) + \partial_x \cdot (n u_d \overline{h_l}) + \partial_\phi (n \overline{R_\phi h_l}) = n \overline{c_{p,l} E} \quad (2.14)$$

where, for a function $G(t, x, \phi, u_l, T_l)$, \overline{G} denotes:

$$\overline{G}(t, x, \phi) = \int_{\mathbb{R}^3} \int_{\mathbb{R}} G(t, x, \phi, u_l, T_l) \varphi(u_l - u_d(t, x, \phi)) \psi(T_l - T_d(t, x, \phi)) dT_l du_l \quad (2.15)$$

and where the diagonal tensor P is related to the dispersion in velocity around the mean value u_d in all directions: $P_{k,k} = \int_{\mathbb{R}} v^2 \varphi_k(v) dv$. At this point, the enthalpy of the droplet has to be related through a one-to-one function to the characteristic temperature of the droplet, an assumption satisfied by the infinite conductivity model [AS89].

For the system to be closed, we have either to give a constitutive law for this pressure equivalent term or, as in the usual equations [GST93] [MKGS98], to assume that there is no velocity dispersion at a given droplet size. Experimental data at the entrance of the domain will confirm the former case [LSN⁺02]. Besides, we want $\overline{R_\phi u_{l,k}} = \overline{R_\phi} u_{d,k}$ and $\overline{R_\phi h_l} = \overline{R_\phi} \overline{h_l}$ so that, R_ϕ being a function of the droplet temperature, the dispersion in temperature has to be zero too. Finally, the distribution function is the product of the number density and Dirac Delta functions $f^\phi = n(t, x, \phi) \delta(T_l - T_d(t, x, \phi)) \delta(u_l - u_d(t, x, \phi))$.

In order to recover the usual sectional conservation equations in the mass variables, we have to average the previous set of equations in each section. So, we multiply (10-12) by $\rho_l V(\phi)$, where ρ_l is the liquid mass density and integrate over ϕ between $\phi^{(j)}$ and $\phi^{(j+1)}$. The fundamental sectional assumption reads, inside the j^{th} section [GST93]:

$$n(t, x, \phi) = m^{(j)}(t, x) \kappa^{(j)}(\phi), \quad m^{(j)}(t, x) = \int_{\phi^{(j)}}^{\phi^{(j+1)}} \rho_l V(\phi) n(t, x, \phi) d\phi \quad (2.16)$$

so that the profile of n in a given section is fixed as a function only of the geometry of the droplet and does not depend on t and x . While still fixed as a function of the geometry, $\kappa^{(j)}(\phi)$ depends on the choice for ϕ and will be different for V , S and R ; however, once chosen a function $\kappa^{(j)}(\phi)$ for a given ϕ , it sets the profiles for other powers of R through (2.10).

Remark. For rapidly changing distribution functions, the most reasonable choice, from the precision point of view, is to take the distribution function constant in a section and to refine the discretization size step, since such a method can be proved to be of order one [LM02]. This can be viewed as a “projection” step. It has to be noticed that the natural case considered by Greenberg et al. [GST93] was to take $\kappa^{(j)}(V)$ as constant. It was already noticed [Dom98] that this choice carries some arbitrariness and that the natural choice should be to take $\kappa^{(j)}(S)$ as constant, without further details. We would like to emphasize that

this choice is completely arbitrary and is intrinsically related to the structure of the sectional approach which pre-supposes a “shape” of the distribution function inside a section independent from the status of the distribution outside the section. This will be proved in Section 6 where we will consider a test case where analytical solution are available and compare the results for various “projection” choices.

Let us introduce the other notations of averaged velocity, averaged drag force, averaged enthalpy and average rate of heat exchange between the two phases:

$$u_d^{(j)}(t, x) = \frac{1}{m^{(j)}(t, x)} \int_{\phi^{(j)}}^{\phi^{(j+1)}} \rho_l V u_d n \, d\phi, \quad (2.17)$$

$$F^{(j)}(t, x) = \frac{1}{m^{(j)}(t, x)} \int_{\phi^{(j)}}^{\phi^{(j+1)}} \rho_l V \bar{F} n \, d\phi, \quad (2.18)$$

$$h_d^{(j)}(t, x) = \frac{1}{m^{(j)}(t, x)} \int_{\phi^{(j)}}^{\phi^{(j+1)}} \rho_l V \bar{h}_l n \, d\phi, \quad (2.19)$$

$$Q^{(j)}(t, x) = \frac{1}{m^{(j)}(t, x)} \int_{\phi^{(j)}}^{\phi^{(j+1)}} \rho_l V \overline{c_{p,l} E} n \, d\phi, \quad (2.20)$$

We then integrate by parts the terms containing $\overline{R_\phi}$ in order to separate the exchange terms between successive sections from the exchange terms with the gaseous phase. In order to recover the mass conservation equation, we can introduce, as in [GST93]:

$$E_1^{(j)} = -\rho_l V \left(\phi^{(j)} \right) \overline{R_\phi}(t, x, \phi^{(j)}) \kappa^{(j)}(\phi^{(j)}), \quad (2.21)$$

$$E_2^{(j)} = - \int_{\phi^{(j)}}^{\phi^{(j+1)}} \rho_l d_\phi V \overline{R_\phi}(t, x, \phi) \kappa^{(j)}(\phi) d\phi, \quad (2.22)$$

and we obtain the traditional sectional mass conservation equation [GST93]. For the momentum conservation equation, we have to make some additional assumptions at the boundaries $u_d(t, x, \phi^{(j)}) = u_d^{(j)}(t, x)$ but also in the averaging process :

$$\int_{\phi^{(j)}}^{\phi^{(j+1)}} \rho_l V u_d \otimes u_d \kappa^{(j)} \, d\phi = m^{(j)} u_d^{(j)} \otimes u_d^{(j)}, \quad (2.23)$$

$$- \int_{\phi^{(j)}}^{\phi^{(j+1)}} \rho_l d_\phi V \overline{R_\phi} u_d \kappa^{(j)} \, d\phi = E_2^{(j)} u_d^{(j)}. \quad (2.24)$$

These assumptions are satisfied if u_d is assumed to be constant in a section, for all t and x . Likewise, some assumptions have to be satisfied for the enthalpy equations, in such a way that T_l is assumed constant in a section, for all t and x .

We finally obtain a system of conservation equations:

$$\partial_t m^{(j)} + \partial_x \cdot (u_d^{(j)} m^{(j)}) = -(E_1^{(j)} + E_2^{(j)}) m^{(j)} + E_1^{(j+1)} m^{(j+1)}, \quad (2.25)$$

$$\partial_t (m^{(j)} u_d^{(j)}) + \partial_x \cdot (m^{(j)} u_d^{(j)} \otimes u_d^{(j)}) = -(E_1^{(j)} + E_2^{(j)}) m^{(j)} u_d^{(j)} + E_1^{(j+1)} m^{(j+1)} u_d^{(j+1)} + m^{(j)} F^{(j)}, \quad (2.26)$$

$$\partial_t (m^{(j)} h_d^{(j)}) + \partial_x \cdot (m^{(j)} h_d^{(j)} u_d^{(j)}) = -(E_1^{(j)} + E_2^{(j)}) m^{(j)} h_d^{(j)} + E_1^{(j+1)} m^{(j+1)} h_d^{(j+1)} + m^{(j)} Q^{(j)}, \quad (2.27)$$

with the set of assumptions :

- H1** – the probability density function of the spray is such that at a given size, there are one and only one characteristic velocity and one and only one characteristic temperature.
- H2** – the dispersion in the distribution function at a given size is zero for velocity and temperature.
- H3** – in one section, the characteristic velocity and characteristic temperature do not depend on the size of the droplets.

These conservation equations have to be completed by a droplet heating and vaporization model as well as a drag model.

The source terms in the gas phase equations read :

$$S^m = \sum_{i=1}^N -E_2^{(j)} m^{(j)}, \quad S^{mom} = \sum_{i=1}^N -E_2^{(j)} m^{(j)} u_d^{(j)} + \sum_{i=1}^N m^{(j)} F^{(j)} \quad (2.28)$$

$$S^{enth} = \sum_{i=1}^N -E_2^{(j)} m^{(j)} h_d^{(j)} + \sum_{i=1}^N m^{(j)} Q^{(j)} \quad (2.29)$$

The tail of the distribution is difficult to treat correctly all the more since we have to choose a maximal radius which is going to influence the behavior of the “biggest” section in the mean; this is equivalent to arbitrarily assume a boundary condition for big droplets without another background than the fact that the mass density of liquid can be considered as negligible beyond some given drop size. This topic of choosing the right boundary conditions for the distribution tails is studied in [LSN⁺02] with the help of experimental measurement in the framework of the sectional approach. This will be a key point for the extension of the sectional approach to situations where coalescence has to be taken into account [MV01] [LMV01].

2.3.2 Second multi-fluid model: the sampling

The classical Lagrangian description of a spray consists in approximating the initial distribution by a sum of Dirac delta functions and in following in time the trajectories of the corresponding numerical droplet groups also called parcels. The numerical distribution then reads :

$$f_{PL}^\phi(\tau, x, \phi, u_l, T_l) = \sum_{i=1}^{N(\tau)} N_{PL}^{(i)} \delta(x - X^{(i)}(\tau)) \delta(\phi - \phi_{PL}^{(i)}(\tau)) \delta(u_l - u_{PL}^{(i)}(\tau)) \delta(T_l - T_{PL}^{(i)}(\tau)), \quad (2.30)$$

where the subscript P stands for parcel and the subscript L for Lagrangian; in the previous equation, $N(\tau)$ is the total number of parcels in the computational domain, $N_{PL}^{(i)}$ denotes the number of droplets in this i^{th} parcel, $X^{(i)}(\tau)$, its spatial location, $\phi_{PL}^{(i)}$, the size of the droplets contained in the i^{th} parcel, $u_{PL}^{(i)}$, their velocity and $T_{PL}^{(i)}$ their temperature. It is worth to underline that τ is the Lagrangian time. We have also to introduce the discrete injection times τ^k with an adjusted injection frequency such that the liquid flux at the boundary is correctly reproduced. We then have two samplings : one in the phase space with the choice of the $(\phi_{PL}^{(i)}, u_{PL}^{(i)}, T_{PL}^{(i)})_{i \in [1, N]}$ at the entrance and one in time for the injection of the parcels.

The source term in the gas phase equations are then obtained by summing the contributions of the various parcels. Yet the framework of the present study is a Eulerian one and, for comparison purposes, we restrict ourselves to a one-dimensional stationary configuration, where the droplets do not turn back. In such a

configuration, all the parcels starting with the same entrance conditions will have the same trajectories in the phase space. We then consider a non-stochastic version of the particular method where we decouple the sampling in the phase space at the boundary (denoted by the index i) from the sampling in time (denoted by the index k) which is performed with a constant time step. The new numerical distribution then takes the expression :

$$\begin{aligned} \tilde{f}_{PL}^\phi(\tau, x, \phi, u_l, T_l) = \\ \sum_{k=1}^K \sum_{i=1}^N N_{PL}^{(i)} \delta(x - X^{(i,k)}(\tau)) \delta(\phi - \phi_{PL}^{(i,k)}(\tau)) \delta(u_l - u_{PL}^{(i,k)}(\tau)) \delta(T_l - T_{PL}^{(i,k)}(\tau)), \end{aligned} \quad (2.31)$$

where KN is the total number of parcels in the computational domain, N the number of parcels injected at each injection time, where the injection times of the i^{th} parcel are such that $\tau^{k+1,i} - \tau^{k,i} = \Delta\tau^i$ is constant and given, and where the superscript (i, k) relates to a parcel of the i^{th} kind injected at the time $\tau^{k,i}$. The trajectories in the phase space of the various parcels of the i^{th} kind are only shifted in time ($X^{(i,k)}(\tau + \Delta\tau^i) = X^{(i,k-1)}(\tau)$, and similarly for the other properties). The relation between the injection flux at the boundary $I^{(i)}$ of parcels of the i^{th} kind and their injection frequency reads:

$$I^{(i)} = \frac{N_{PL}^{(i)}}{\Delta\tau^i}. \quad (2.32)$$

It is then possible to have a Eulerian sampling description of the spray since the trajectory description in terms of time τ is equivalent to the Eulerian description in terms of spatial location x because the functions $\tau \rightarrow X^{(i)}(\tau)$ are one to one. In the following, since the trajectories of parcels of the i^{th} kind are only shifted in time, we introduce the new reference time t which can be called the stationary Lagrangian time; it is related to the Lagrangian time by only a shift and it is taken to be 0 at the injection boundary where $x = 0$.

We can then reformulate the distribution function as:

$$\begin{aligned} f_{SE}^\phi(x, \phi, u_l, T_l) &= \sum_{i=1}^N n_{SE}^{(i)}(x) \delta(\phi - \phi_{SE}^{(i)}(x)) \delta(u_l - u_{SE}^{(i)}(x)) \delta(T_l - T_{SE}^{(i)}(x)) \\ &= \sum_{i=1}^N n_{SL}^{(i)}(t) \delta(\phi - \phi_{SL}^{(i)}(t)) \delta(u_l - u_{SL}^{(i)}(t)) \delta(T_l - T_{SL}^{(i)}(t)), \end{aligned} \quad (2.33)$$

where the subscript E stands for Eulerian, S for ‘‘Sampling’’, $n_{SE}^{(i)}(x)$ and $n_{SL}^{(i)}(t)$ are the number densities of droplets of the i^{th} kind per unit volume at respectively the location x and at the time t . We have the following correspondence :

$$I^{(i)} = n_{SL}^{(i)}(0)u_{SL}^{(i)}(0) = n_{SL}^{(i)}(t)u_{SL}^{(i)}(t) = n_{SE}^{(i)}(0)u_{SE}^{(i)}(0) = n_{SE}^{(i)}(x)u_{SE}^{(i)}(x), \quad (2.34)$$

$$n_{SE}^{(i)}(x) \Big|_{x=X^{(i)}(t)} = n_{SL}^{(i)}(t), \quad \phi_{SE}^{(i)}(x) \Big|_{x=X^{(i)}(t)} = \phi_{SL}^{(i)}(t), \quad (2.35)$$

$$u_{SE}^{(i)}(x) \Big|_{x=X^{(i)}(t)} = u_{SL}^{(i)}(t), \quad T_{SE}^{(i)}(x) \Big|_{x=X^{(i)}(t)} = T_{SL}^{(i)}(t). \quad (2.36)$$

It has to be noticed that the number densities are given by $n_{SL}^{(i)}(t) = I^{(i)}/u_{SL}^{(i)}(t)$ and $n_{SE}^{(i)}(x) = I^{(i)}/u_{SE}^{(i)}(x)$; they are only defined when the droplet velocity do not change sign. When $t \rightarrow X^{(i)}(t)$, $i \in [1, N]$, are not one to one, a Lagrangian particle formulation (2.31) has to be retained.

The only point missing for a complete link between the Eulerian sampling formulation (2.33) and the Lagrangian non-stochastic particle approach (2.31) is the relation between the number density $n_{SE}^{(i)}(x)$ and the parcels located in the neighborhood of x . There is no direct correspondence, only an integral one; one has to integrate the number density over a small distance Δx and count how many parcels are to be found in it. We will then obtain, from the Lagrangian approach an average number density over the distance Δx ; this interval has to be large enough so that enough parcels are present, and small enough compared to the variations of $n_{SE}^{(i)}(x)$. In the present case of a stationary problem, the injection frequency can be taken large enough and a time average can be performed in such a way that the two approaches are equivalent.

In the following we will work with the SE formulation (2.33) and, for the sake of legibility, we will not retain the subscript SE but only use the S one.

The transport equation (2.5) is now satisfied in the sense of distribution. In order to find equation on density, size, velocity and temperature of each groups, the duality product is express with test functions of the form: $g(\phi, u_l, T_l)\Psi(t, x)\varphi^{(i)}(\phi, u_l, T_l)$ where g is successively 1, $\rho_l V$, $\rho_l V u_l$ and $\rho_l V h_l(T_l)$; Ψ is a function with a compact support and $\varphi^{(i)}$ is a function with a compact support constantly equal to one in a neighborhood of $(\phi_S^{(i)}, u_S^{(i)}, T_S^{(i)})$. If, for a function $G(x, \phi, u_l, T_l)$, $G^{(i)}(x) = G(x, \phi^{(i)}(x), u_S^{(i)}(x), T_S^{(i)}(x))$, and if $\rho_S^{(i)} = \rho_l V^{(i)} n_S^{(i)}$, $V^{(i)}$ being the volume of a droplet of the i^{th} group, we obtain the conservation equations of droplets density, mass, momentum and energy:

$$\partial_x \cdot (u_S^{(i)} n_S^{(i)}) = 0 \quad (2.37)$$

$$\partial_x \cdot (\rho_S^{(i)} u_S^{(i)}) = \rho_l (d_\phi V)^{(i)} R_\phi^{(i)} n_S^{(i)} \quad (2.38)$$

$$\partial_x \cdot (\rho_S^{(i)} u_S^{(i)} \otimes u_S^{(i)}) = \rho_l (d_\phi V)^{(i)} R_\phi^{(i)} n_S^{(i)} u_S^{(i)} + \rho_S^{(i)} F^{(i)} \quad (2.39)$$

$$\partial_x \cdot (\rho_S^{(i)} h_l(T_S^{(i)}) u_S^{(i)}) = \rho_l (d_\phi V)^{(i)} R_\phi^{(i)} n_S^{(i)} h_l(T_S^{(i)}) + \rho_S^{(i)} c_{p,l}^{(i)} E^{(i)} \quad (2.40)$$

One has first to note that the evolution of the volume of droplet on the trajectories can be obtained from the first two equations $u_S^{(i)} \cdot \partial_x V^{(i)} = (d_\phi V)^{(i)} R_\phi^{(i)}$. The system of equations is then completely determined by a droplet vaporization and heating model ($R_\phi^{(i)}, E^{(i)}$) as well as a drag model ($F^{(i)}$).

We then can evaluate the corresponding source terms into the gas phase equations

$$S^m = \sum_{i=1}^N \rho_l (d_\phi V)^{(i)} R_\phi^{(i)} n_S^{(i)}, \quad S^{mom} = \sum_{i=1}^N \rho_S^{(i)} F^{(i)} + \sum_{i=1}^N \rho_l (d_\phi V)^{(i)} R_\phi^{(i)} n_S^{(i)} u_S^{(i)} \quad (2.41)$$

$$S^{enth} = \sum_{i=1}^N \rho_S^{(i)} c_{p,l} E^{(i)} + \sum_{i=1}^N \rho_l (d_\phi V)^{(i)} R_\phi^{(i)} n_S^{(i)} h_S^{(i)} \quad (2.42)$$

The main advantage of a method of particles is that there is no numerical diffusion in the description of the trajectories in the phase space, the initial solution is approximated at the boundary by a sum of Dirac delta functions and remain such; it can be generalized, in its purely Lagrangian form (2.30), to a lot of situations.

Nevertheless, this kind of method also inherits the drawbacks of the particle methods. Numerical simulations involving a sampling in time and phase space of the distribution function f^ϕ generate heavy demands on computer resources, the number of stochastic particles becoming rapidly important. Besides, it is generally quite difficult to precisely define the boundary conditions for f^ϕ , whereas its moments are usually accessible through experimental measurements for quantitative comparisons. One of the main problem is

to precisely define how to switch from the continuous problem to the discrete problem; one has to take enough points of discretization in order to have a good representation of the boundary conditions on the distribution function; besides, because of the coupling between the dynamics and the vaporization process, some distance can develop between two successive samples in size so that the actual continuous function is not well sampled by the discrete one; finally, the choice of the reconstruction algorithm can also bring some problems in the regions where the samples are moving quickly in the phase space. This is not the purpose of the present paper to come back to these theoretical aspects of the particle method which have been already widely studied (See for example [Rav85]).

The sectional approach then appears as an attractive Eulerian multi-fluid model even if restricted to problems where assumptions **H1**, **H2** and **H3** are satisfied. The purpose of the section 4, before comparing the two approaches from a numerical point of view on several test cases in section 5 and 6, is to test if these assumptions are very restrictive and to exhibit a case where the sectional approach is out of its domain of validity.

2.4 Restrictions associated to the sectional approach

2.4.1 Refinement of the droplet model, history terms

It has to be noticed that the refinement of the drag, vaporization and heating models, can not go beyond a given limit in the context of the sectional approach; actually, the life history of a droplet can not be traced out with this kind of model where the various sections exchange mass, momentum and heat; the droplets will move from section to section, thus making any link with the life history, in the Lagrangian sense, impossible. The effective conductivity model [AS89] for example, describes the heating history of the droplet into its details, and it is incompatible with the sectional approach.

It is usually considered that one advantage of the Lagrangian models is to be able to implement more detailed models, for example such as heating history or acceleration history of the droplets. However, these models, developed in the framework of the study of one droplet are then difficult to justify in the framework of sprays. More precisely, following a droplet history, with all the possible details has to be compatible with the description in terms of probability density functions and phase space. Let us take for example the case of the effective conductivity model as a “better” model for the heating of the droplets than the infinite conductivity model; in such a case, even if it is still possible to write the spray equation in a phase space of infinite dimension, it would be very difficult to justify the sampling of the spray by a finite number of Dirac delta functions. Besides, taking only some Dirac delta functions and refining the model does not bring any extra information on the cloud, if it is impossible to relate the life of one group of droplets to the life of the whole spray.

Consequently, we will check that the use of the infinite conductivity model is close enough to the use of the effective conductivity model [AS89] so that we are sure that the thermal inertia of the droplets in the considered clouds are described well enough by the infinite conductivity model. Nevertheless, the only infinite conductivity model has a “kinetic” background and can be used in order to describe the spray as a whole.

The vaporization and heating models can still be refined at the level of the “modified film theory” by implementing a new model including new effects, such as thermal diffusion (Soret effect) [BDGR00], but history terms cannot be taken into account.

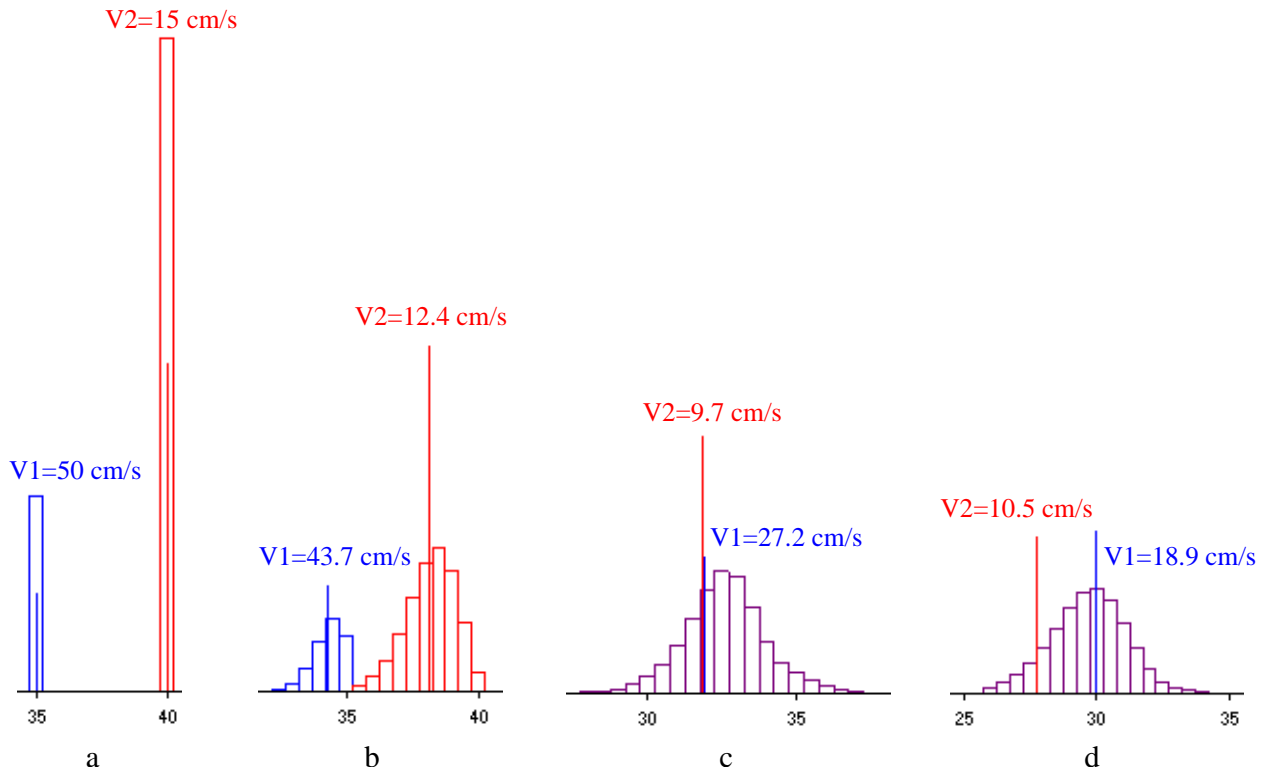


Figure 2.2: Mass Distribution function as a function of droplet radius at $z = 0$, $z = 0.45$ mm, $z = 1.7$ mm and $z = 2.45$ mm with both sectional and sampling (the mass scale is the same for the four figures) and velocity of each group (V1 for the first group and V2 for the second) for the sampling method.

2.4.2 A case out of the validity limit

The sectional approach can not precisely resolve situations where two droplets of similar sizes located at the same point have various velocities and temperatures. In such a case, artificial averaging processes of the dynamics and heating of the cloud take place. It can happen, even in the case of a 1D problem without turning back of the droplets, as will be shown in the following.

Let us consider a mono-dimensional non-reacting stationary system where a gas is flowing at a constant velocity of 15 cm.s^{-1} at a temperature of 500 K and we inject two groups of droplets, one of radius $35 \mu\text{m}$ at a velocity of 50 cm.s^{-1} and one of radius $40 \mu\text{m}$ at velocity of 15 cm.s^{-1} , the same as the one of the gas. Gravity is acting on both groups. Bigger droplets being slower, their residence time in the first part of the hot flow is longer so that they have more time to vaporize in this region and eventually, there exist a point where the two groups come to the same size. The spray is assumed diluted enough (very thin spray) so that the liquid phase has no influence on the gaseous phase and we only consider the one-way coupling of the phases.

We compare the predicted droplet vaporization and dynamics with both approaches, sampling and sectional. Sampling particularly suits this system with two Dirac delta functions corresponding to the two groups of droplets. The first-order spray equations are integrated with the solver described in sub-section 5.3 for the liquid phase. A simulation with this method shows a 'crossing' of radii: the evolution as a function of the spatial coordinate z of the distribution function is represented on Fig. 2.2 and shows that the two

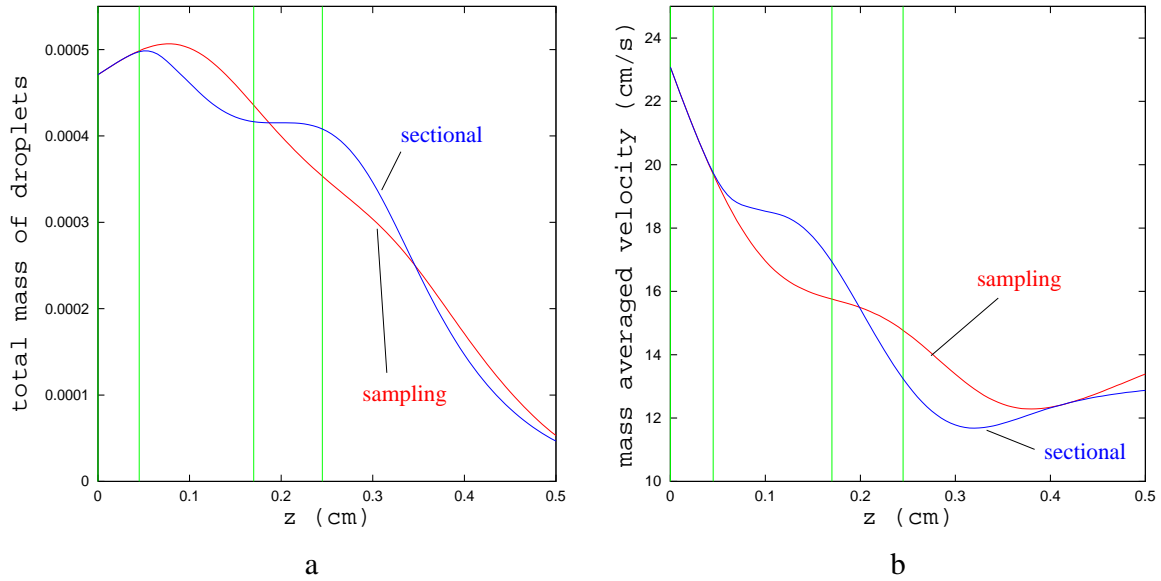


Figure 2.3: Evolution of total mass and averaged velocity in both approaches, sectional and sampling; the first vertical line corresponds to Fig. 2b (collision of the two groups for the sectional approach) the second one to Fig. 2c (crossing of radii for the sampling) and the third one to Fig. 2d (separation of the Dirac delta functions).

Dirac delta functions get closer and cross at $z = 1.7$ mm (Fig. 2.2c) before separating. At the crossing, the two groups still have different velocities, the one of the initially small droplets still being more than 25 cm.s^{-1} , much above the one of the other group around 10 cm.s^{-1} .

A simulation with the sectional approach is also conducted in this case; we take 32 sections which cover the radii interval $[0, 40.25]$ micrometers. At $z = 0$, two sections correspond to the two groups of droplets (with the same velocity and the same mass). The mass of the other sections is taken to be zero. The same numerical method is used as for the sampling. The evolution as a function of the spatial coordinate z of the distribution function is shown on Fig. 2.2. It is pretty clear that both approaches are equivalent until the point where the two groups “collide”, a point corresponding to Fig. 2.2b and indicated by the first vertical line on later Fig. 2.3 representing the mass averaged velocity as well as the total mass concentration of liquid. At that point, the sectional approach is starting an averaging process in the middle sections where only one velocity can be taken into account. This averaging results in a change of the mass averaged velocity shown on Fig. 2.3b, as well as the total mass concentration of liquid on Fig. 2.3a. After the crossing, the artificial averaging of the two velocities done by the sectional approach also results in only one dynamics for the whole set of droplets; the two groups then stick together with a unique averaged momentum on Fig.2.2d. However, with the sampling method, the two groups separate after the “collision” and their own dynamics are preserved, as represented on Fig.2.2d.

This test case is not related to any realistic setup, but shows a simple example of a configuration beyond the limitations of the sectional approach where assumption **H1** is not satisfied. Two questions then arise; firstly, are there situations where it is automatically verified? It is the case when the droplets trajectories do not cross. As an example, we can consider stationary flows where inertia effects are very small and the droplet trajectories are the gas stream lines in the limit of small Stokes numbers. However, the assumption that the droplet trajectories do not cross is restrictive and it is not satisfied in the counterflow situation for

example, even if, as we will see, assumption **H1** can be satisfied. It then appears that the validity of this assumption has to be checked in the considered configuration

The second question is related to the real impact of the artificial averaging process performed by the sectional approach when out of its domain of validity. It is an important question since assumption **H1** is not likely to be satisfied in general 2D or 3D configurations such as vortices. The use of this Eulerian multi-fluid model in the context of a really 2D or 3D configuration with inertia effects requires to prove that the resulting averaging of the velocities and temperatures does not result in a deep modification of the dynamics and heating of the cloud. This question is the topic of our current research.

Once the limitations of the Eulerian multi-fluid model has been studied, let us compare it to the sampling approach in a realistic configuration: counterflow spray diffusion flames.

2.5 Spray counterflow diffusion flames

Within the laminar spray flames, counterflow spray diffusion flames have been the focus of a few studies in the past due to the fact that under appropriate conditions, they can be modeled by a one-dimensional two-point boundary value problem. This configuration, a priori within the framework of the sectional approach, offers the possibility of detailed numerical simulations. Comparisons with experimental measurement [GDS⁺96, MKGS98] showed the validity of the proposed poly-disperse modeling. However, the assumptions associated to the use of the sectional approach were not checked and the sectional approach never compared to the classical sampling method. This is the purpose of the present section.

2.5.1 Modeling

We will only give very brief presentation of the modeling of a 2D axisymmetrical plane flame between a liquid fuel jet convected by an inert gas and an oxidizer jet. The flames we are going to consider are homogeneous so that the droplets are not surrounded by a flame sheet, single or group droplet burning is not present in the models we consider. They can be pseudo gaseous in that the vaporization is clearly separated from the flame front or direct droplet-flame interaction can occur when droplets are flowing into the flame but do not turn back.

Counterflow spray diffusion flames are not the subject of this paper, but rather an ideal test case for comparing two numerical methods. We refer to [GDS⁺96] [MKGS98] and references therein for further descriptions of these flames.

In the case of a purely gaseous flame, the system of equations admits a 1D exact similarity solution with the functional dependences:

$$\rho = \rho(z), \quad \rho_k = \rho_k(z), \quad \rho u_z = V(z), \quad u_r = rU(z), \quad T = T(z), \quad \tilde{p} = -J \frac{r^2}{2} + \hat{p}(z) \quad (2.43)$$

where u_z is the axial velocity, u_r the radial velocity, V is the axial mass flux, U is the reduced radial velocity and J is the reduced pressure gradient.

The 1D similarity solution with (2.43) is still an exact solution of this 2D system for the gaseous phase if the added source terms S^m , $S_k^{species}$, $\frac{1}{r} S_r^{mom}$, S_z^{mom} and S^{enth} , as well as the boundary conditions, have no radial dependence.

We then assume coherent functional dependences for the spray variables :

$$\rho_S^{(i)} = \rho_S^{(i)}(z), \quad \rho_S^{(i)} u_{S,z}^{(i)} = V_S^{(i)}(z), \quad u_{S,r}^{(i)} = r U_S^{(i)}(z), \quad (2.44)$$

for the sampling, as well as :

$$m^{(j)} = m^{(j)}(z), \quad m^{(j)} u_{d,z}^{(j)} = V_d^{(j)}(z), \quad u_{d,r}^{(j)} = r U_d^{(j)}(z), \quad (2.45)$$

for the sectional approach. However, the convective correction terms in the drag force:

$$F(R, u, u_l) = \frac{9}{2} \left(1 + \frac{(R_{ed})^{2/3}}{6} \right) \frac{\mu}{\rho_l R^2} (u - u_l), \quad R_{ed} = \frac{2R|u - u_l|}{\nu}, \quad (2.46)$$

bring a radial dependence to $\frac{1}{r} S_r^{mom}$ and S_z^{mom} . This problem can be solved by the use of the axial Reynolds Number

$$R_{ed}^{ax} = \frac{2R|u_z - u_{l,z}|}{\nu}$$

instead of the Reynolds Number R_{ed} in these correction terms. The two 2D axisymmetrical solutions, corresponding to the two 1D problems with R_{ed} and R_{ed}^{ax} , coincide on the centerline $r = 0$; consequently, there exists a region around it, where the two solutions remain close to each other, this region becoming smaller when the strain rate is increased. For our purpose of numerical comparisons, we will only consider R_{ed}^{ax} in this study.

2.5.2 Two flames, inlet conditions

The set of comparisons is going to be conducted on two heptane flames representing a medium strain rate flame and a high strain rate flame. The first flame is referred to as Flame A. Total mass fluxes are $\rho v_{fuel} = 0.055 g.cm^{-2}.s^{-1}$, $\rho v_{ox} = 0.039 g.cm^{-2}.s^{-1}$; fuel and oxidizer mass fractions in the two streams are $Y_{C_7H_{16}} = 0.23$, $Y_{O_2} = 0.412$. The temperature is $299K$ on both sides. The extrapolated velocity gradients at the boundaries are $\partial_z v_{fuel} = 41 s^{-1}$, $\partial_z v_{ox} = 64 s^{-1}$, for a burner separation of $1.2cm$. For the second one, referred to as Flame B, the strain rate reaches $280 s^{-1}$, it is a high strain rate flame for which direct droplet-flame interaction occurs. We have $\rho v_{fuel} = 0.077 g.cm^{-2}.s^{-1}$, $\rho v_{ox} = 0.079 g.cm^{-2}.s^{-1}$; fuel and oxidizer mass fractions in the two streams are $Y_{C_7H_{16}} = 0.21$, $Y_{O_2} = 0.66$. The temperature is $299K$ on both sides. The extrapolated velocity gradients at the boundaries are $\partial_z v_{fuel} = 10 s^{-1}$, $\partial_z v_{ox} = 83 s^{-1}$, for a burner separation of $1.365cm$.

For the present comparison, we choose the sections equi-distributed in radius as in [MKGS98] but refined the discretization up to 30 sections. An experimental distribution function is chosen from [LSN⁺02]; the 30 sections are represented on Fig. 2.4 where we have plotted the spray number density. An analysis for the best choice of the section boundaries and for the reduction of the number of sections is given in [LSN⁺02]. For the sectional approach, the variable used in the model to describe the geometry of droplets is the radius : $\phi = R$; the distribution function is chosen constant in each section (see Fig. 2.4). For the sampling method, we take Dirac delta functions at radii such that the amount of mass and surface in the group is the same as the one in the corresponding section; the obtained radius is then the Sauter mean radius of the section. All the droplets at the entrance of the domain have the velocity and temperature of the gas.

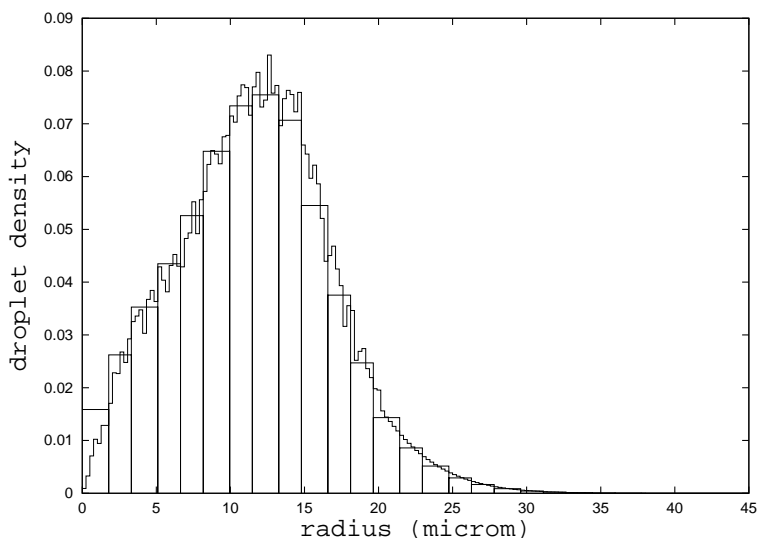


Figure 2.4: Experimental distribution function and discretized distribution function for the sectional approach at $z = 0$.

2.5.3 Numerical Approach

General description

Solution for the two approaches proceeds with a decoupled adaptive non-linear boundary value method. The procedure for the gas has been discussed in detail elsewhere [SCSG90] and we outline here only its essential features. With the continuous differential operators replaced by finite difference expressions, we use a damped Newton method to solve the discretized system. In order to have a good 'initial guess' for the method to converge, we use a pseudo-stationary method to approach a steady-state solution. As typical of these types of problems, the computational mesh is determined adaptively. It is refined in the zones where gradient or curvature of the gas variables are important. We stop the process when the refinement of the grid does not provide any improvement of the solution. Transport properties, such as binary diffusion coefficients, thermal conductivity and the shear viscosity, along with the chemical source terms, are automatically evaluated by using highly optimized libraries [DG88] and are taken from [HMD97] for heptane.

To reach a steady-state solution for the complete gas/liquid system, we alternatively solve the gas and liquid conservation equations, numerically decoupling the two phases. We terminate the process when the norm of the difference between successive gas and liquid-phase solutions is below the error tolerance for the combined solution. Let us now consider more precisely the liquid solver.

Spray stationary equations, associated solver

The stationary spray equations can be considered as a system of stiff ordinary differential equation of the space variable z . The integration is performed using LSODE, from the library ODEPACK [Hin83], from the fuel boundary condition until 99.9% of the initial liquid mass has evaporated. The solver LSODE uses the BDF method (Backward Differentiation Formulas) [HW91]. It is a multi-step method based on differentiation. Here, the step of the mesh is evaluated at each iteration, with an error control, the relative and absolute threshold [HW91] being set for each variable of the spray. Repeated computations with smaller

tolerance and no change on the solution insure the accuracy of the calculated solution. The resolution proceeds until 99.9% of the mass has vaporized; in this context we define a threshold either for the various groups or for the mass in the sections below which the equations for the liquid phase is stopped. Some compatibility conditions have to be observed between the vaporization threshold and the error tolerance on the mass variables for these variables to remain positive and meaningful. This is especially important for the chosen distribution function where the ratio of the amount of mass between two groups or two sections can reach five orders of magnitude. The grid for the liquid then contains the grid of the gaseous phase. This type of solver is used because equations of the liquid phase are stiff, especially when we use the sampling method; we then have to solve as many vaporization fronts as the number of samples. On the contrary, the sectional approach only goes through one vaporization front when the total mass goes below a given mass fraction of the entrance mass density.

Numerical approach for the droplet heating sub-model : effective conductivity

We aim at evaluating, in the next section, the influence of the droplet heating and vaporization models on the numerical solution. To this purpose, we want to precisely compute the influence of the thermal inertia of the droplets. One way to do so without solving for the hydrodynamics inside the droplets is to use the effective conductivity model developed in [AS89], and to solve the heat equation inside the droplets. The Eulerian system of stationary equations reads:

$$u_{l,z}^{(i)} \frac{\partial S^{(i)}}{\partial z} = R_S^{(i)}(z) \quad (2.47)$$

$$u_{l,z}^{(i)} \frac{\partial T_r^{(i)}}{\partial z} = \alpha_l^{\text{eff}} \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial T_r^{(i)}}{\partial r} \right) \quad (2.48)$$

$$\left. \frac{\partial T_r^{(i)}}{\partial r} \right|_{r=0} = 0, \quad \left. \frac{\partial T_r^{(i)}}{\partial r} \right|_{r=R^{(i)}(z)} = \frac{R^{(i)} E^{(i)}}{3 \alpha_l^{\text{eff}}}, \quad T_r(r, z = 0) = T_0 \quad (2.49)$$

where α_l^{eff} is the effective diffusivity evaluated at the surface temperature of the droplet and taken as a constant inside the droplet, $S^{(i)}$ the surface of the droplets in the i^{th} group, $R^{(i)}$, its radius, $R_S^{(i)}$ the vaporization rate expressed in the surface variable, $T_r^{(i)}$ the temperature profile inside the droplet and r the spherical coordinate inside the droplet.

We introduce the non-dimensional parameter $\eta = \frac{r}{R^{(i)}(z)}$. The equation in the variables η and $\bar{z} = z$ then reads:

$$\xi^{(i)} \frac{\partial \bar{T}_r^{(i)}}{\partial \bar{z}} = \left(\beta^{(i)} \eta + \frac{2}{\eta} \right) \frac{\partial \bar{T}_r^{(i)}}{\partial \eta} + \frac{\partial^2 \bar{T}_r^{(i)}}{\partial \eta^2} \quad (2.50)$$

$$\left. \frac{\partial \bar{T}_r^{(i)}}{\partial \eta} \right|_{\eta=0} = 0, \quad \left. \frac{\partial \bar{T}_r^{(i)}}{\partial \eta} \right|_{\eta=1} = \frac{R^{(i)2} E}{3 \alpha_l^{\text{eff}}}, \quad \bar{T}_r^{(i)}(\eta, z = 0) = T_0 \quad (2.51)$$

where

$$\xi^{(i)} = \frac{R^{(i)2} u_{l,z}}{\alpha_l^{\text{eff}}}$$

and

$$\beta^{(i)} = \frac{R_S^{(i)}}{8\pi \alpha_l^{\text{eff}}};$$

this is a system of partial differential equations with a free boundary problem. It is clear that only the sampling method is compatible with this kind of approach where the droplet heating history is important. However, the numerical approach has to be also compatible with the use of LSODE, so that the one described in [AS89], an iterative method on the surface temperature, is not suitable. We then discretize by finite difference the reduced heat equation and describe the temperature profile inside the droplet by a discrete vector. We obtain a system of non-linear ordinary differential equations in the space variable z , with one linear part associated to the Laplace operator in spherical coordinates and one non-linear part associated to the free boundary conditions. The new variables are then just added into LSODE and the temperature profiles calculated.

2.5.4 Cost, influence of droplet models and validity of the assumptions

Before coming to the comparisons of both approaches, let us first consider the computational cost, the influence of the vaporization and drag models on the solutions, as well as the validity of assumption **H1** in the context of the two counterflow flames.

Computational cost

Simulations are performed on a DECalpha EV5, 500MHz. We compare the sectional and sampling on a same test case with 30 sections, with two droplet models. Table 1 shows that the two methods have similar costs. However the cost of the effective conduction model is prohibitive, except for comparisons purposes which is the topic of the next subsection.

Droplet model	Method	Reduced CPU time
Effective conductivity	Sampling	24.71
Rapid-mixing	Sampling	1.03
Rapid-mixing	Sectional	1

Table 1 : Reduced computational cost of the methods for the liquid phase.

Droplet model

We have decided to use an infinite conductivity model combined with the film theory in order to describe the heating and vaporization of the droplets for several reasons; first it is compatible with a description of the spray at the “kinetic level” and takes into account the non stationary heating of the droplet, second it is compatible with the sectional approach, third it is compatible with the numerical method described above and finally the cost of the method is not prohibitive.

As emphasized in [AS89], the non stationary heating of the droplets has to be taken into account in this kind of configuration. Calculation with the onion skin model [Tur96], or with a zero conductivity model result in a real error in the localization of the vaporization front.

However, is it important to quantify the influence of the heating and vaporization model on the solution and to relate it to the influence of the numerical method, sampling or sectional. We then compare infinite and effective conductivity models on Flame A with the sampling method, for 30 groups of droplets. We take the gaseous fields for a converged solution and only solve the one-way coupled problem.

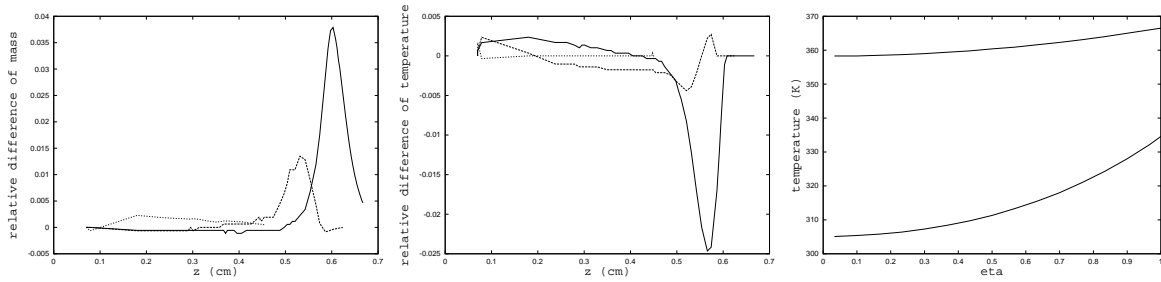


Figure 2.5: a: Difference of mass divided by the initial mass of the section (dotted line for the group of small droplets, dashed line for the group of medium ones, and solid line for the group of big ones). b: Relative difference of surface temperature (dotted line for the group of small droplets, dashed line for the group of medium ones, and solid line for the group of big ones). c: Temperature profiles inside the droplets for two groups at $z = 0.574$ cm, of radii $R = 18.93$ (initial radius : 23.79) and $R = 40.25$ (initial radius : 41.57).

Comparisons are provided for three groups of droplets of small, intermediate and large size, of respective radii : $5.95 \mu\text{m}$, $23.79 \mu\text{m}$ and $41.57 \mu\text{m}$. The dynamics of the droplets are almost identical, with a relative difference, for the large droplets, smaller than 0.2% for the axial velocity and smaller than 0.45% for the reduced radial velocity. For groups of smaller droplets, this difference is still smaller.

The difference between the two models is more visible on the evolution of mass (and then radius) and surface temperature of droplets, which are more directly connected with the droplet evaporation. On Fig. 2.5, for the smallest droplets, the difference is very small, not going beyond 0.3% for mass and surface temperature. The difference increases with the size of droplets. For droplets intermediate in size, which represent the majority of droplets in the spray, the difference between the two models reaches 1.3% of the initial mass of the group on Fig. 2.5a (the difference of mass density for one group does not go beyond 0.07% of the total initial mass). For the big droplets, the difference still increases. It reaches 0.9% for the radius and 2.5% for the surface temperature; in the hot region where the difference is the most important, we have plotted on Fig. 2.5c, the normalized profiles for the two groups of large and intermediate size, thus showing the heat propagation inside the droplets. For the mass, the difference represents 4% of the initial mass of the group. This difference however does not have any effect on the total mass evolution since it represents only 0.001% .

The two models are then close enough so that the use of the infinite conductivity is justified for comparisons purposes. Some similar checks can be performed for the drag model; it can be shown that the use of convective corrections based on the relative Reynolds number are necessary for a correct evaluation of the droplet dynamics; in fact, the choice of a more refined model for the drag force acting on the droplets, taking into account the acceleration forces as well as the history of the droplet is not necessary and only modifies the evaluation of the liquid properties by no more than a percent. Stokes regime with convective corrections is then sufficient for our purposes.

Before starting with numerical comparisons, we still have to check that the sectional method is applicable to this configuration.

Assumptions of the sectional approach

We want to prove, using the sampling method, that for both flames, there is always, throughout the computational domain, a one to one correspondence between the size of the droplets and the associated temperature

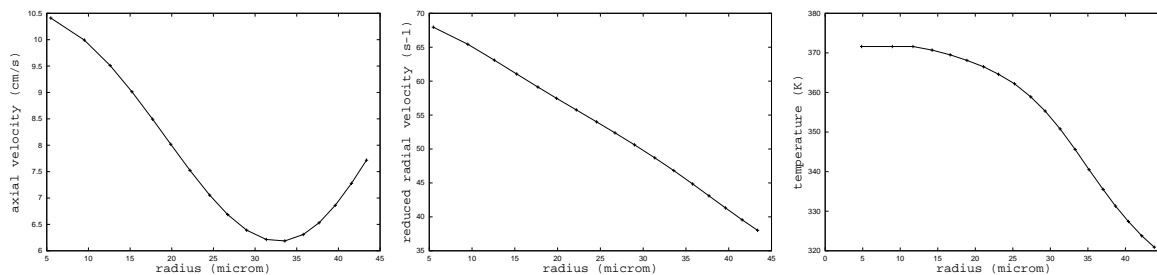


Figure 2.6: a,b : Reduced radial velocity and axial velocity as a function of the droplet radius at $z = 0.592$ cm. c : Temperature as a function of the droplet radius for Flame A at $z = 0.574$ cm.

and two components of the velocity; one size then uniquely defines a temperature and a two component velocity. The two phase space portraits for Flame A are provided on Fig. 2.6a and 2.6b representing the reduced radial velocity and the axial velocity at $z = 0.592$ cm. This point has been chosen because it is located in a region where the gas is speeding up and so, the velocity of smaller droplets gets higher than the one of the bigger droplets (as in the counterexample in section 4). The temperature profiles on Fig. 2.6c is taken at a point where the thermal inertia of the big droplets is the most important. In fact, radii of various groups never cross so that all the functions remain one-to-one. The same results are found for Flame B.

The equations of the spray counterflow diffusion flames we consider then reduce to a 1D system for which the assumptions of sectional approach are satisfied.

2.5.5 Results and Discussion

For the heptane flames A and B, the characteristics of which are given above in sub-section 5.2, we compare in this sub-section the two methods for the distribution function represented on Fig. 2.4. The impact of the method is then presented on the two-way coupled solutions and in particular on the gas variables. Since the difference is really small, we choose a converged field of the gas variables and solve for the one-way coupled solution with both methods. This allows us to identify the differences of the liquid phase solutions only due to the use of sampling or sectional.

We then show that both methods with a size discretization step small enough can be considered as almost equivalent from the point of view of global liquid variables. A closer look at the Sauter mean diameter indicates some small differences.

Variables of the gaseous phase

On Fig. 2.7, we can see the evolution of the main variables of the gaseous phase calculated with the sectional approach and the sampling method for the spray. The two profiles cannot be distinguished on all the figures for both flames. More precisely, there is a maximum difference in the temperature profile and velocity profile of the gas of 0.3% for the flame A and 0.45% for the flame B, showing that, even with the coupling of the phases, there is almost no change for the gaseous variables when we use both sectional and sampling for the modeling of the liquid phase.

We then consider the one-way coupled solution of the spray for a given converged field of the variables of the gas, and isolate the only influence of the numerical modeling on liquid variables solutions.

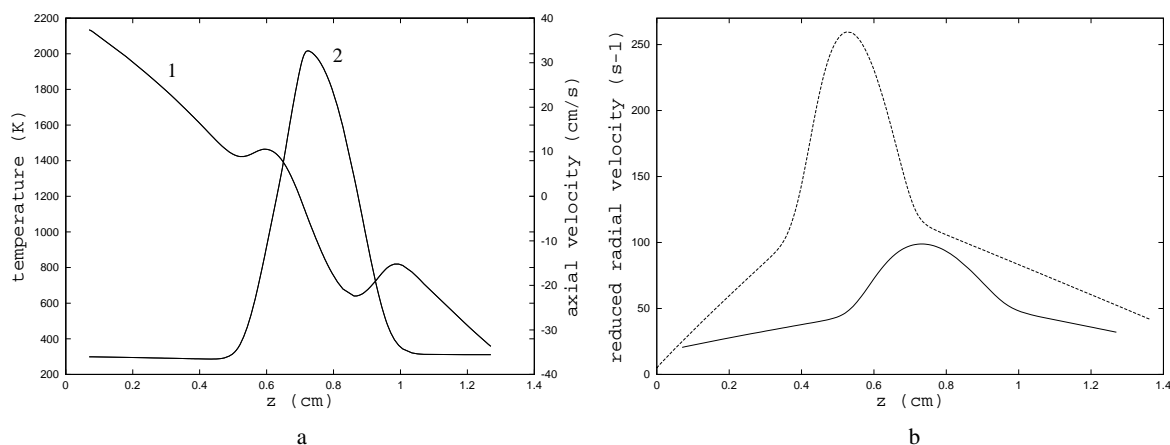


Figure 2.7: Evolution of the temperature (1) and the axial velocity (2) calculated with both approaches for the gaseous phase of flame A (sampling : solid line, sectional : dashed line). b: Evolution of the reduced radial velocity calculated with both approaches for the gaseous phase of the two flames (Flame A: solid line, Flame B: dashed line).

Mass density and Mass averaged Velocity

We can not compare each section with each group; they do not correspond because of the difference of the approaches : the sections are fixed in size and are not independent whereas the groups do not see each other and change their size throughout the vaporization process. The consequence is that we can only directly compare what we call the global spray variables : the mass density of liquid and the mass averaged velocities of the droplets.

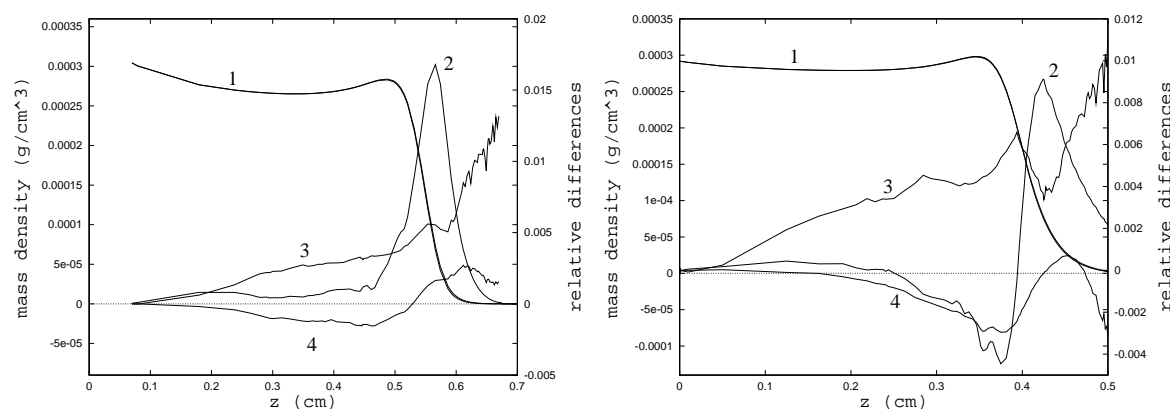


Figure 2.8: Evolution of total droplet mass concentration with both approaches (1, solid line for both the sampling and the sectional which are almost indistinguishable), evolution of the relative difference with respect to the initial mass density between the two approaches (2), evolution of relative reduced radial velocity difference (3) and difference of the axial velocity relatively to the initial one (4) between sectional and sampling for flame A on the left and for flame B on the right.

The first interesting variable, which describes the global droplet vaporization process, is the mass concentration of droplets per unit volume. On Fig. 2.8, we represent the evolution of this variable for both approaches and for the two flames. The corresponding two curves can barely be distinguished; consequently, the difference relatively to the initial mass density is also drawn on this figure. The maximum difference of

total droplet mass concentration between the sectional and the sampling method does not go beyond 1.8% for flame A and 1% for Flame B, the sectional slightly underestimating the vaporization of the spray in the hot gases zone. The difference decreases when the two phases are coupled.

An other interesting variable is the mass averaged velocity, which describes the global dynamics of the spray. On Fig. 2.8, are plotted the difference of the axial velocity and of the reduced radial velocity between the two methods and for the two flames. The dynamics of the droplets is almost identical, with a reduced radial velocity relative difference smaller than 1.4%, and an axial velocity difference relatively to the initial one smaller than 0.4% for both flames. The two components of the velocity are treated differently because the axial velocity is changing sign, so that only an absolute difference is meaningful, whereas it is not the case of the reduced radial velocity, which is always growing. Moreover, if we only look at the zone before 90% of the spray has already vaporized, the differences globally stay below 0.6%; consequently, the influence on the gaseous phase is negligible.

We then realize that from the point of view of the global vaporization process and droplets dynamics, the two methods can be considered as equivalent.

Sauter mean radius

A last global variable we can compare is the Sauter radius of the spray, which represents the global evolution of the droplet size. It is plotted on Fig. 2.9a and 2.9b for both flames. The first point to be noticed is that the changes of the Sauter mean radius are limited throughout the vaporization process. However, the two methods can bring a difference up to $1.5 \mu\text{m}$ for Flame A and up to $1 \mu\text{m}$ for Flame B.

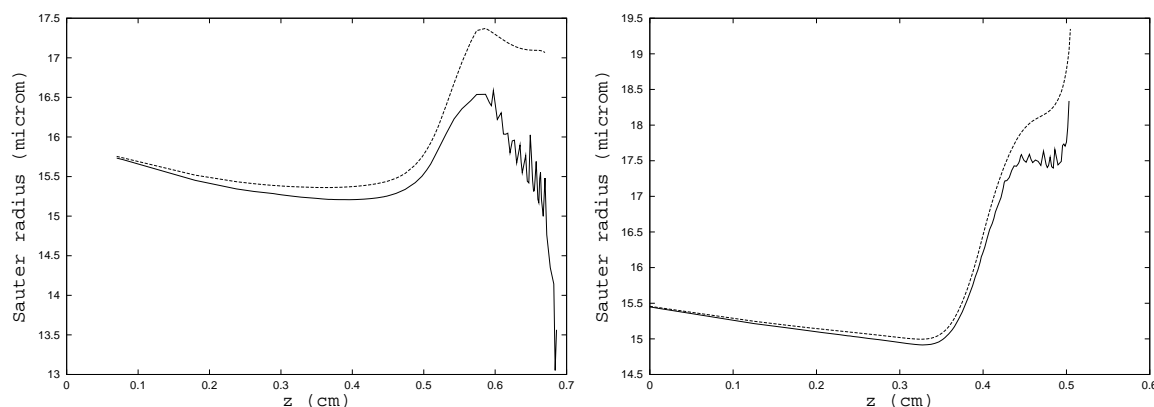


Figure 2.9: Evolution of Sauter radius with sampling and sectional approach for Flames A, left, and B, right (dotted line : sectional, solid line : sampling).

Some problems also arise with the sampling method. On Fig. 2.9a and 2.9b the Sauter mean radius is calculated from a sum of Dirac delta functions for the sampling approach; thus its Sauter mean radius is not the one of the distribution function approximated by this sum of Dirac delta functions. The cause of this oscillatory behavior is the multiple vaporization fronts, an artificial phenomenon intrinsically related to the sampling technique.

Even if the two methods can be considered as equivalent from the point of view of the global variables, the focus on the behavior of the Sauter mean diameter reveals some intrinsic differences of the methods. We will identify the origin of these differences using a simplified configuration in section 6.

Mass distribution function

Besides the global mass density of the spray, the mass averaged velocities and the Sauter mean radius which are quantities in the mean, one way to look at the mass distribution function and its dispersion is to plot it directly from the liquid solution.

However, to represent these functions means to reconstruct them from their discretized approximations. Let us first consider the sectional approach. The mass distribution function we want to consider is normalized and reads, from the moment constraint (14), $m(\phi) = \rho_l V(\phi) \kappa^{(j)}(\phi)$ in the j^{th} section with $\int_{\phi^{(j)}}^{\phi^{(j+1)}} m(\phi) d\phi = 1$. It then strongly depends on the assumption on the function $\kappa^{(j)}(\phi)$; as a function of the radius R , it is going to behave like R^3 if $\kappa^{(j)}(R)$ is taken constant, like R^4 if $\kappa^{(j)}(S)$ is taken constant and finally will behave like R^5 if $\kappa^{(j)}(V)$ is taken constant. It then becomes clear that the choice of the “projection” step, $\kappa^{(j)}(\phi)$ being taken as a constant function of the variable R , S or V is arbitrary.

In the sampling case, the situation is not better, one has to reconstruct from a sum of Dirac Delta functions the continuous solutions by a “reasonable” convolution with a filter. What is then arbitrary is the choice of the filter depending of what moment is chosen to be preserved. Besides, at the location where a Dirac delta function crosses the ordinate axis, the corresponding group disappears as well as the amount of mass it was associated to, thus generating the observed oscillations for the Sauter mean radius. We have chosen a reconstruction which preserves the amount of surface and mass, (and then the Sauter mean radius) with an adapted filter size which bring the representation shown on Fig. 2.10a for Flame A and on Fig. 2.11a for Flame B. It is then obvious that this representation is just a qualitative description of the mass repartition versus size at various points.

One way to quantify the difference between the two descriptions is to consider the normalized mass distributions functions $\mathfrak{F}(\phi) = \frac{\rho_l V(\phi) f^\phi(\phi)}{\int_0^{+\infty} \rho_l V(\phi) f^\phi(\phi) d\phi}$ and to compute their integrals $\int_0^\phi \mathfrak{F}(\phi') d\phi'$. For the sampling method, this integral is a piecewise constant function and for the sectional approach, it is a continuous function. A quantitative comparison is then provided through the L^1 norm of the difference divided by the L^1 norm of one of the functions. The results are plotted for both Flames on 2.10b and 2.11b. It then becomes clear that the error stays below 4% until 90% of the spray has vaporized, thus proving the good correspondence of the two methods.

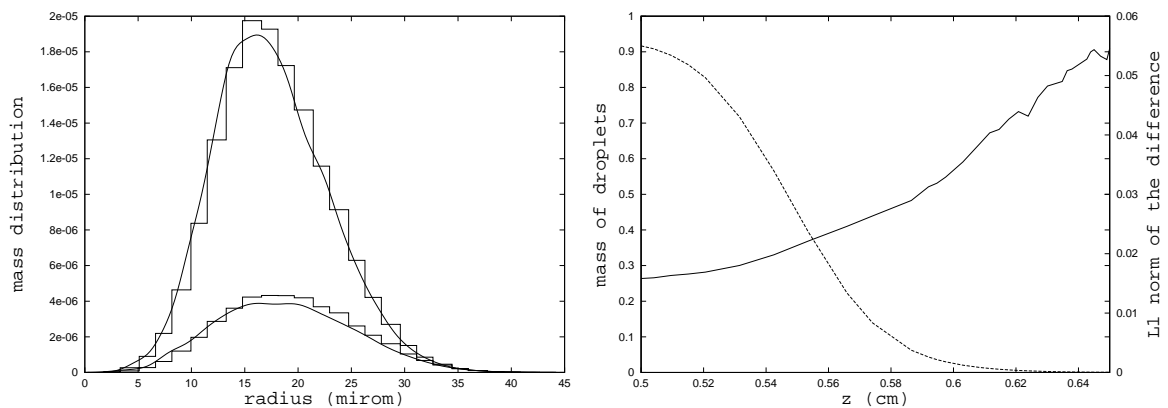


Figure 2.10: a : Repartition of droplet mass at location $z = 0.520$ cm and $z = 0.574$ cm corresponding to simulations of Flame A with sampling (C^1 function) and sectional (piecewise constant function) approaches. b : total spray mass density (dashed line) versus L^1 norm of the difference between the approaches (solid line).

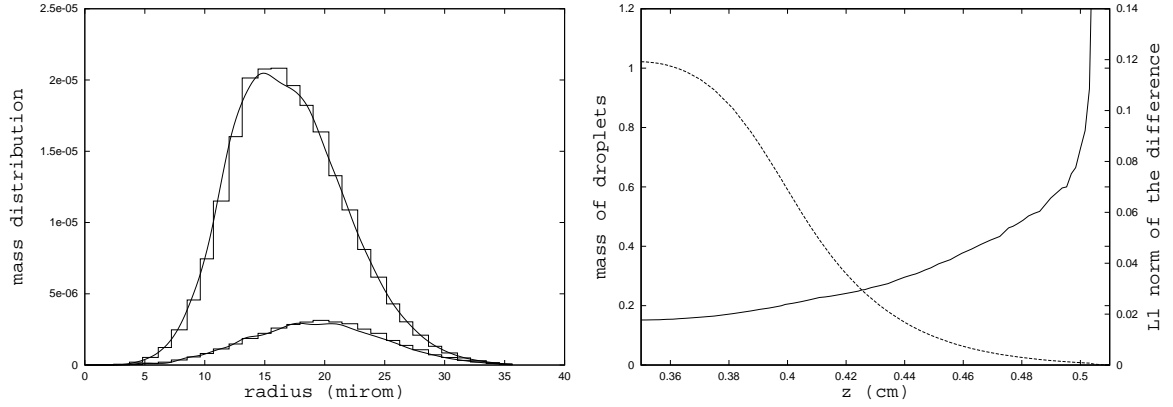


Figure 2.11: a : Repartition of droplet mass at location $z = 0.381$ cm and $z = 0.440$ cm corresponding to simulations of Flame B with sampling (C^1 function) and sectional (piecewise constant function) approaches. b : total spray mass density (dashed line) versus L^1 norm of the difference between the approaches (solid line).

Even if the global variables such as the total liquid mass density and total averaged liquid velocity are close enough, we would like to precisely identify what is the origin of the difference in Sauter mean Radius as well as L^1 norm of the difference in mass distribution functions at the end of the vaporization process. We then switch to a simpler problem where the various processes can be decoupled in order to understand the fundamentals of the numerical approximation by the two methods.

2.6 A 1D stationary case with no dynamical effect

We consider in this section a purely mono-dimensional case and a poly-disperse spray with the same distribution function as in the previous section (Fig. 2.4). The gas is injected at a temperature of 450 K, and with a velocity of $15.05 \text{ cm}\cdot\text{s}^{-1}$. We want to describe the vaporization process decoupled from the dynamics of the droplets, so that we inject the cloud at the same velocity.

For this low gas temperature, the temperatures of the droplets, whatever their initial value, converge to a stationary limit value related to the gas composition and temperature. For the chosen gas temperature, the corresponding droplet surface temperature is 337.9 K.

We will consider two cases, the first one when the temperature of the droplets is chosen at 337.9 K, in such a way that the cloud only undergoes vaporization, without dynamical and heating effect. In this case, an analytical solution is available thus providing a good way to test the approaches. In a second case, the injection temperature is taken at 299 K, thus coupling the vaporization process to the heating of the droplets.

In the first case, analytical solutions are available. More specifically, the spray equation is then reduced to:

$$\partial_x \cdot (u_l f^S) + \partial_S (R_S f^S) = 0, \quad \partial_S (R_S) = 0. \quad (2.52)$$

which is an advection equation with constant speed R_S/u_l .

The mass evolution can then be computed analytically from the initial shape of the distribution function and compared to the use of sampling and sectional with two “projection” steps on Fig. 2.12a where the total relative mass of the spray and the difference relatively to the initial value between the three approaches and

the analytical result are represented. Besides we calculate the corresponding Sauter mean radius for all three approaches and compare with the theoretical approach on Fig. 2.12b.

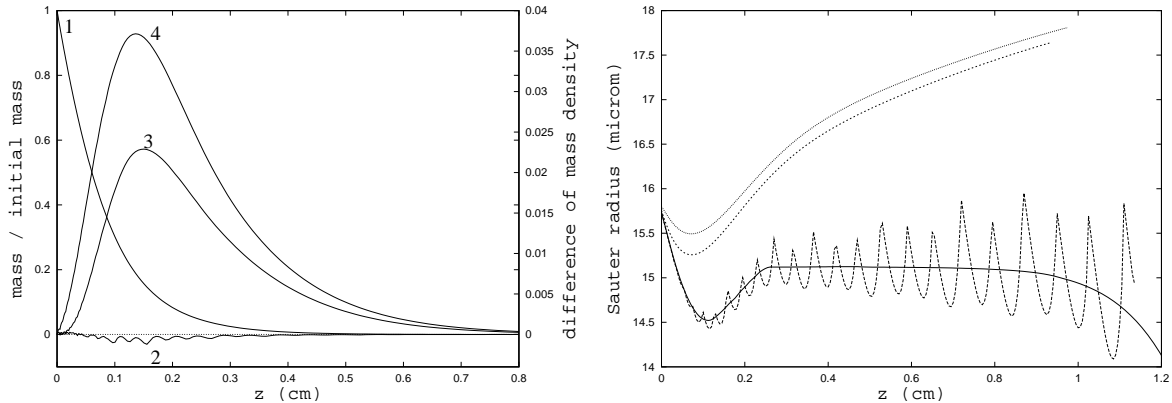


Figure 2.12: a : Evolution of total reduced droplet mass concentration for the analytical solution (1); Difference of total droplet mass concentration for the sampling method (2) or the sectional approach (3: $\kappa^{(j)}(R)$ constant; 4: $\kappa^{(j)}(V)$ constant) to the analytical solution divided by the initial mass concentration. b : Sauter mean radius : analytical (solid line), sampling (dashed), sectional with $\kappa^{(j)}(R)$ constant (dotted), sectional with $\kappa^{(j)}(V)$ constant (small dots).

The conclusions to be drawn from these results are clear. The sampling method, even if it generates some oscillations due to the intrinsic representation of a continuous function by Dirac delta functions, is very precise and close to the analytical approach. If refined enough, this approach is then more precise than the sectional approach, from both the mass point of view and Sauter mean radius point of view. We have compared also the sectional approach where we take $\kappa^{(j)}(R)$ constant and where we take $\kappa^{(j)}(V)$ constant as in Greenberg et al. [GST93]. It also appears clearly here that the choice of this “projection” is really arbitrary and strongly influence the results, even if the “ $\kappa^{(j)}(R)$ constant” projection is better and only reaches 2% difference.

One very important point is that the sectional approach over-evaluates the Sauter mean radius, especially concerning the tail of the distribution. The way the “big” droplets are treated is then not very satisfactory. More precisely, the Sauter mean radius is supposed to converge to a constant value due to the fact that the given distribution function is almost exponentially decreasing beyond a given size [LSN⁺02] as a function of surface. The sampling method is able to follow this behavior with oscillations, whereas the sectional predicts a constant increase of the Sauter mean radius. Some special treatment has to be provided for the tail of the distribution function in the context of the sectional approach; this is the purpose of a subsequent paper [LSN⁺02].

In the second case, the thermal inertia of the big droplets is bigger compared to the small ones; the small droplets thus reach the limit temperature and vaporize more quickly. This results in an increase the Sauter mean radius of the distribution (Fig. 2.13c) in comparison with the case where R_S is constantly evaluated at the limit temperature.

On Fig. 2.13a, we have plotted, on the one side, the results given by sectional and sampling methods, and on the other side, the prediction of the previous analytical prediction of the mass density for R_S constantly evaluated at the limit temperature. It is clear that the heating history of the droplets has a strong impact on the mass density of droplets, on Fig. 2.13b, where we have plotted the relative difference of the mass evolution of the spray for, on one side the sectional and sampling methods, and on the other side the sampling and the

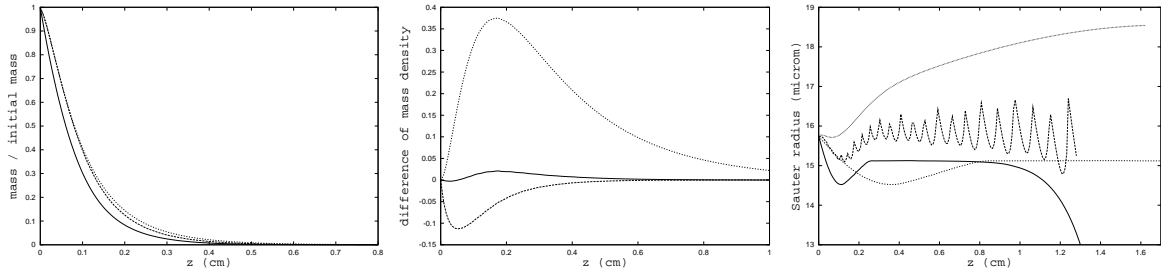


Figure 2.13: a :Evolution of total droplet mass concentration with sampling (dashed) and sectional (dotted) approach, analytical with $R_S = R_S(337.9)$ (solid). b : Difference between analytical with $R_S = R_S(299)$ and sampling (dotted), analytical with $R_S = R_S(337.9)$ and sampling (dashed), sectional and sampling (solid). c : Evolution of the Sauter radius with sectional approach with $\kappa^{(j)}(R)$ constant (small dots), with sampling (dashed) and analytical with $R_S = R_S(337.9)$ (solid) and $R_S = R_S(299)$ (dotted).

analytical approach for R_S evaluated at 299K and 337.9K, the limit temperature. Besides, the difference between sectional and sampling does not go beyond 2%, a case similar to the previous one, where the heating history was not taken into account.

2.7 Conclusion and perspectives

The development of Eulerian multi-fluid models for poly-disperse evaporating sprays provides a promising tool. They are a good compromise precision/cost, competitive with stochastic Lagrangian methods for three reasons. They provide a Eulerian description of the dispersed phase compatible with the gas phase description, thus allowing at relatively low computational cost, implicitation, vectorization or parallelization. It is all the more true since the number of sections necessary in order to precisely reproduce the vaporization process can be reduced to only a few sections [LSN⁺02] [LMV01]. Furthermore, it generates only one vaporization front for a given cloud, a features the Lagrangian models do not have. Finally since such models can be rigorously related to a kinetic formulation, they can be extended in order to take into account more complex phenomena like coalescence or fragmentation [MV01] [LMV01], an uncommon feature of Eulerian models.

In this context, the present paper provides a comprehensive analysis of the sectional approach, thus extending the first step into this direction by Greenberg et al. [GST93]. We have rigorously derived the system of conservation equations from the “kinetic level” of the Williams’ type spray equation. The underlying set of assumptions have been identified and shown to be important, by exhibiting some cases where the sectional approach is not able to reproduce the coupling of dynamics and vaporization of a poly-disperse cloud. However, even if the limitations of the approach have been explicitly provided, the evaluation of its impact on multi-dimensional and non-stationary configurations seems to be limited and is the topic of our current research.

Finally, the Eulerian multi-fluid method has been compared to the classical Lagrangian approach on counterflow flames and the details of the differences identified on simple configurations. It appears that both approaches can be considered as comparable for the same level of refinement, even if the Lagrangian one, since it does not experience numerical diffusion, better approximates the vaporization process. Actually the sectional approach can be shown to be of order only one in the size discretization step and is then numerically

very diffusive [LM02]. The topic of our current research is then to create an other Eulerian multi-fluid model which inherits the advantages of the sectional approach but can reach high order and precision [LM02].

Bibliography

- [AOB89] A.A. Amsden, P. J. O'Rourke, and T. D. Butler. Kiva II, a computer program for chemically reactive flows with sprays. Technical Report LA-11560-MS, Report Los Alamos National Laboratory, Los Alamos, New Mexico, 1989.
- [AS89] B. Abramzon and W.A. Sirignano. Droplet vaporization model for spray combustion calculations. *Int. J. Heat Mass Transfer*, 32:1605–1618, 1989.
- [BDGR00] R. Ben-Dakhli, V. Giovangigli, and D. Rosner. Soret effect in counterflow spray diffusion flames. In *Proceedings of the 28th Symp. (International) on Combustion, The Comb. Institute*, 2000.
- [CGW78] R. Clift, J. R. Grace, and M. E. Weber. *Bubbles, Drop and Particles*. Academic Press, New York, 1978.
- [CSS77] C. T. Crowe, M. P. Sharma, and D. E. Stock. The particle-source-in cell (psi-cell) model for gas-droplet flows. *J. Fluids Eng.*, pages 325–332, 1977.
- [DG88] N. Darabiha and V. Giovangigli. Vector computers and complex chemistry combustion. *Mathematical Modeling in Combustion and Related Topics*, pages 491–503, 1988.
- [Dom98] K. Domelevo. The kinetic-sectional approach for evaporating sprays. prépublication 98-20, MIP UMR 5640, Toulouse, 1998.
- [DS97] K. Domelevo and L. Sainsaulieu. A numerical method for the computation of the dispersion of a cloud of particles by a turbulent gas flow field. *J. Comput. Phys.*, 133(2):256–278, 1997.
- [Duk80] John K. Dukowicz. A particle-fluid numerical model for liquid sprays. *J. Comput. Phys.*, 35(2):229–253, 1980.
- [EG94] Alexandre Ern and Vincent Giovangigli. *Multicomponent transport algorithms*. Springer-Verlag, Berlin, 1994.
- [EG98] Alexandre Ern and Vincent Giovangigli. Thermal diffusion effects in hydrogen-air and methane-air flames. *Combust. Theory and Modelling*, 2:349–372, 1998.
- [GAT86] J.B. Greenberg, D. Albagli, and Y. Tambour. An opposed jet quasi-monodisperse spray diffusion flame. *Combust. Sci. Technol.*, 50:255–270, 1986.

- [GB78] H. C. Gupta and F. V. Bracco. Numerical computations of two-dimensional unsteady sprays for applications to engines. *AIAA Journal*, 16(10):1053–1061, 1978.
- [GDS⁺96] L. P. Gao, Y. D’Angelo, I. Silverman, A. Gomez, and M. D. Smooke. Quantitative comparison of detailed numerical computations and experiments in counterflow spray diffusion flames. In *Proceedings of the 26th Symp. (International) on Combustion, The Comb. Institute*, pages 1739–1746, 1996.
- [Gio99] Vincent Giovangigli. *Multicomponent flow modeling*. Birkhäuser Boston Inc., Boston, MA, 1999.
- [GM98] Vincent Giovangigli and Marc Massot. Asymptotic stability of equilibrium states for multi-component reactive flows. *Math. Models Methods Appl. Sci.*, 8(2):251–297, 1998.
- [GST93] J.B. Greenberg, I. Silverman, and Y. Tambour. On the origin of spray sectional conservation equations. *Combustion and Flame*, 93:90–96, 1993.
- [Hin83] Alan C. Hindmarsh. ODEPACK, a systematized collection of ODE solvers. In *Scientific computing (Montreal, Que., 1982)*, pages 55–64. IMACS, New Brunswick, NJ, 1983.
- [HMD97] T. J. Held, A. J. Marchese, and F. L. Dryer. A semi-empirical reaction mechanism for n-heptane oxidation and pyrolysis. *Comb. Sci. and Tech.*, 123:107–146, 1997.
- [HW78] L. C. Hasselman and C. K. Westbrook. A theoretical model for fuel injection in stratified charge engines. *SAE paper 780138*, 1978.
- [HW91] E. Hairer and G. Wanner. *Solving ordinary differential equations. II*. Springer-Verlag, Berlin, 1991. Stiff and differential-algebraic problems.
- [Hyl99] J. Hylkema. *Modélisation cinétique et simulation numérique d’un brouillard dense de gouttelettes. Application aux propulseurs à poudre*. PhD thesis, ENSAE, 1999.
- [LLW91] G. T. Linteris, P. A. Libby, and F. A. Williams. Droplet dynamics in a nonuniform flow field. *Combustion Science and Technology*, 80:468–478, 1991.
- [LM02] F. Laurent and M. Massot. Numerical analysis of Eulerian multi-fluid models in the context of kinetic formulations for dilute evaporating sprays. in preparation, 2002.
- [LMV01] F. Laurent, M. Massot, and P. Villedieu. Eulerian multi-fluid modeling for the numerical simulation of polydisperse dense liquid spray. prépublication, soumis, MAPLY, UMR 5585 Lyon, 2001. (<http://maply.univ-lyon1.fr/publis/publiv/2001/335/publi.ps.gz>).
- [LSN⁺02] F. Laurent, V. Santoro, M. Noskov, A. Gomez, M.D. Smooke, and M. Massot. Accurate treatment of size distribution effects in polydispersed spray diffusion flames: multi-fluid modeling, computations and experiments. prépublication, MAPLY, UMR 5585 Lyon, 2002. (<http://maply.univ-lyon1.fr/publis/publiv/2002/publis.html>).
- [MKGS98] M. Massot, M. Kumar, A. Gomez, and M. D. Smooke. Counterflow spray diffusion flames of heptane: computations and experiments. In *Proceedings of the 27th Symp. (International) on Combustion, The Comb. Institute*, pages 1975–1983, 1998.

- [MV01] Marc Massot and Philippe Villedieu. Modélisation multi-fluide eulérienne pour la simulation de brouillards denses polydispersés. *C. R. Acad. Sci. Paris Sér. I Math.*, 332(9):869–874, 2001.
- [O’R81] P. J. O’Rourke. *Collective drop effects on vaporizing liquid sprays*. PhD thesis, Los Alamos National Laboratory 87545, University of Princeton, 1981.
- [Rav85] P.-A. Raviart. An analysis of particle methods. In *Numerical methods in fluid dynamics (Como, 1983)*, pages 243–324. Springer, Berlin, 1985.
- [RS95] Pierre-Arnaud Raviart and Lionel Sainsaulieu. A nonconservative hyperbolic system modeling spray dynamics. I. Solution of the Riemann problem. *Math. Models Methods Appl. Sci.*, 5(3):297–333, 1995.
- [SCSG90] M. D. Smooke, J. Crump, K. Seshadri, and V. Giovangigli. Comparison between experimental measurements and numerical calculations of the structure of counterflow, diluted, methane-air, premixed flames. In *Proceedings of the 23rd Symp. (International) on Combustion, The Comb. Institute*, pages 503–511, 1990.
- [THA76] J. R. Travis, F. H. Harlow, and A. A. Amsden. Numerical calculations of two-phase flows. *Nucl. Sci. Eng.*, 61:1–10, 1976.
- [Tur96] S. R. Turns. An introduction to combustion : Concepts and applications. *McGraw-Hill Series in Mechanical Engineering*, 1996.
- [VH97] Philippe Villedieu and Jouke Hylkema. Une méthode particulière aléatoire reposant sur une équation cinétique pour la simulation numérique des sprays denses de gouttelettes liquides. *C. R. Acad. Sci. Paris Sér. I Math.*, 325(3):323–328, 1997.
- [Wil58] F.A. Williams. Spray combustion and atomization. *Phys. Fluids*, 1:541–545, 1958.
- [Wil85] F.A. Williams. *Combustion Theory (Combustion Science and Engineering Series)*. ed F A Williams (Reading, MA: Addison-Wesley), 1985.
- [YC73] M. C. Yuen and L. W. Chen. On drag of evaporating liquid droplets. *Combustion Science and Technology*, 14:147–154, 1973.

Chapter 3

Accurate treatment of size distribution effects in polydisperse spray diffusion flames: multi-fluid modeling, computations and experiments

Rapport interne MAPLY no 347:

F. LAURENT, V. SANTORO, M. NOSKOV, A. GOMEZ, M.D. SMOOKE, M. MASSOT, *Accurate treatment of size distribution effects in polydispersed spray diffusion flames: multi-fluid modeling, computations and experiments*, prépublication MAPLY, UMR 5585 Lyon (2002)
(<http://maply.univ-lyon1.fr/publis/publiv/2002/publis.html>)

Abstract. *An Eulerian multi-fluid model is validated by comparison with experimental measurements in the test case of laminar spray counterflow diffusion flames. Special attention is devoted, both from the modeling and experimental point of view, to the treatment of the droplet distribution tail, characterized by the rare occurrence of relatively large droplets carrying a non negligible amount of mass. The Eulerian multi-fluid approach is shown to capture the dynamics, vaporization and heating of the droplets with a limited number of sections and, thus, at a modest cost. This simplification will be essential for the use of multi-fluid methods in multi-dimensional problems.*

3.1 Introduction

In most industrial combustion applications, such as IC engines, gas turbines and furnaces, the fuel is stored in condensed form and injected as a spray into a gaseous stream. Rather than tackling the impossible task of dealing with such practical systems, our study focuses on laminar spray flames which provides rich physical scenarios amenable to detailed modeling. They are intermediate in complexity between practical spray combustion systems which are difficult to interpret, and the classic experiments and modeling on single droplet burning, that have been the subject of a vast literature over the past fifty years. They provide an ideal test-case with some of the ingredients of practical flames, but without turbulence complications. In particular, disperse phase dynamics, heating and vaporization for sprays with a distribution of droplet sizes can be systematically investigated. Within the category of laminar spray flames, counterflow diffusion flames are perhaps the simplest. They have been the focus of various studies in the past [MKGS98], [GDS⁺96], [LLW93], [CS90] in view of the fact that, under a similarity assumption, they can be treated as a one-dimensional flow field. We will restrict ourselves to dilute sprays for which the volume fraction occupied by the liquid is small compared to that of the gas mixture. Although the region of high chemical activity is usually located far enough from the injection and atomization area, two-phase effects can significantly influence flame structure, even for relatively dilute sprays [MKGS98].

Most atomizers produce droplets of various sizes, which experience different dynamics, vaporization and heating histories [MKGS98]. To predict the flame structure accurately, it is then necessary to model the polydisperse character of the spray in a multicomponent reactive gas flow. For unconfined flames, governing equations [GM98] under the constant pressure low Mach Number approximation apply [Gio99], [SCSG90].

The coupling of the phases occurs through additional source terms describing mass, momentum and heat exchanges between the two phases. To evaluate these exchange terms, two types of models for the dispersed liquid phase have been considered in the literature. The first one is Lagrangian as described originally in [CSS77], [Duk80], [O'R81], [AOB89]. It is called "particle-fluid" in [Duk80] and "stochastic parcel method" in [O'R81]. The continuous distribution of droplets is approximated using a finite number of computational parcels. Each parcel represents a number of droplets of identical size, velocity and temperature. Subsequently, the properties of the parcels injected at the upstream boundary and the changes the parcel properties undergo in time are chosen stochastically from the distribution that governs the droplet behavior. This method is currently used in many industrial or semi-industrial codes (see for example [AOB89], [Hyl99]). The second class of models is of Eulerian type and, in turn, can be subdivided into two subclasses. In the first, referred by O'Rourke [O'R81] as the full spray equations method, the portion of the droplet phase space is subdivided into computational cells and classical Eulerian schemes (finite difference, element or volume) are used to resolve the time evolution of the spray distribution function [GB78], [HW78]. The second subclass is referred to as the moment equation method, where equations for only some moments of the spray distribution function are derived and solved through classical Eulerian schemes [THA76]. Full spray equations are expensive in terms of both computational time and memory storage even in the relatively simple 1D case in which the phase space is of dimension 4. On the other hand, the moment equation method have shown to be useful in some particle population problems [WMR01], where the size of the particles are small enough so that the velocity distribution does not depend on the size of the particle. However, this approach does not provide sufficient precision for most sprays applications. Some other Eulerian models which were conceived to reduce the cost of fully Lagrangian models often relied on the approximation that the spray is monodisperse [RS95], a drastic assumption for usually polydisperse spray combustion

[MKGS98]. Even in the case of some extensions such as [DS97] in which a Eulerian semi-fluid method based on velocity moment closure of the probability density function at sampled size was used. However, this does not allow to precisely describe neither the coupling between dynamics, vaporization and heating nor the particle interactions such as coalescence.

A natural improvement would be to use models intermediate between the full spray equations model and the moment equation models, where some dimensions of the phase space are treated using moment equations and some others using the full spray equation method in such a way that enough precision is maintained at relatively low cost. In a recent paper [LM01], we have provided a theoretical basis for the derivation of this multi-fluid model from Williams spray equation [Wil58] at what can be called a kinetic-theory level of description. It can be considered as an extension of the ideas developed by Greenberg et al. [GAT86], [GST93] with the sectional approach. This theoretical basis is essential in order to extend this model to more complex situations, such as, for example, when coalescence is present [MV01], [LMV01]. We call such a method a *multi-fluid method* in that the dispersed phase is described as a set of continuous media or “fluids”, each fluid corresponding to a statistical average in a section covering a range of droplet sizes. The method was named the sectional approach in [GAT86], [GST93]. The evolution of these coupled sections or “fluids” is governed by conservation equations for mass, momentum and enthalpy.

We clarified the set of assumptions necessary to derive the multi-fluid sectional model from the spray equation at the kinetic-theory level of description and have provided the derivation of the whole set of conservation equations describing the dispersed liquid phase. The multi-fluid model was also compared to the classical Lagrangian approach on spray counterflow diffusion flames and other test-cases in [LM01]. The conclusion to be drawn from this study is that the sampling method, if sufficiently refined, is more precise than the multi-fluid approach which is only a first order method as it was proved in [Lau02] and experiences strong numerical diffusion. However, such an approach will become much too expensive for nonstationary problems, where we are heading towards a Eulerian model with a low computational cost which is still able to capture the size distribution effects of the spray.

A detailed study on heptane spray diffusion flames [MKGS98] showed that, even if the structure of the spray flame was globally well predicted by the simulations, the Eulerian multi-fluid approach was underestimating the vaporization of the large droplets as compared to the experimental results. Characteristically, we face the difficulty of modeling the tail of the spray distribution characterized by poor statistics. Yet, even these rare events can be significant, since large droplets carry a non-negligible amount of mass and eventually survive the longest in the flame, in some cases even penetrating the flame itself, if residence times do not allow for complete evaporation.

The purpose of the present paper is to propose, in the context of an Eulerian multi-fluid modeling of polydisperse sprays developed by the authors [MKGS98], [LM01], an improved and optimized numerical description of the distribution tail that is validated with experimental measurements. It will be shown that the multi-fluid method is especially suited in this kind of situation and describes precisely the polydisperse spray with a limited number of unknowns. To that end, an experimental effort was implemented tailored to the need of high quality statistics of the validation scheme, which provided a comprehensive database of the droplet mass distribution function.

Correct predictions of the behavior of the distribution tail offers numerous advantages. Mathematically, the boundary condition when the size of the droplet tends to infinity has to be provided. For example, it is critical in the rigorous derivation of a coalescence model in the framework of the sectional approach, as derived by Laurent, Massot and Villedieu [MV01], [LMV01]. Numerically, discretization of the distribution

function for comparison purposes using a sampling or sectional method requires precise evaluation of the amount of mass in each group or section. Knowledge of the precise behavior of the continuous distribution function allows one to make the best choice for the location of boundaries of each section or group, to reduce the number of unknowns in the multi-fluid approach within a specified level of precision. Also, it allows one for the reconstruction of the real distribution function for comparison purposes even under conditions of poor experimental statistics. This reduction of the number of degrees of freedom will be particularly useful for the application of the multi-fluid methods to realistic 2D or 3D configurations.

The paper is organized as follows: first, we describe the experimental set-up. Subsequently, various multi-fluid models are presented, as well as droplet models, numerical methods and boundary conditions. Next, we investigate the optimality of the discretization in the size phase-space. We use experimental data on the tail of the distribution function and show that the behavior of the distribution function for large droplets does not change significantly throughout the flame so that we can reconstruct the tail, even in those locations where statistics are poor, that is, close to the vaporization plane. A discussion on the reduction of the number of degrees of freedom for both multi-fluid models and the associated difficulties follows. Calculations with a fine discretization of the size phase space (30 groups or sections) are then compared to simulations with the improved model (only 6 or 12 groups or sections). Significantly, the precision of the results will be shown not to suffer from the reduction of the number of unknowns. The efficiency of the method in treating the distribution tail is tested in a 1D test case, for which analytical solutions are available. Finally, the improved models are compared to experimental measurements to validate the proposed approach.

3.2 Experimental Technique

An axisymmetric counterflow diffusion flame is stabilized in a vertical configuration between two opposed nozzles. The oxidizer, diluted with nitrogen or helium, is fed from the top nozzle and the fuel from the bottom. The liquid fuel, heptane or methanol, is dispersed using a commercial ultrasonic nebulizer as in [1]. A polydisperse distribution of droplets is generated, with average diameter $D_{10} = 40 \mu\text{m}$ for the heptane flame. The choice of the atomization system minimizes the velocity slip between the gas phase and the liquid phase, allowing for the use of a similarity solution, as it will be further explained below. Both exits of the burner terminate in a contraction, contoured following a well-established wind tunnel design practice, to generate a uniform axial velocity profile in the radial direction. The exit diameter of each nozzle is 12.5 mm and the separation distance between them is kept at 13 mm. Flanges are fitted to the nozzle outlets to prevent buoyancy effects from altering the "flatness" of the flame near the burner centerline. Cooled water is circulated through the upper flange to keep it at a desired temperature.

Radial and axial velocity components are measured together with the size distribution of the droplets using a commercial phase Doppler anemometer (Dantec Electronics). The velocity of the gas phase is measured using seeded particles of Al_2O_3 , with a nominal diameter of $1.5 \mu\text{m}$ on the oxidizer side and heptane droplets with a diameter smaller than $8 \mu\text{m}$ on the fuel side. No corrections for thermophoretic effects are made. The temperature of the gas phase is measured using a coated Pt/Pt-10%Rh thermocouple, with a bead diameter of $200 \mu\text{m}$. Standard corrections for radiative losses are applied.

Experiments are performed on three flames: Flame A, a heptane flame with moderate strain rate, Flame B, also using heptane but at a higher strain rate, and Flame C, a methanol flame. Key experimental parameters, subsequently used as input for the computation, are listed in Table 1. They include: total mass fluxes on each side of the burner in columns 2 and 3, fuel and oxidizer mass fractions in the two streams in columns

4, 5 and 6, the extrapolated velocity gradients at the boundaries in columns 7 and 8 [MKGS98], the oxidizer temperature in column 9 and the burner separation in the last column.

One characteristic parameter of the spray which is not presented in Table 1 is the size distribution function at the burner mouth and will be investigated in detail in Section 5. On the fuel side the discretized mass distribution at $z = 0$ is chosen to match the experimental measurements. Velocities and temperature are the same as for the gaseous phase. The temperature on the fuel side is 299K for all flames.

	ρv_{fuel} $g.cm^{-2}$	ρv_{ox} $g.cm^{-2}$	$Y_{C_7H_{16}}$	Y_{CH_3OH}	Y_{O_2}	$\partial_z v_{fuel}$ s^{-1}	$\partial_z v_{ox}$ s^{-1}	T_{ox} K	Δz mm
Flame A	0.055	0.039	0.23	0.0	0.412	41	64	299	12
Flame B	0.077	0.079	0.21	0.0	0.66	10	83	299	13.65
Flame C	0.049	0.027	0.0	0.47	0.95	60	0	800	13.48

Table 1: Characteristics of the flames.

3.3 General modeling of the coupled two-phase system

The purpose of the present section is to provide a mathematical model to describe both the multicomponent reactive gas mixture and the polydisperse liquid spray carried by the gaseous flow as well as their two-way coupling. The equations governing multicomponent reactive flows have received considerable attention. For laminar flames with slow velocities, the conservation equations governing the multicomponent reactive gaseous mixtures [GM98] are taken under the Low Mach Number approximation [Gio99] with constant boundary conditions on pressure thus yielding the isobaric flame equations. The spray is a dispersed phase so that the coupling of the phases only occurs in the gas phase equations through additional source terms describing mass, momentum and heat exchanges between the two phases. In the first sub-section, we recall the system of equations for the gaseous phase in the 1D self similar axisymmetrical configuration of counterflow diffusion flames. The multi-fluid modeling and sampling approach of the dispersed liquid phase are then presented in details in the second sub-section.

3.3.1 Modeling of the gaseous phase

The governing equations for the multicomponent reacting mixture of gas carrying a dilute spray can be taken as the isobaric flame equations under the low Mach Number approximation [Gio99] without accounting for the Dufour effect, but with added source terms in the conservation equations, representing the coupling with the liquid phase due to the exchange of mass, momentum and heat between the two phases. Those equations are given in [LM01]. The counterflow configuration admits a symmetry of revolution. The set of stationary equations can then be written as a 2D axisymmetrical system.

For this same configuration, when the flame is purely gaseous, one can look for a 1D self similar solution of the 2D system of equations [SCSG90] satisfying the following functional dependences: the density of the gas ρ , its temperature T , its axial velocity u_z , its reduced radial velocity $\frac{u_r}{r}$ and the mass fractions Y_k of the species of the gas have no radial dependence. They are functions of the axial coordinate z . The pressure field has a particular form $p = p_{atm} - J\frac{r^2}{2} + \hat{p}(z)$, where r denotes the radial coordinate. In the absence of

radial dependence of the boundary conditions, the derived self-similar equations are an exact solution of the original 2D system.

When the gaseous mixture is carrying a spray, the self-similar solution is preserved assuming that the source terms coming from the spray have no radial dependence; the system for the gaseous phase then reads :

$$2\rho U + \frac{\partial V}{\partial z} = -S^{mass} \quad (3.1)$$

$$V \frac{\partial Y_k}{\partial z} + \frac{\partial}{\partial z} (\rho Y_k \mathcal{V}_{z,k}) = m_k \omega_k - S_k^{species} + Y_k S^{mass} \quad (3.2)$$

$$\rho U^2 + V \frac{\partial U}{\partial z} = J + \frac{\partial}{\partial z} \left(\eta \frac{\partial U}{\partial z} \right) - \frac{1}{r} S_r^{mom} + U S^{mass} \quad (3.3)$$

$$V \frac{\partial u_z}{\partial z} = -\frac{\partial \hat{p}}{\partial z} + 2 \frac{\partial}{\partial z} \left(\eta \frac{\partial u_z}{\partial z} \right) + 2 \eta \frac{\partial U}{\partial z} - \frac{2}{3} \frac{\partial}{\partial z} \left(\eta \left(2U + \frac{\partial u_z}{\partial z} \right) \right) - S_z^{mom} + u_z S^{mass} \quad (3.4)$$

$$c_p V \frac{\partial T}{\partial z} - \frac{\partial}{\partial z} \left(\lambda \frac{\partial T}{\partial z} \right) = - \sum_{k=1}^{n_s} h_k m_k \omega_k - \sum_{k=1}^{n_s} \rho Y_k c_{p,k} \mathcal{V}_{z,k} \frac{\partial T}{\partial z} - S^{enth} \quad (3.5)$$

where $V = \rho u_z$ is the axial mass flux, U is the reduced radial velocity, c_p is the specific heat of the gas mixture, $c_p = \sum_{k \in S} Y_k c_{p,k}$, $c_{p,k}$ the specific heat of the k^{th} species, λ is the heat conductivity, η is the shear viscosity, J is the reduced pressure gradient, h_k the enthalpy, m_k the molar mass, ω_k the molar chemical production rate and $\mathcal{V}_{z,k}$ the axial diffusion velocity of the k^{th} species of the gas. The terms S^{mass} , $S_k^{species}$, S^{mom} and S^{enth} represent the exchange of total mass, mass of the species, momentum and enthalpy with the liquid phase. A model for the dispersed liquid phase has to be chosen in order to express these source terms.

3.3.2 Modeling of the dispersed phase

The evolution of the dispersed phase can be described by a statistical approach [Duk80], [DS97], [Wil85], [VH97]. The spray is composed of spherical droplets characterized only by one geometry parameter ϕ (in practice, ϕ is the radius, the surface or the volume of the droplets) at low Weber number, one velocity u_l and one temperature T_l . The spray is then characterized by a distribution function $f^\phi(t, x, \phi, u_l, T_l)$, also called probability density function, so that $f^\phi dx d\phi du_l dT_l$ is the probable number of droplets at time t , in the phase space elementary volume $dx d\phi du_l dT_l$ around the point (x, ϕ, u_l, T_l) . This distribution function f^ϕ satisfies a transport equation which is a generalization of the equation given by Williams [LM01], [Wil58], [Wil85].

Multi-fluid approaches can be rigorously derived from this kinetic-theory model : the distribution function is averaged over velocity and temperature and discretized in terms of droplet size, so that the poly-disperse spray and its infinite range of droplet sizes can be described with a limited number of variables [LM01].

Eulerian sampling method

The Eulerian sampling description is developed and presented in [LM01] for a one-dimensional stationary configuration in which droplets did not experience flow reversal. It can be applied to the counterflow diffusion flame because the problem is essentially 1D with the similarity assumption and we assume that the

droplets always flow in the same direction [LM01]. As in the Lagrangian description, we discretize the distribution function as a sum of Dirac delta functions:

$$f^\phi(z, \phi, u, T) = \sum_{i=1}^N n^{(i)}(z) \delta\left(\phi - \phi_s^{(i)}(z)\right) \delta\left(u - u_s^{(i)}(z)\right) \delta\left(T - T_s^{(i)}(z)\right) \quad (3.6)$$

We then replace the set of droplets by N independent groups, the droplets of each group i having the same characteristics (the same geometry $\phi_s^{(i)}$, the same velocity $u_s^{(i)}$ and the same temperature $T_s^{(i)}$). The number of droplets per unit volume of the i^{th} group is denoted $n^{(i)}$. In the considered configuration, the Lagrangian description in terms of time t is equivalent to the Eulerian description in terms of spatial location z because for each group, the function $t \rightarrow z^{(i)}(t)$ is single-valued. The detail of this relation can be found in [LM01].

General equations for a 1D stationary problem are given in [LM01]. Here, we also look for a self-similar 1D solution for the liquid equations, with the functional dependencies:

$$\rho_s^{(i)} = \rho_s^{(i)}(z), \quad \rho_s^{(i)} u_{s,z}^{(i)} = V_s^{(i)}(z), \quad u_{s,r}^{(i)} = r U_s^{(i)}(z), \quad T_s^{(i)} = T_s^{(i)}(z) \quad (3.7)$$

resulting in a system of 1D ordinary differential equations for the liquid variables as functions of the axial coordinate. Namely,

$$2n^{(i)} U_s^{(i)} + \frac{\partial n^{(i)} u_{s,z}^{(i)}}{\partial z} = 0, \quad (3.8)$$

$$2\rho_s^{(i)} U_s^{(i)} + \frac{\partial V_s^{(i)}}{\partial z} = -n^{(i)} \dot{m}^{(i)}, \quad (3.9)$$

$$3\rho_s^{(i)} \left(U_s^{(i)}\right)^2 + \frac{\partial U_s^{(i)} V_s^{(i)}}{\partial z} = -n^{(i)} \dot{m}^{(i)} U_s^{(i)} + \rho_s^{(i)} \frac{F_r^{(i)}}{r}, \quad (3.10)$$

$$2U_l^{(i)} V_s^{(i)} \frac{\partial u_{s,z}^{(i)} V_s^{(i)}}{\partial z} = -n^{(i)} \dot{m}^{(i)} u_{s,z}^{(i)} + \rho_s^{(i)} F_z^{(i)} - \rho_s^{(i)} g, \quad (3.11)$$

$$c_{p,l} V_s^{(i)} \frac{\partial T_s^{(i)}}{\partial z} = \dot{q}^{(i)}, \quad (3.12)$$

where $\dot{m}^{(i)}$ is the rate of mass exchange between the two media for one droplet, $\dot{q}^{(i)}$ is the rate of heat exchange and where $F_z^{(i)}$, $F_r^{(i)}$ are the axial and radial components of the drag force. The source terms in the gas phase equations then read :

$$S^{mass} = - \sum_{i=1}^K n^{(i)} \dot{m}^{(i)}, \quad S^{mom} = \sum_{i=1}^K \left(\rho_s^{(i)} F^{(i)} - n^{(i)} \dot{m}^{(i)} u_s^{(i)} \right), \quad (3.13)$$

$$S^{enth} = - \sum_{i=1}^K \left(\dot{q}^{(i)} + L^{(i)} n^{(i)} \dot{m}^{(i)} - n^{(i)} \dot{m}^{(i)} (h_F(T_s^{(i)}) - h_F(T)) \right), \quad (3.14)$$

where h_F is the enthalpy of the fuel in the gaseous phase and $L^{(i)}$ the latent heat of vaporization at temperature $T_s^{(i)}$.

Eulerian Multi-fluid approach

The sectional model, developed by Tambour and al. [GAT86], [GST93], is a discretization, in fixed radii sections, of the distribution function averaged with respect to velocity and temperature $n^\phi(t, z, \phi) = \iint f^\phi du_l dT_l$,

the form of n as a function of the geometry being independent of t and z in a given section. In this way, the evolution of the mass concentration in a section is decoupled from the repartition in terms of sizes. The set of droplets is then discretized in a few sections, the j^{th} section being defined by $\phi_{\min}^{(j)} \leq \phi < \phi_{\min}^{(j+1)}$. In each section, the shape of n^ϕ is fixed in the following sense:

$$n^\phi(t, z, \phi) = m^{(j)}(t, z) \kappa^{(j)}(\phi); \quad (3.15)$$

where $m^{(j)}$ is the mass density of droplets (mass of liquid per unit volume) in the j^{th} section, with a moment constraint on $\kappa^{(j)}$ [LM01], [GST93].

The choice of the $\kappa^{(j)}(\phi)$ is equivalent to the choice of a basis, the continuous distribution function is projected on; this will be denoted by the ‘‘projection step’’ in the numerical analysis sense. The simplest solution is to choose $\kappa^{(j)}$ constant in a section. However, we still have the choice of ϕ , which can be either the radius, the surface or the volume of the droplets, and will define different projections. This issue was studied in [LM01] and [Lau02].

Each section is then characterized by its mass density $m^{(j)}$, its averaged velocity $u_d^{(j)}$ and its averaged temperature $T_d^{(j)}$. The sections have fixed sizes, which is a major difference compared to the sampling method. However, they are not independent from each other, exchanging mass, momentum and heat between one another. The precise set of assumptions in order to recover the sectional conservation equations from the kinetic-theory transport equation is given in [LM01]. It is shown in particular that the sectional approach pre-supposes a particular form of the distribution function :

$$f^\phi(t, x, \phi, T_l, u_l) = n(t, x, \phi) \delta(T_l - T_d(t, x, \phi)) \prod_{k=1}^3 \delta(u_{l,k} - u_{d,k}(t, x, \phi)) \quad (3.16)$$

where $T_d(t, x, \phi)$ and $u_d(t, x, \phi)$ are averaged quantities for a given size ϕ .

In order to use this approach in the counterflow configuration, we look for a 1D self-similar solution of the 2D axisymmetrical system. Just as for the sampling method, we then assume that the droplet density, the axial velocity $u_{d,z}$, the reduced radial velocity $\frac{u_{d,r}}{r}$ and the temperature of each droplet group have no radial dependence:

$$m^{(j)} = m^{(j)}(z), \quad m^{(j)} u_{d,z}^{(j)} = V_d^{(j)}(z), \quad u_{d,r}^{(j)} = r U_d^{(j)}(z), \quad T_d^{(j)} = T_d^{(j)}(z). \quad (3.17)$$

With those assumptions, all the source terms, except for momentum ones, have no radial dependence. The compatibility of the similarity assumption with the droplet model will be discussed in the next sub-section. The set of equations then reads :

$$2m^{(j)} U_d^{(j)} + \frac{\partial V_d^{(j)}}{\partial z} = -m^{(j)} E_1^{(j)} + m^{(j+1)} E_1^{(j+1)} + \dot{m}^{(j)} \quad (3.18)$$

$$3m^{(j)} \left(U_d^{(j)} \right)^2 + \frac{\partial U_d^{(j)} V_d^{(j)}}{\partial z} = -m^{(j)} E_1^{(j)} U_d^{(j)} + m^{(j+1)} E_1^{(j+1)} U_d^{(j+1)} + \dot{m}^{(j)} U_d^{(j)} + m^{(j)} \frac{F_r^{(j)}}{r} \quad (3.19)$$

$$2U_d^{(j)} V_d^{(j)} + \frac{\partial u_{d,z}^{(j)} V_d^{(j)}}{\partial z} = -m^{(j)} E_1^{(j)} u_{d,z}^{(j)} + m^{(j+1)} E_1^{(j+1)} u_{d,z}^{(j+1)} + \dot{m}^{(j)} u_{d,z}^{(j)} + m^{(j)} F_z^{(j)} \quad (3.20)$$

$$c_{p,l} V_d^{(j)} \frac{\partial T_d^{(j)}}{\partial z} = m^{(j+1)} E_1^{(j+1)} \left(h_l^{(j+1)} - h_l^{(j)} \right) + \dot{q}^{(j)} \quad (3.21)$$

where $V_d^{(j)} = m^{(j)}u_{d,z}^{(j)}$ is the axial mass flux, $U_d^{(j)}$ is the reduced radial velocity of droplets and $E_1^{(j)}$ is a constant characterizing the exchange between the sections and calculated from the shape of the distribution function. The rate of mass exchange between the two media $\dot{m}^{(j)}$ and the rate of heat exchange $\dot{q}^{(j)}$ are calculated in an averaged radius determined through the shape of the distribution function. The drag force is also calculated in another averaged radius. The source terms are then:

$$S^{mass} = - \sum_{j=1}^N \dot{m}^{(j)}, \quad S^{mom} = \sum_{j=1}^N \left(F^{(j)} m^{(j)} - \dot{m}^{(j)} u_d^{(j)} \right), \quad (3.22)$$

$$S^{enth} = - \sum_{j=1}^K \left(\dot{q}^{(j)} + L^{(j)} \dot{m}^{(j)} - \dot{m}^{(j)} (h_F(T_s^{(j)}) - h_F(T)) \right), \quad (3.23)$$

where $L^{(j)}$ is the latent heat of vaporization of the fuel at $T_d^{(j)}$.

In the approach described above, as for the sampling method, the exchange terms $F^{(j)}$, $\dot{m}^{(j)}$ and $\dot{q}^{(j)}$ depend on the choice of a droplet model.

3.3.3 Droplet model

We use an infinite conductivity model, also called "rapid mixing" model, combined with the modified film theory for convective corrections in order to describe the heating and vaporization of the droplets for several reasons : first, it is compatible with a kinetic-theory description of the spray [LM01] and takes into account the non stationary heating of the droplet; second, it is compatible with the sectional approach; third, it is compatible with the numerical method described below; fourth, the cost of the method is not prohibitive; and finally, it provides good results in the present configuration [MKGS98]. The evolution of droplet temperature is then given by the equation (3.12) or (3.21). For each group or section, the detailed expressions of the exchange terms of heat and mass, $\dot{q}^{(j)}$ and $\dot{m}^{(j)}$, can be found in [AS89]. This model has already been compared in [LM01] with the effective conductivity model of [AS89] and for which the instationary evolution of the inner temperature profile of the droplets is followed. Even if it is a little more accurate than the infinite conductivity model [AS89], its cost is significantly greater and the results are close enough so that the use of the infinite conductivity is justified [LM01].

The drag coefficient can be described by a Stokes law with convective corrections based on a relative Reynolds number, where the viscosity is evaluated at the mixture concentration and temperature in the boundary layer close to the surface (using the 1/3 rule) [AS89], [YC73]. For the configurations we consider, the Reynolds number is of order unity. Thus,

$$F(R, u, u_l) = \frac{9}{2} \left(1 + \frac{(R_{ed})^{2/3}}{6} \right) \frac{\mu}{\rho_l R^2} (u - u_l), \quad R_{ed} = \frac{2R|u - u_l|}{\nu}, \quad (3.24)$$

where u is the gas-phase velocity, R the radius of the droplets, ν the kinematic viscosity and μ the shear viscosity of the mixture evaluated at the mixture concentration. It can be shown that the use of convective corrections based on the relative Reynolds number is necessary for a correct evaluation of the droplet dynamics. In fact, a choice of a more refined model for the drag force acting on the droplets is unwarranted [LM01].

This form of the drag force has to be slightly modified so that we can treat the problem as one-dimensional. The terms $F_r^{(k)}/r$ and $F_z^{(k)}$ can bring in radial dependence on the source term of the momentum equation or in the liquid equations, if we use the Stokes law with convective corrections (3.24). However, if we replace the Reynolds number R_{ed} by the Reynolds number R_{ed}^{ax} based on the axial component of the velocity

$$R_{ed}^{ax} = \frac{2R|u_z - u_{d,z}|}{\nu}, \quad (3.25)$$

the source terms in the momentum equations will then lose their radial dependencies, and the 1D similar solution for the gaseous and the liquid phases is an exact solution of the 2D-axisymmetrical system. The Reynolds number reads

$$R_{ed} = \frac{2R}{\nu} \sqrt{(u_z - u_{d,z})^2 + r^2 (U - U^{(i)})^2}, \quad (3.26)$$

where $U^{(i)}$ is the reduced radial velocity $U_s^{(i)}$ or $U_d^{(i)}$ of the i^{th} group or section of droplets. Clearly, these two numbers R_{ed} and R_{ed}^{ax} coincide along the centerline and are only approximately equal to each other in a zone surrounding the centerline. Our 1D model is then only valid in this zone and experimental measurements are also confined to this zone. A determination of the bounds of the zone where the solutions of the two sets of partial differential equations remain close is beyond the scope of this paper.

3.4 Numerical methods

We briefly present the numerical approach used for all the simulations; we refer to [LM01] for more details and extensions. The numerical approach proceeds with a decoupled adaptive nonlinear boundary value method. To reach a steady-state solution for the complete gas/liquid system, we alternatively solve the gas and liquid conservation equations, numerically decoupling the two phases. In order to have a good 'initial guess' for the method to converge, we use a pseudo-instationary method for the gaseous phase. When the instationary terms are below a fixed tolerance, stationary equations for the gas are solved. We terminate the process when the norm of the difference between successive gas and liquid-phase solutions is below the error tolerance for the combined solution.

The procedure for the gas has been discussed in detail elsewhere [SCSG90] and we outline here only its essential features. With the continuous differential operators replaced by finite difference expressions, we use a damped Newton method [Deu74] to solve the discretized system. As typical of these types of problems, the computational mesh is determined adaptively (the difference between the components of the discrete solution and of the gradients between two points of the mesh is then equidistributed). Transport properties, such as binary diffusion coefficients, thermal conductivity and the shear viscosity, along with the chemical source terms, are automatically evaluated by using highly optimized libraries [DG88] and are taken from [HMD97] for heptane and similar to [GDS⁺96] for methanol.

The first-order spray equations are integrated with a stiff ordinary differential equation solver, LSODE for the package ODEPACK from the netlib library [Hin83], from the fuel boundary condition until 99.9% of the initial liquid mass has evaporated. For the 1D system, we solve the two-way coupled ordinary differential system of equations with the similarity assumption. The trajectories of the droplets can then be deduced from the similarity assumption.

3.5 Optimal discretization for both multi-fluid models

To discretize the distribution function and consider only a finite number of liquid “fluids” coupled to the gas phase equations, several approaches can be implemented. In previous work [MKGS98], [GDS⁺96] the discretization points were evenly spaced in droplet radii, that is, the range of sizes covered in each section was kept constant, and the upper limit radius was defined as the value beyond which no mass was found. The discretization was applied with higher and higher resolution till the solution became independent of it, within a prescribed tolerance. Even if the overall structure of the spray flame was adequately predicted by the simulation, a few problems arose. For starters, sections at the beginning (low size end) and tail (upper size end) of the distributions have typically very low count numbers. As a result, their statistics are unreliable.

But, there appears to be an intrinsic problem with the sectional approach. For example, statistical considerations would not explain why the vaporization of the large droplets was systematically underestimated relative to the experimental results while that of the small droplets was overestimated. Hence, an in-depth assessment of the multi-fluid approach and its shortcomings is warranted.

3.5.1 Fundamentals

Simulations were made on heptane flames or methanol flames using 8 sections (see Fig. 3.1a) that were equidistributed in radii. As a result, mass was unevenly partitioned among the various sections at the burner outlet, with most of it being concentrated in only 3 sections. There is no fundamental reasons to justify this selection except for the fact that droplet radius is an experimental observable.

The shape of the distribution function, $\kappa^{(j)}$ in Eq. (3.15) is fixed in each section [LM01], [GST93]. In [GST93], for example, the volume-based distribution function n^V , that is, the droplet number density was assumed constant in each section. The selection of the shape function through the projection step defined in subsection 3.2.2 by Eq. (3.15) will affect the exchanges with the other sections and with the gas, particularly so when the bulk of the mass is concentrated in a few sections around the histogram peak. Also, because of the typical shape of a distribution (see Fig. 3.1), a constant shape function results in an overestimate of the evaporation of the largest sections and underestimate in the evaporation of the smaller droplets. One could conceivably choose other projection steps, with either n^R , or n^S taken as constant in a section (however, once one projection step is chosen, it fixes the profiles n^ϕ , for all other ϕ). For example, choosing n^R constant yields better agreement because of the shape of the particular distribution function. But any such selection would be arbitrary [LM01] or has to be based on rigorous numerical analysis [Lau02].

The treatment of the last section presents additional difficulties, since the selection of an upper limit of the discretization, when only a few sections are used and they are equidistributed in radius, influences the entire discretization, as shown in Fig. 3.1c for the case of a 6-section model.

A potentially preferable discretization criterion would be to ensure that the mass is equipartitioned among the sections, since mass is the primary extensive property that is exchanged between sections and between the liquid and the gas phase. As shown in Fig. 3.1b, this choice results in a refined discretization where the mass is concentrated, which is advantageous since the influence of the projection step will be less significant in this case. However, it produces two large sections, the first and the last one, where further intrasectional modeling is needed.

For the treatment of the first section, we decided to take n^S constant as a function of surface, which is

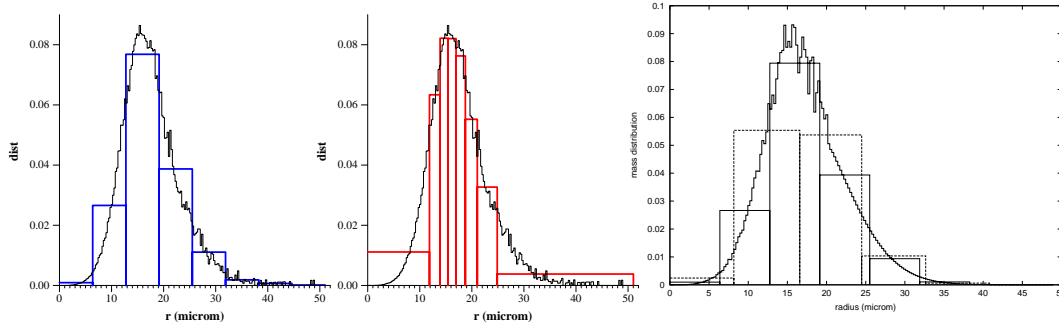


Figure 3.1: Experimental mass distribution function (continuous line) and equidistributed sections (histograms), with constant radius intervals (a) or constant mass in each section (b). (c) Effect of changes in the maximum droplet radius: $38.3\mu\text{m}$ (solid line), $48.9\mu\text{m}$ (dashed line) for a 6-section distribution with constant radius interval in each section

equivalent to choosing n^R linear as a function of radius, a choice that will prove to be adequate.

For the treatment of the last section, we will be guided by experimental information. The count distribution function and the corresponding mass distribution function at the inlet are presented in Fig. 3.2 as a function of the droplet radius for two samples of different sizes: 5,000 droplets (on the left) and 100,000 droplets (on the right). The distribution of the smaller sample is invariably noisier and the amplitude of the fluctuations in the distribution is amplified in the mass distribution function. Notice also that the detection of large droplets has a significant impact on the mass distribution and the statistics of the tail are inadequate to extract a distribution function trend without arbitrarily smoothing the function.

Obtaining large samples in high data rate regions of the spray, i.e. at the burner outlet, is experimentally feasible. This is not the case when the data rate (droplets detected per unit time) has decreased dramatically, that is, close to the plane beyond which all droplets have vaporized (the vaporization plane). In the ensuing discussion, we demonstrate, after painstakingly collecting very large samples throughout the flame, that aspects of the distribution function, such as, for example, the tail profile are self-preserving.

Fig. 3.3a shows that the tail of the distribution function n^S as a function of the droplet surface seems to have an exponential behavior. If this behavior is confirmed throughout the flame, we have a clear recipe to reconstruct the distribution tail.

To that end, a nonlinear sliding regression is applied to the linear region in the semi-log plot in Fig. 3.3a, so that $n^S \simeq \exp(aS + b)$ where S is the droplet surface. The reconstruction algorithm is applied to samples collected at many locations within the interval from inlet to vaporization front for Flame A. In Table 2, the slope a of the logarithm of the distribution tail n^S (distribution function as a function of the surface) is presented. The maximum difference between the mean value of the slope and individual values is no more than 8%, which has a negligible impact on the mass repartition among the various sections. As a result, we can consider the slope constant. For modeling purposes, then, we will apply a continuous representation of the size distribution, as inferred from the high data rate experiments, even to low data rate regions.

point (10^{-2}cm)	120	195	235	420	495	520	570
slope (10^{-4})	-6.2	-5.9	-5.9	-6.1	-6.4	-6.2	-6.7

Table 2: Experimental slopes of $\log n^S$ at various locations along the burner axis.

An example of this distribution function reconstruction using a continuous representation is given in

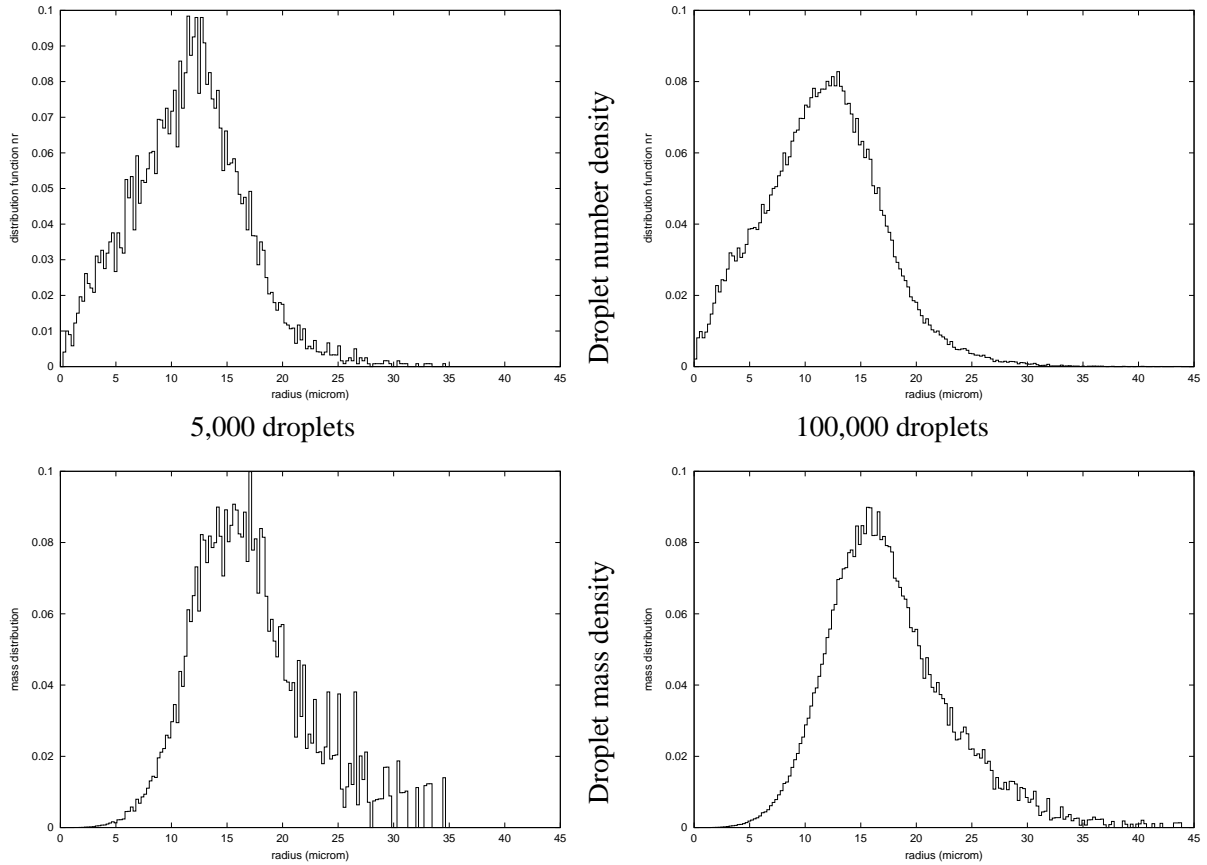


Figure 3.2: Distribution function $n^R(R)$ and mass distribution calculated on a sample of 5,000 (figures on the left side) or 100,000 droplets (figures on the right side).

Fig. 3.3b and 3.3c. This reconstruction is performed here at a point close to the flame: $z = 0.57$ cm, where the statistics have already deteriorated. This approach clearly removes some arbitrariness in the comparison between experiments and calculations. Also, it should enhance the accuracy of the calculation.

Using an Eulerian sampling method with a highly refined discretization of 76 groups equidistributed in radius, we checked that the distribution function is still exponentially decreasing but also that the corresponding value of the slope stays around the initial value within a 7% range in Fig. 3.4a. This is in fairly good agreement with the experimental measurements. The self-preserving exponential decay in the large size range, as observed experimentally as well as numerically, suggests the applications of this type of function to the last section in the equidistributed mass discretization. Three reasons make this approach desirable.

First, if, as argued earlier, it is preferable to equidistribute the mass among the sections, one has to be able to evaluate precisely the amount of mass in each group or section. When the experimental statistics are poor, as is often the case for sparsely populated large droplet ranges, the use of a continuous distribution removes any difficulty. Furthermore, the well-defined behavior of the continuous distribution function simplifies the location of the section boundaries - a critical choice if one wants to reduce the number of sections, and, consequently, of unknowns without letting the level of precision deteriorate. This reduction of the degrees of freedom will be essential to adapt the multi-fluid methods to 2D or 3D systems. Second, the prescription of

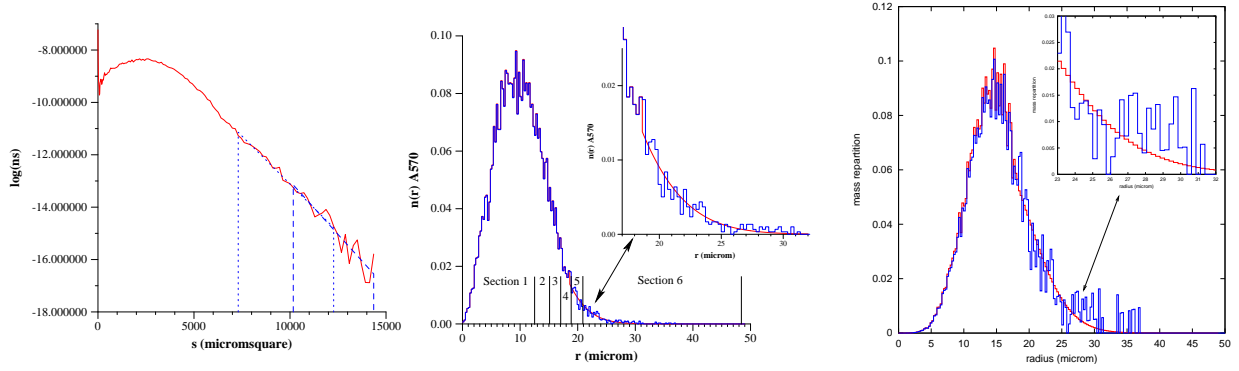


Figure 3.3: Logarithm of the experimental distribution function n^s as a function of the surface for a sample of 100,000 droplets. Experimental and reconstructed number density (middle) and mass distribution functions (right).

a boundary condition when the size of the droplets approaches infinity is generally useful in the modeling of the evolution of the size distribution, as, for example, in the analytical treatment of coalescence phenomena of relevance to practical sprays (see, for example [MV01], [LMV01]). Third the exponential decay as a function of surface is compatible with the pure vaporization process, which is equivalent to an advection equation in the surface phase space preserving the form of the distribution.

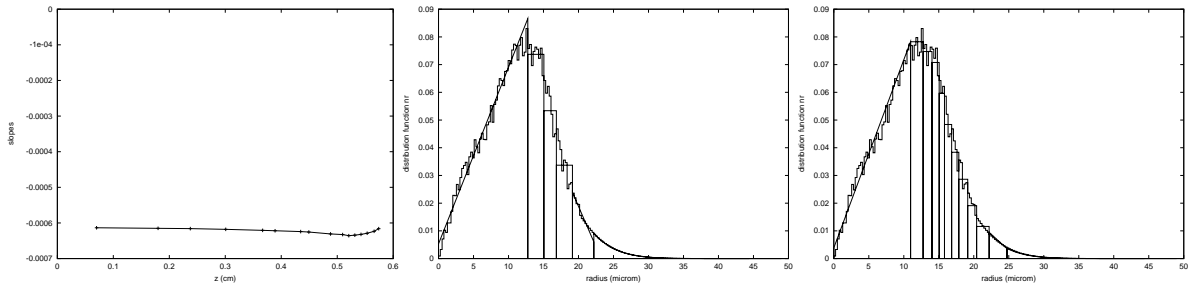


Figure 3.4: (a) : Calculated slopes of $\log n^s$ in different points with a refined sampling method (76 groups of droplets). Experimental distribution function and choice of the sections for the sectional approach with 6 sections (b) and 12 sections (c).

3.5.2 Application to multi-fluid methods

We apply the previous considerations to a discretization with 6 and 12 sections. We also assumed that $\kappa^{(j)}(R)$ is affine in the first and last but one sections. For other sections, because the derivative of the distribution function can change, we merely assume $\kappa^{(j)}(R)$ to be constant as a function of radius. Although there is some arbitrariness in this choice, its impact on the final solution is minimal because the inner sections represent only very small size ranges. The partitions of the radius spectrum for the distribution are shown in Fig. 3.4b with 6 sections, and in Fig. 3.4c with 12 sections.

For the last section, the exponential decrease of the distribution function is clearly well suited to the sectional approach. In [LM01], we saw that the velocity and the temperature considered in a section are supposed to be the mass averaged velocity and temperature. If the last section covers too large a range of sizes, some different dynamics or heating can develop inside this section and the assumption of a single

velocity and single temperature can be poor. Where the velocity or temperature of the gas are changing, we can check that the temperature and velocity of the section are correctly describing the averaged dynamics and heating as follows.

We can compare two numerical simulations. A first one with the sectional approach is performed on Flame A with 6 sections equidistributed in mass, with a distribution function exponentially decreasing as a function of the surface in the last section and affine or constant in radius in the other sections (discretization shown in Fig. 3.4b). We then consider a finer discretization with a total of 15 sections: the first five sections are taken to be the same as in the previous calculation, the last section is divided into 10 sections equidistributed in mass. We can then compare the velocity and the temperature of the 6th section in the case of the first discretization with the mass averaged velocity and temperature of the last ten sections in the second case. The relative difference between the temperature of the last section for the coarse discretization and the corresponding mass averaged temperature for the finer discretization is less than 0.6%. The effect on the temperature can then be neglected. The difference of axial velocity is below 1.6% of the initial axial velocity. Before $z = 0.57$ cm, a zone where more than 80% of the spray mass is vaporized, this difference is less than 0.5%. For the radial velocity, the difference reaches 3% close to the flame but is less than 2.0% before $z = 0.57$ cm. These results show that even if the distribution tail is represented by a big section, the dynamics of the droplets are well described with the chosen shape of the distribution function, in the zone where there is still some amount of mass in the spray. At first glance, this property seems to be related to the particular problem we are considering. However, the fact that the distribution function is exponentially decreasing as a function of surface, results in an important concentration of the droplet number close to the lower size boundary. Consequently, except in some extreme situations, the description “in the mean” for this last section will be reasonable.

For the sampling method, we have to choose the radii and number density. To this end, we can parallel the approach implemented in the sectional method. The number of droplets and their radius in each group are chosen so that the amount of mass and of surface for each group matches the experimental measurements:

$$\rho_l \frac{4}{3} \pi \left(R^{(i)} \right)^3 n^{(i)} = \int_{\phi_{min}^{(i)}}^{\phi_{max}^{(i)}} \rho_l v n^\phi(\phi) d\phi, \quad 4\pi \left(R^{(i)} \right)^2 n^{(i)} = \int_{\phi_{min}^{(i)}}^{\phi_{max}^{(i)}} s n^\phi(\phi) d\phi. \quad (3.27)$$

3.6 Numerical comparisons

We will investigate in this section the influence of the reduction of the number of unknowns on the precision of the calculation. To this end, we will consider three cases: the first one is a simplified 1D configuration, also used in [LM01], where dynamical effects and heating effects due to the dynamical and thermal inertia of the droplets are not present. Only vaporization is present, thus leading to an analytical solution. It is useful to gauge the impact of the discretization. For the second case, we consider the two heptane flames, Flame A and B, with two approaches and various discretization levels. We know from [LM01] that we can take a simulation with 30 groups with the sampling method as a reference and compare it to coarser discretizations. Lastly, we consider the methanol flame, Flame C, with a high strain rate. A coarse discretization with equidistributed radii can lead to satisfactory results when the flame is stable as in [GDS⁺96]. This is not the case when the flame is weaker and becomes more sensitive to the droplets vaporization history. A good description of the tail of the distribution will then be of consequence and impact also the chemical species profiles such as the radicals responsible for the formation of pollutants.

3.6.1 A 1D stationary case with pure vaporization

We consider in this section a purely monodimensional case and a polydisperse spray with the same distribution function and the models described in the previous sections for the dispersed phase. The gas is injected at a temperature of 450 K, with a velocity of 15.05 cm.s^{-1} . We want to describe the vaporization process decoupling it from the dynamics of the droplets, so that we inject the cloud at the same velocity as the gaseous phase in a gravity-free environment.

For this low gas temperature, the temperature of the droplets converges to a stationary equilibrium value related to the gas composition and temperature. For the chosen gas temperature, the corresponding droplet surface temperature is 337.9 K and the droplets are injected at this temperature, in such a way that the cloud only undergoes vaporization, without dynamic or heating effect. In this case, an analytical solution is available; the rate of regression of the droplet surface $R_S = \frac{dS}{dt}$, is then constant as a function of time and space (the velocity u_l , being constant), so that $S = S_0 + R_S t = S_0 + \frac{R_S}{u_l} z$. The distribution function then satisfies an advection equation with constant velocity in the phase space; its value at location z can be deduced from the initial distribution function by a translation of $\frac{R_S}{u_l} z$. If the distribution tail, as a function of the surface, can be written as $\Psi e^{\alpha S}$ at the inlet, the distribution becomes $\Psi e^{\alpha(S + \frac{R_S}{u_l} z)} = \Psi e^{\alpha S} \times e^{\alpha \frac{R_S}{u_l} z}$ at z . It is interesting to note that the tail of the distribution function is preserved in this purely vaporization process.

The differences of mass, relative to the initial mass, between each the three discretizations (6, 12 and 30) and the analytical result are plotted in Fig. 3.5a for the sampling method and in Fig. 3.5b for the sectional one.

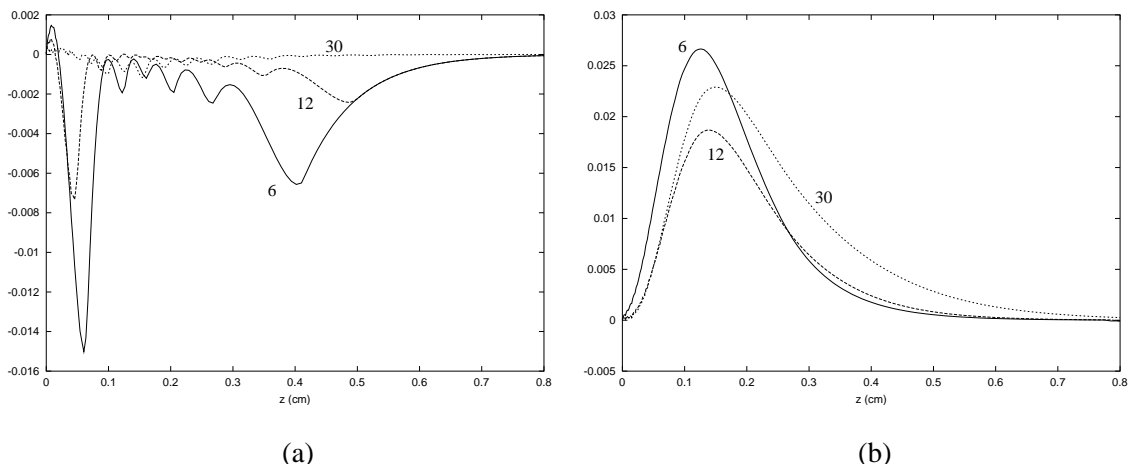


Figure 3.5: Evolution of the difference of mass with respect to the exact solution, relative to the initial mass, for the sampling method (figure a) and the sectional approach (figure b) with 6 (solid line), 12 (dashed line) and 30 (dotted line) groups or sections.

For the sampling method, as expected [LM01], the error with the refined mesh is below 0.1%, below 0.8% with 12 groups, and it reaches 1.5% with 6 groups. For 6 and 12 groups, most of the error is due to the first and last groups which are related to the existence of large first and last sections. This approach is not very satisfactory and many groups should be used in these regions to improve the precision. For the sectional approach, the errors are similar for the three discretizations. The error for 12 sections is even smaller than

the one for 30 sections and the one for 6 sections is smaller for most of the domain, where some droplet mass is present. It shows that the optimization of the number of unknowns conducted in the previous section has a strong impact on the precision of the mass density of droplets.

We further compare the mass distributions function through their integrals representing the cumulative mass in the spray at a given location.

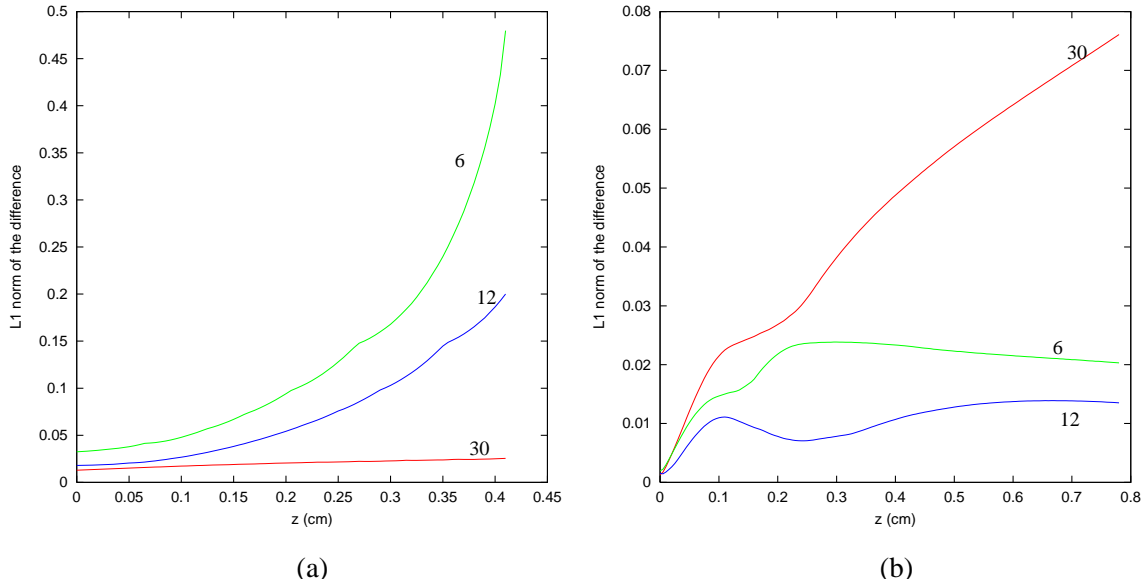


Figure 3.6: a: L^1 norm of the difference between the antiderivative of the mass distribution function for the sampling method with 6 (dashed), 12 (solid) and 30 (dotted) groups and the antiderivative of the exact solution. b: L^1 norm of the difference between the antiderivative of the mass distribution function for the sectional approach with 6 (dashed), 12 (solid) and 30 (dotted) sections and the antiderivative of the exact solution.

For the cases with 6 and 12 groups, because of the lack of representation of this limited sample, the error starts higher and grows rapidly as compared to the sectional approach. It can be seen in Fig. 3.6a, where we have plotted the evolution of the L^1 norm (integral of the absolute value) of the difference between the cumulative mass for a given discretization and the one for the exact solution.

A more interesting point is shown in Fig. 3.6b: for the sectional approach, the error for the calculations with 6 or 12 sections stabilizes, when we get closer to the vaporization point, at approximately 2% for 6 sections and 1.4% for 12 sections, whereas it grows until it reaches 8% for the refined mesh with 30 sections. This phenomenon was already noticed in [LM01], where it was shown that the evolution of the Sauter mean diameter with the sectional approach, even if refined, was not predicted correctly. This is mainly due to the fact that the approximation of the vaporization process in the size phase space is only first order in the discretization step, as shown in [Lau02]. Consequently the level of refinement required in order to reproduce precisely the behavior of the tail of the distribution would be much larger than 30, because of numerical diffusion. One can check that it is correctly represented in the present case with 6 and 12 sections because of the modeling of the distribution tail in the last section.

3.6.2 Heptane Flames

Comparisons are conducted, in this sub-section, using two stable heptane flames.

The gaseous fields of temperature, axial velocity and radial velocity are the same for the coupled solution within 0.8% of relative difference in all the cases. It is a first indication that the reduction of the number of unknowns can be done without giving up precision. Next, we make relative comparisons of the one-way coupled problem for converged fields of the gaseous phase with both approaches and with the three types of discretization. Then we can identify precisely the differences in total droplet mass density, mass averaged spray velocity and in mass distribution in the size phase space. In [LM01], it was shown that the sampling method is very precise with 30 groups and it is going to be the reference solution for the subsequent comparisons.

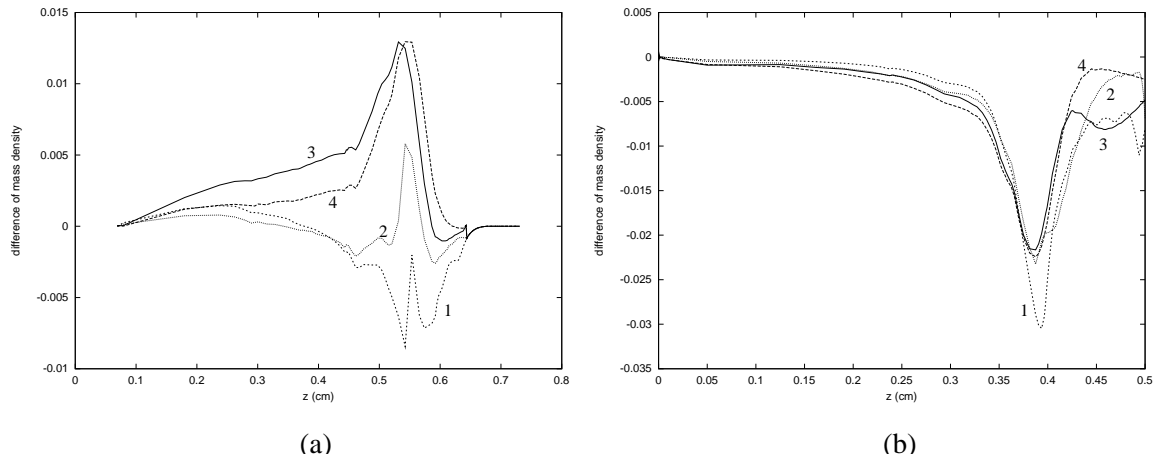


Figure 3.7: Difference of total mass with respect to the sampling approach with 30 group, relative to the initial mass density, of sampling with 6 groups (line 1), sampling with 12 groups (line 2), sectional with 6 sections (line 3), sectional with 12 sections (line 4), for Flame A (figure a) and for Flame B (figure b).

The first interesting variable describing the global droplet vaporization process is the mass concentration of droplets per unit volume of gas. For flame A, we represent the difference of droplet mass density relative to the initial mass density in Fig. 3.7a. The same differences are represented for the flame B in Fig. 3.7b. For flame A, the difference between the discretizations does not go beyond 1.7% for the sectional approach and 0.8% for the sampling one. It shows that the vaporization process is still well described with a reduction of the number of sections or groups. For flame B, the difference does not go beyond 2.5% for the sectional method and 3% for the sampling one. We then compare the mass averaged velocity, which describes the global dynamics of the spray. In Fig. 3.8 for Flame B, we can see the difference of mass averaged velocity between the calculations with 6 or 12 groups or sections and the refined sampling method. The two components of the velocity are treated differently because the axial velocity is changing sign, so that only the difference relative to the value at the entrance is meaningful, which it is not the case of the monotonically increasing reduced radial velocity. For Flame B, the differences are small (below 2% for the axial component and below 1% for the radial one) until more than 80% of the spray has already vaporized. They increase in the flame region as a consequence of the choice of a big last section for the sectional method (see section 5.1). For Flame A, the differences are even smaller and we do not present the corresponding graph.

From the point of view of the global vaporization process and droplet dynamics, calculations with a reduced number of unknowns give results very close to those with refined methods.

In addition to global variables, we also want to compare the distribution function in the size phase space.

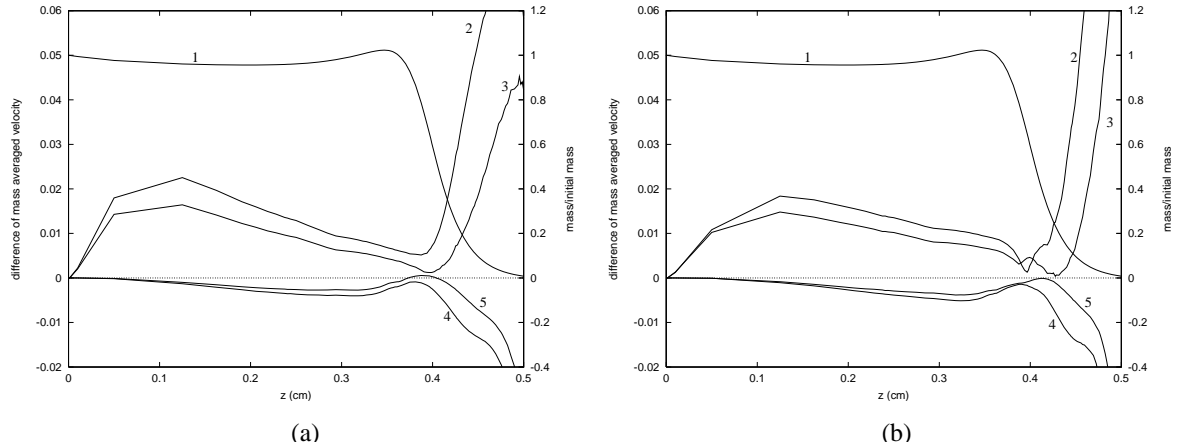


Figure 3.8: Comparison of axial and radial velocity with both sectional (a) and sampling (b) approaches for Flame B. Mass density divided by the initial mass (line 1), difference of mass averaged axial velocity, with respect to the calculations with 30 groups, of the calculations with 6 (line 4) or 12 (line 5) sections (a) or groups (b), difference of mass averaged reduced radial velocity, with respect to the calculations with 30 groups, of the calculations with 6 (line 2) or 12 (line 3) sections (a) or groups (b).

However, in order to do so, we have to reconstruct the sampled distribution from the Dirac delta functions, and the comparison will only be qualitative and dependent on the reconstruction filter. The samples and the sections can not be compared in a direct manner. It is, for example, impossible to retrieve the trajectories of the various droplets from the sectional model. In order to quantify the differences, we compare the evolution of the normalized cumulative mass. For the sampling method, this integral is a piecewise constant function and for the sectional approach, it is a continuous function. In Fig. 3.9, we have plotted the integral of the absolute value (denoted by the L^1 norm) of the difference in cumulative mass between a given coarse discretization and the 30 sample reference one for Flame A, divided by the L^1 norm of the 30 sample distribution.

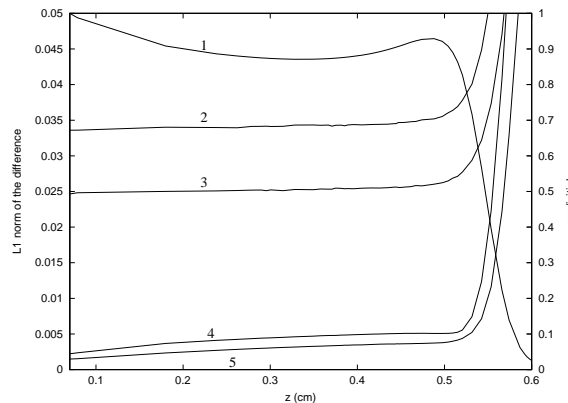


Figure 3.9: Evolution of the mass density, relative to the initial mass density, for the flame A, with the sampling method with 30 groups (line 1). L^1 norm of the difference, with respect to the calculations with 30 groups, of the antiderivative of the mass distribution function with 6 (line 2) or 12 (line 3) groups, and of the antiderivative of the mass distribution function with 6 (line 4) or 12 (line 5) sections, for flame A.

For the sectional, the error stays below 4% until 90% and 80% of the spray have vaporized for the 12 section case and for the 6 section case, respectively, thus showing good behavior even with a limited number of sections. For the sampling method, the error reaches from the start 2.5% or 3.5% because of the lack of representation of the original continuous function and because the integrals are piecewise constant. Furthermore, it increases at locations closer to the flame, the number of groups decreasing because of the evaporation.

We conclude that, for these stable flames, the reduction of the number of “fluids” proposed in Section 5 provides an efficient way of reducing the cost of the calculation without sacrificing precision.

3.6.3 Influence of discretization on a methanol flame model

We focus on a rather high strain rate methanol flame (Flame C). We want to show that a coarse discretization with equidistributed radii as retained in [GDS⁺96] is not viable any more if we want to predict precisely the flame structure and the radicals concentrations.

To this end, simulations are made with two 6-section discretizations: a first optimal discretization, as described in section 5, and a second discretization equidistributed in radii (Fig 3.1c dashed line), the distribution function being constant in each section as a function of the volume as in [GDS⁺96]. Those two simulations are compared with the reference simulation, that is, the sampling method with 30 groups. We can see that the variables of the gas are very close between the sectional method with the first discretization and our reference simulation (difference of 10K for the flame temperature, 1.7%, 2.5% and 2% for the molar mass of CO, O and CH₂O relative to the maximal values, respectively, and nearly coincident vaporization fronts). Moreover, the location of the vaporization front and flame front are unaffected by the use of the optimized 6 sections discretization.

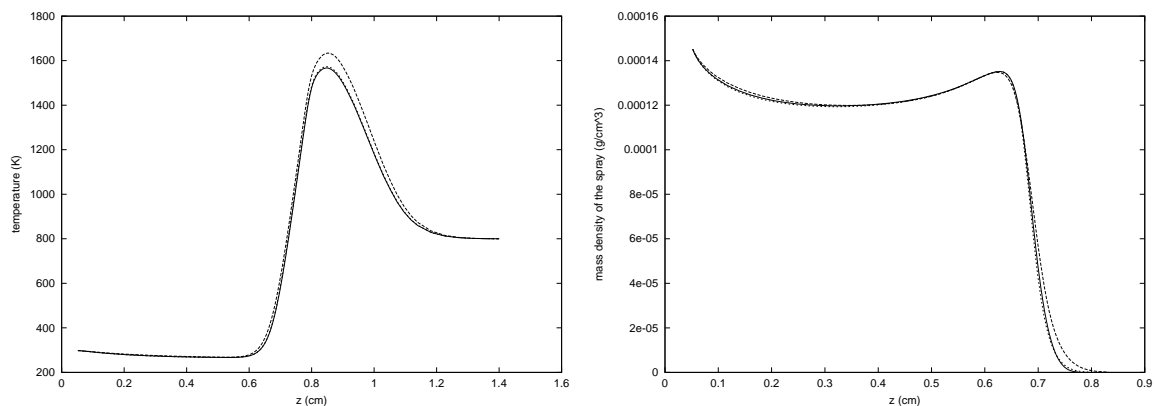


Figure 3.10: a: Evolution of the gas-phase temperature as a function of axial coordinate with the first discretization (solid line), with the second discretization (dashed line) and with 30 groups (dotted line). b: Evolution of the total mass density of the spray with the first discretization (solid line), with the second discretization (dashed line) and with 30 groups (dotted line).

Fig. 3.10a shows that the coarse 6 sections discretization brings in a 70K difference in the peak temperature as well as a slight shift of the flame front and a thickening of the flame. As shown in Fig. 3.10b, the vaporization front is also shifted further into the flame zone because of the underestimate of the vaporization of the big droplets.

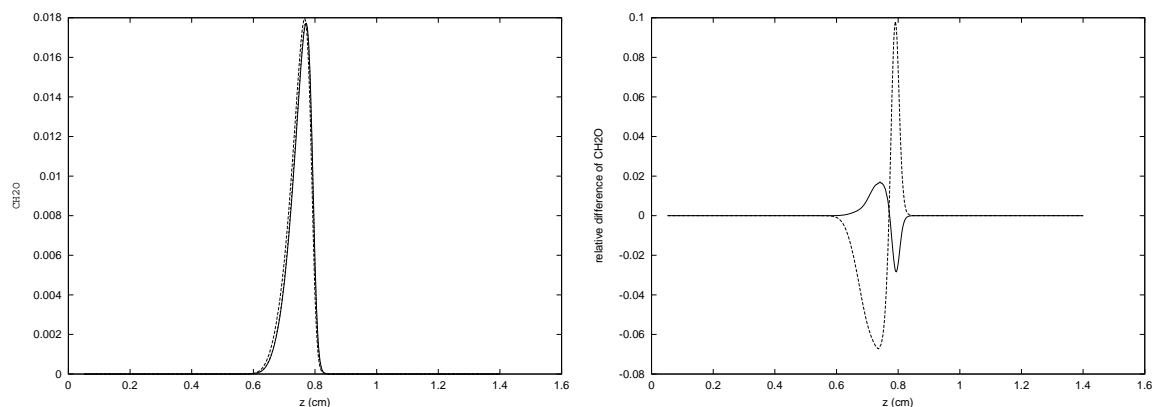


Figure 3.11: a: Evolution of the mole fraction of CH_2O with the first discretization (solid line) and with the second discretization (dashed line) and for 30 groups (dotted line). b: Difference between the two discretizations with 6 sections and the reference solution obtained with the 30 groups discretization relative to the maximum of the reference solution.

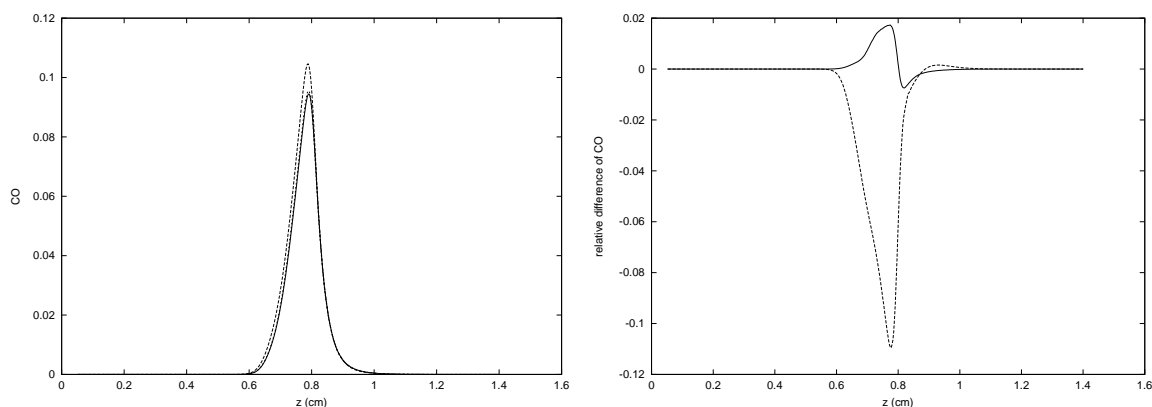


Figure 3.12: a: Evolution of the mole fraction of CO with the first discretization (solid line) and with the second discretization (dashed line) and for 30 groups (dotted line). b: Difference between the two discretizations with 6 sections and the reference solution obtained with the 30 groups discretization relative to the maximum of the reference solution.

The shift of the flame front can also be observed on the CH_2O mass fraction where a 10.0 % difference is observed in Fig. 3.11.

This shift in the localization of the vaporization front not only affects the temperature distribution and location of flame front, but also changes species fields responsible for the formation of pollutants as shown in Fig. 3.12 and 3.13, for example, for C and CO. The relative differences can reach 19% for O and 11% for CO.

We can then conclude that the optimized discretization provides a good representation of the vaporization process for the considered polydisperse spray. It is especially important for weak flames, when extinction is approached, where the vaporization history is of primary importance for the correct description of the flame structure.

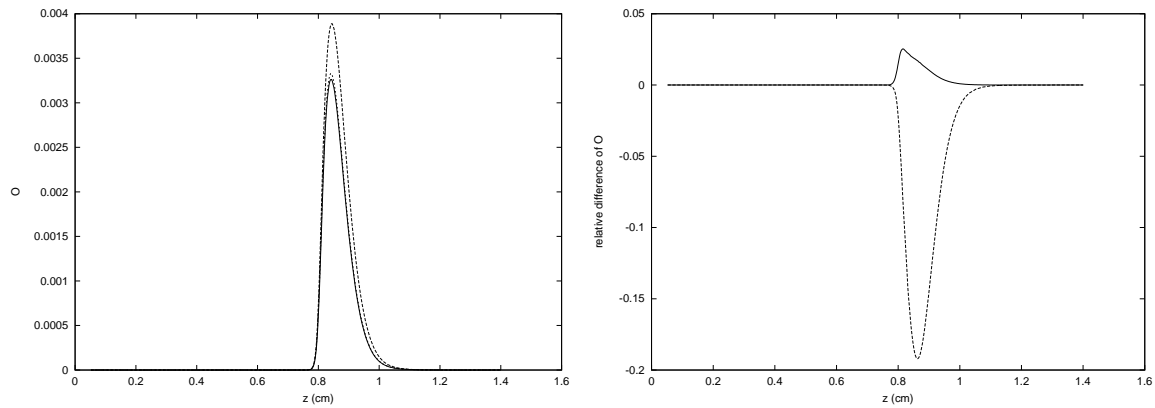


Figure 3.13: a: Evolution of the mole fraction of O with the first discretization (solid line) and with the second discretization (dashed line) and for 30 groups (dotted line). b: Difference between the two discretizations with 6 sections and the reference solution obtained with the 30 groups discretization relative to the maximum of the reference solution.

3.6.4 Cost

The purpose of the present sub-section is to give an idea of the impact of the proposed optimization on the cost of the simulations. Simulations are performed on DECalpha EV6, 600MHz. We compare the resolutions with the three discretizations 6, 12 and 30 for all three cases and with the two methods, depending on the precision tolerances imposed with LSODE.

No. groups	6	12	30	No. sections	6	12	30
Flame A	1	4.31	32.0	Flame A	1.26	4.38	28.0
Flame B	1.35	6.0	41.7	Flame B	1.82	6.16	52.0
Flame C	/	/	24.2	Flame C	1.27/1.47	/	/
1D	.97	4.28	36.9	1D	1.74	6.15	41.2

Table 3: Relative CPU time with respect to the Flame A calculation with 6 groups for one resolution of the liquid phase.

The reduction of the number of “fluids” has a big impact on the cost for the resolution of the liquid phase. It justifies the effort conducted on the optimization of the number of “fluids”, as long as a sufficiently accurate solution is obtained, as demonstrated in sections 6.1, 6.2 and 6.3.

3.7 Comparison with experiments

The purpose of the present section is to validate the numerical models developed in the previous sections by comparing numerical simulations of the self-similar equations, using a 12 sections and a 30 groups discretizations, with the experimental measurements. Before going into the details of the polydisperse vaporization process, which is the heart of the present work, we begin with the gas-phase variables as in [MKGS98]. Fig. 3.14a and 3.14b show the experimental and simulated profiles of the axial velocity and

temperature¹ of the gas. In the present case, the numerical results correspond to a 30 groups discretization which has been shown to describe precisely the vaporization of the spray [LM01].

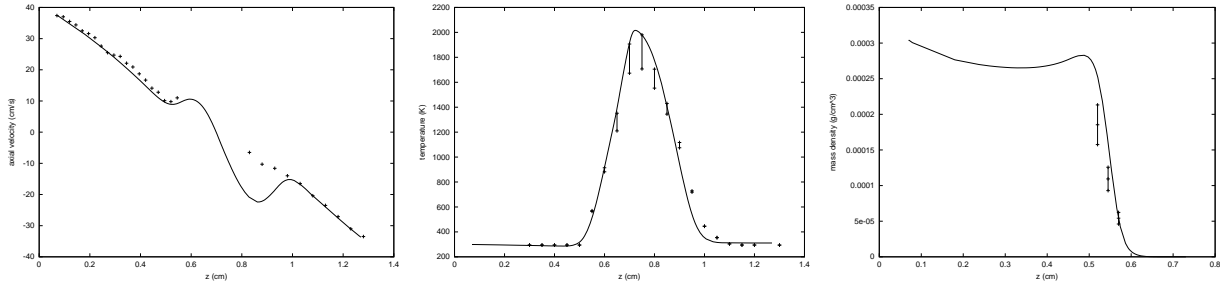


Figure 3.14: Experimental and calculated (sampling with 30 groups) profiles for Flame A : a) axial velocity of the gas, b) gas-phase temperature , and c) total droplet mass concentration.

We then compare the total mass density of droplets to the experimental values measured at three locations : $z = 0.52$ cm, $z = 0.545$ cm and $z = 0.57$ cm, where respectively 46%, 65% and 87% of the spray has vaporized. The temperature of the gas at the three locations are 368 K, 468 K and 689 K, respectively. The first point corresponds to the beginning of the gas temperature increase and the last point is close to the flame and very close to the evaporation front. Fig. 3.14c represents the evolution of the mass concentration for the two approaches (12 sections and 30 groups) and the three points of measurement, with the error bars. Before the vaporization region, experiments and calculations match perfectly. Here, we only concentrate on the vaporization region beyond $z = 0.5$ cm, when agreement is much more challenging.

Clearly, the global behavior of the flame is very well captured. We now concentrate on the ability of the numerical simulations to reproduce correctly the polydisperse vaporization process. To this end, we have plotted in Fig. 3.15a, Fig. 3.15b and 3.15c the mass distribution of droplets coming from the experiments with a reconstructed tail and the simulated ones for 12 sections and 30 groups. Note that the scale of Fig. 3.15c is twice that of other figures. In order to compare both approaches, we obtained a continuous distribution from the sampled one using an appropriate filter. The ability of the sectional approach with 12 sections to reproduce the polydisperse vaporization process of the spray is validated by these comparisons. To avoid the reconstruction of the continuous distribution function from the sampled one and to be more precise, we plot the cumulative mass associated to the three measurement points in Fig. 3.16. This reduced quantity $\frac{1}{m_{tot}} \int_0^R \rho_l \frac{4}{3} \pi r^3 f^R(r) dr$, $m_{tot} = \int_0^\infty \rho_l \frac{4}{3} \pi r^3 f^R(r) dr$, which is also defined for the sampled distribution, allows us to precisely compare the differences between the various approaches. Even if some difference is to be found at $z = 0.57$ cm, the overall comparison is very good.

The agreement is very good for the first two points $z = 0.52$ cm and $z = 0.545$ cm, both in terms of size distribution (Fig. 3.15a and Fig. 3.15b) and cumulative size distribution (Fig. 3.16a and Fig. 3.16b). It is then interesting to consider the last point $z = 0.57$ cm where even though the mass concentration for experiments and calculations appears to be almost the same, the distribution function of the sectional approach is clearly shifted compared to the experimental distribution. It is confirmed by the plot of the cumulative mass in Fig. 3.16c. It is particularly interesting to note that at $z = 0.57$ cm, 2% of the droplet

¹The bars in Fig. 3.14b are obtained from standard corrections for radiative effects assuming, for the upper limit, a thermocouple of cylindrical shape and, for the lower limit, of spherical shape. It has to be noticed that the shape of the thermocouple is close to an oblong spheroid so that the real temperature of the gaseous phase is a little closer to the upper limit.

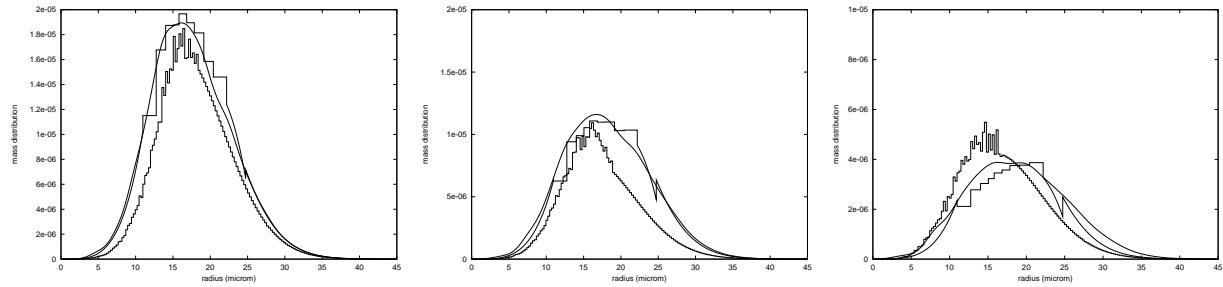


Figure 3.15: Repartition of droplet mass at $z = 0.52$ cm, $z = 0.545$ cm and $z = 0.57$ cm for reconstructed experimental measurements, numerical simulations with the sectional approach and 12 sections and numerical simulations with sampling and 30 groups.

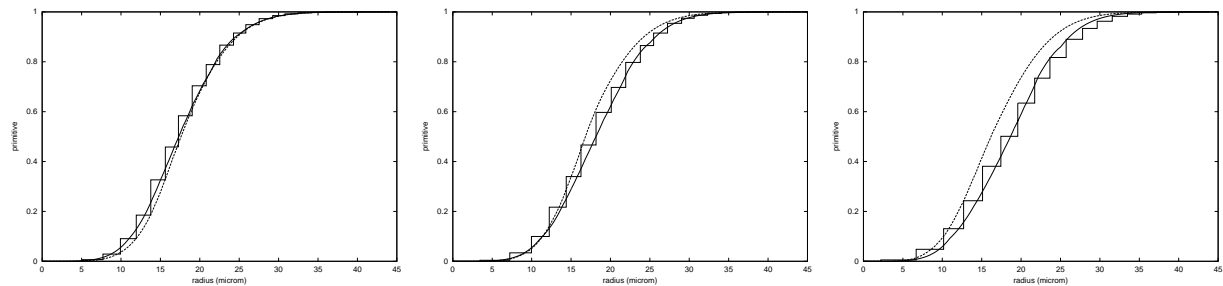


Figure 3.16: Cumulative mass distribution function. Comparisons of experimental data (dashed line) with results of sectional with 12 sections (solid line) and sampling with 30 groups (broken line) at $z = 0.52$ cm, $z = 0.545$ cm and $z = 0.57$ cm.

number density in the tail ($17 \leq R \leq 40 \mu\text{m}$, 200 droplets per cubic centimeter out of 10000) accounts for 32% of the mass density. It is also worth mentioning that 200 droplets per cubic centimeter would represent less than 1.4% of the droplet number density and 20% of the mass density at $z = 0.545$ cm, and less than 0.9% of the droplet number density 10% of the mass density at $z = 0.52$ cm. We have used the same slope for the reconstruction of the tail of the distribution function. Small errors at that level had no impact before but start to have a strong impact close to the vaporization front, at $z = 0.57$ cm, where the reconstruction zone represents a third of the total mass. Beyond this point, it is not clear that the use of a “fluid” type description for the tail of the distribution function is still valid. However, its contribution to the sections with smaller sizes was correctly reproduced up to that point.

3.8 Conclusion

The Eulerian multi-fluid model for the description of vaporizing polydisperse sprays has been validated by comparing numerical simulations and experimental measurements. We have introduced an optimal numerical description of the distribution tail of the droplet size distribution. The tail is shown, through both numerical simulations and experimental measurements, to be exponentially decreasing as a function of surface and self-preserving throughout the flame. The Eulerian multi-fluid model is then especially well-suited in order to describe correctly, as least in the context of laminar diffusion flames, the vaporization, dynamics and heating of the spray and thus the spray flame structure with only a few degrees of freedom and thus, a very limited cost. As a result, it is a useful tool to treat effects of size distribution at a manageable

cost, which suggests its suitability for multi-dimensional cases, where computational costs are of primary concern, without sacrificing an accurate treatment of the size distribution effects.

3.9 Acknowledgements

The support of NATO through a Collaborative Research Grant (CRG 972212, Project Coordinator : M. Massot) and of CNRS through a Young Investigator Grant (M. Massot and V. Volpert) is gratefully acknowledged. The support of NSF (Grant No. CTS-9904296) is also acknowledged. The authors wish to thank Professor Jerry M. Seitzman, Georgia Institute of Technology, for some insightful comments on [MKGS98] which, in part, prompted this investigation.

Bibliography

- [AOB89] A.A. Amsden, P. J. O'Rourke, and T. D. Butler. Kiva II, a computer program for chemically reactive flows with sprays. Technical Report LA-11560-MS, Report Los Alamos National Laboratory, Los Alamos, New Mexico, 1989.
- [AS89] B. Abramzon and W.A. Sirignano. Droplet vaporization model for spray combustion calculations. *Int. J. Heat Mass Transfer*, 32:1605–1618, 1989.
- [CS90] G. Continillo and W. A. Sirignano. Counterflow spray combustion modeling. *Combustion and Flame*, 81:325–340, 1990.
- [CSS77] C. T. Crowe, M. P. Sharma, and D. E. Stock. The particle-source-in cell (psi-cell) model for gas-droplet flows. *J. Fluids Eng.*, pages 325–332, 1977.
- [Deu74] P. Deuffhard. A modified Newton method for the solution of ill-conditioned systems of nonlinear equations with application to multiple shooting. *Numer. Math.*, 22:289–315, 1974.
- [DG88] N. Darabiha and V. Giovangigli. Vector computers and complex chemistry combustion. *Mathematical Modeling in Combustion and Related Topics*, pages 491–503, 1988.
- [DS97] K. Domelevo and L. Sainsaulieu. A numerical method for the computation of the dispersion of a cloud of particles by a turbulent gas flow field. *J. Comput. Phys.*, 133(2):256–278, 1997.
- [Duk80] John K. Dukowicz. A particle-fluid numerical model for liquid sprays. *J. Comput. Phys.*, 35(2):229–253, 1980.
- [GAT86] J.B. Greenberg, D. Albagli, and Y. Tambour. An opposed jet quasi-monodisperse spray diffusion flame. *Combust. Sci. Technol.*, 50:255–270, 1986.
- [GB78] H. C. Gupta and F. V. Bracco. Numerical computations of two-dimensional unsteady sprays for applications to engines. *AIAA Journal*, 16(10):1053–1061, 1978.
- [GDS⁺96] L. P. Gao, Y. D'Angelo, I. Silverman, A. Gomez, and M. D. Smooke. Quantitative comparison of detailed numerical computations and experiments in counterflow spray diffusion flames. In *Proceedings of the 26th Symp. (International) on Combustion, The Comb. Institute*, pages 1739–1746, 1996.
- [Gio99] Vincent Giovangigli. *Multicomponent flow modeling*. Birkhäuser Boston Inc., Boston, MA, 1999.

- [GM98] Vincent Giovangigli and Marc Massot. Asymptotic stability of equilibrium states for multi-component reactive flows. *Math. Models Methods Appl. Sci.*, 8(2):251–297, 1998.
- [GST93] J.B. Greenberg, I. Silverman, and Y. Tambour. On the origin of spray sectional conservation equations. *Combustion and Flame*, 93:90–96, 1993.
- [Hin83] Alan C. Hindmarsh. ODEPACK, a systematized collection of ODE solvers. In *Scientific computing (Montreal, Que., 1982)*, pages 55–64. IMACS, New Brunswick, NJ, 1983.
- [HMD97] T. J. Held, A. J. Marchese, and F. L. Dryer. A semi-empirical reaction mechanism for n-heptane oxidation and pyrolysis. *Comb. Sci. and Tech.*, 123:107–146, 1997.
- [HW78] L. C. Hasselman and C. K. Westbrook. A theoretical model for fuel injection in stratified charge engines. *SAE paper 780138*, 1978.
- [Hyl99] J. Hylkema. *Modélisation cinétique et simulation numérique d'un brouillard dense de gouttelettes. Application aux propulseurs à poudre*. PhD thesis, ENSAE, 1999.
- [Lau02] Frédérique Laurent. Analyse numérique d'une méthode multi-fluide Eulérienne pour la description de sprays qui s'évaporent. *C. R. Math. Acad. Sci. Paris*, 334(5):417–422, 2002.
- [LLW93] S. C. Li, P. A. Libby, and F. A. Williams. Spray structure in counterflowing streams with and without a flame. *Combustion and Flame*, 94:161–177, 1993.
- [LM01] Frédérique Laurent and Marc Massot. Multi-fluid modeling of laminar poly-dispersed spray flames: origin, assumptions and comparison of the sectional and sampling methods. *Combust. Theory and Modelling*, 5:537–572, 2001.
- [LMV01] F. Laurent, M. Massot, and P. Villedieu. Eulerian multi-fluid modeling for the numerical simulation of polydisperse dense liquid spray. prépublication, soumis, MAPLY, UMR 5585 Lyon, 2001. (<http://maply.univ-lyon1.fr/publis/publiv/2001/335/publi.ps.gz>).
- [MKGS98] M. Massot, M. Kumar, A. Gomez, and M. D. Smooke. Counterflow spray diffusion flames of heptane: computations and experiments. In *Proceedings of the 27th Symp. (International) on Combustion, The Comb. Institute*, pages 1975–1983, 1998.
- [MV01] Marc Massot and Philippe Villedieu. Modélisation multi-fluide eulérienne pour la simulation de brouillards denses polydispersés. *C. R. Acad. Sci. Paris Sér. I Math.*, 332(9):869–874, 2001.
- [O'R81] P. J. O'Rourke. *Collective drop effects on vaporizing liquid sprays*. PhD thesis, Los Alamos National Laboratory 87545, University of Princeton, 1981.
- [RS95] Pierre-Arnaud Raviart and Lionel Sainsaulieu. A nonconservative hyperbolic system modeling spray dynamics. I. Solution of the Riemann problem. *Math. Models Methods Appl. Sci.*, 5(3):297–333, 1995.
- [SCSG90] M. D. Smooke, J. Crump, K. Seshadri, and V. Giovangigli. Comparison between experimental measurements and numerical calculations of the structure of counterflow, diluted, methane-air, premixed flames. In *Proceedings of the 23rd Symp. (International) on Combustion, The Comb. Institute*, pages 503–511, 1990.

- [THA76] J. R. Travis, F. H. Harlow, and A. A. Amsden. Numerical calculations of two-phase flows. *Nucl. Sci. Eng.*, 61:1–10, 1976.
- [VH97] Philippe Villedieu and Jouke Hylkema. Une méthode particulière aléatoire reposant sur une équation cinétique pour la simulation numérique des sprays denses de gouttelettes liquides. *C. R. Acad. Sci. Paris Sér. I Math.*, 325(3):323–328, 1997.
- [Wil58] F.A. Williams. Spray combustion and atomization. *Phys. Fluids*, 1:541–545, 1958.
- [Wil85] F.A. Williams. *Combustion Theory (Combustion Science and Engineering Series)*. ed F A Williams (Reading, MA: Addison-Wesley), 1985.
- [WMR01] D. L. Wright, R. McGraw, and D. E. Rosner. Bivariate extension of the quadrature method of moments for modeling simultaneous coagulation and sintering of particle populations. *J. of Colloid and Interface Sci.*, 236:242–251, 2001.
- [YC73] M. C. Yuen and L. W. Chen. On drag of evaporating liquid droplets. *Combustion Science and Technology*, 14:147–154, 1973.

Chapter 4

Eulerian multi-fluid modeling for the numerical simulation of coalescence in polydisperse dense liquid sprays

Article accepté, sous réserve de modifications, dans J. Comput. Phys. et fait l'objet du rapport interne MAPLY no 335:

F. LAURENT, M. MASSOT, P. VILLEDIEU, *Eulerian multi-fluid modeling for the numerical simulation of polydisperse dense liquid spray*, prépublication MAPLY, UMR 5585 Lyon (2001)
(<http://maply.univ-lyon1.fr/publis/publiv/2001/publis.html>)

Abstract. *In this paper, we present a Eulerian multi-fluid modeling of polydisperse dense sprays of vaporizing liquid droplets which is able to describe droplet coalescence, an uncommon feature of Eulerian models. It can be considered as an important extension of the original sectional method introduced by Tambour et al., based on the rigorous derivation from the kinetic level achieved by Laurent and Massot. This Eulerian multi-fluid model is derived from the kinetic equation (pdf equation) governing the evolution of the spray in two step. The first step consists in integrating the kinetic equation with respect to the droplet velocity variable and in keeping the droplet size as a variable. At each given droplet size, we thus obtain a set of two equations for the mean density and mean velocity. This is referred to as the semi-kinetic model. In a second step, we choose a partition of the size phase space in $N + 1$ fixed intervals, the sections, and use a finite volume formulation which is related to an average of the semi-kinetic model in a section. We obtain a set of $2(N + 1)$ conservation equations for the $N + 1$ “fluids” with quadratic terms describing the coalescence phenomenon, the coefficients of which, the collisional integrals, can be pre-calculated. The numerical methods are then presented for both the resolution of the conservation equations and the pre-evaluation of the vaporizing coefficients and of the collisional integrals. We then validate this Eulerian model by performing several comparisons to a classical Lagrangian model which involves a stochastic algorithm in order to treat the coalescence phenomenon. The chosen configuration is a self-similar 2D axisymmetrical decelerating nozzle with monomodal and bimodal polydisperse vaporizing sprays. We show that the Eulerian model, if the number of sections is large enough, is able to reproduce very accurately the coupling of vaporization, dynamics and coalescence. Moreover, it can still reproduce the global features of the behavior of the spray with a very limited number of unknowns; it is then proved to be a robust candidate with limited computational cost for more complex configurations.*

4.1 Introduction

In a lot of industrial combustion applications such as Diesel engines, fuel is stocked in condensed form and burned as a dispersed liquid phase carried by a gaseous flow. Two phase effects as well as the polydisperse character of the droplet distribution in sizes can significantly influence flame structures, even in the case of relatively thin sprays [MKGS98]. They then have to be modeled.

Spray models (where a spray is understood as a dispersed phase of liquid droplets, i.e. where the liquid volume fraction is much smaller than one) have a common basis at what can be called “the kinetic level” under the form of a probability density function (p.d.f. or distribution function) satisfying a Boltzmann type equation, the so-called Williams equation [Wil58] [Wil85]. The variables characterizing one droplet are the size, the velocity and the temperature, so that the phase space involved is usually of twice the space dimension plus two. Such a transport equation describes the evolution of the distribution function of the spray due to vaporization, to the drag force of the gaseous phase, to the heating of the droplets by the gas and finally to the droplet-droplet interactions (such as coalescence) and fragmentation phenomena [Duk80] [O’R81] [AOB89] [RS95] [DS97] [Hy199]. The spray transport equation is then coupled to the gas phase equations. The two-way coupling of the phases occurs first in the spray transport equations through the rate of vaporization, drag force and heating rate, which are functions of the gas phase variables and second through exchange terms in the gas phase equations.

There are the several strategies in order to solve the liquid phase. One first choice is then to approximate the p.d.f. by a sample of discrete numerical parcels of particles of various sizes through a Lagrangian–Monte-Carlo approach [Duk80] [O’R81] [AOB89] [Hy199] [RHSK00]. This approach has been widely used and has been shown to be efficient except that it couples a Eulerian description for the gaseous phase to a Lagrangian description of the dispersed phase, thus offering limited possibilities of vectorization/parallelization and implicitation. Moreover for unsteady computations, a large number of parcels in each cell of the computational domain is generally needed, thus yielding large memory requirement and CPU cost. At the other end of the spectrum, Eulerian models usually rely on the approximation that the spray is mono-dispersed in order to reduce the cost of fully Lagrangian models [RS95], a generally too severe assumption in most applications. In between the two are the semi-fluid methods based on velocity moment closure of the probability density function at sampled sizes [DS97]. However, one of the main drawback of most of the existing Eulerian models is the impossibility to treat droplet-droplet interactions because only a finite number of sizes are present in the problem.

A first attempt at deriving a fully Eulerian model for sprays polydisperse in size, was developed by Tambour et al. [GST93]; the idea was to consider the dispersed phase as a set of continuous media : “fluids”, each “fluid” corresponding to a statistical average between two fixed droplet sizes, the section; the fluids were then described by the associated conservation equations. Greenberg et al. noticed in [GST93] that such a model has also its origin at the kinetic level making the link with the Williams spray equation [Wil58]. However, they only provided a partial justification, the complete derivation of the sectional “multi-fluid” equations for the conservation of mass and number of droplets, the momentum and energy equations being out of the scope of their paper; besides, the rigorous set of underlying assumptions at the kinetic level was not provided. Finally, their coalescence model did not take into account the relative velocity of colliding particles, thus making the model only suited for very small particles like soots. A comprehensive derivation of the sectional approach was then provided by Laurent and Massot [LM01] for dilute sprays, thus yielding a rigorous “kinetic” framework, as well as a comparison between Eulerian and Lagrangian

modeling. The assumptions underlying the model were validated with experimental measurements on the test case of laminar spray diffusion flames [LSN⁺02]. The principle of such methods can be situated in between moment equation methods which do not lead to sufficient precision and Eulerian full spray equations methods [GB78] [HW78] for which the computational cost and memory storage are prohibitive [O'R81]. The dimension of the phase space which is discretized using a classical Eulerian scheme is then limited to the space dimension plus one (for size, with a limited discretization of this size phase space), a situation where a deterministic approach is usually competitive with a Monte-Carlo stochastic one.

In this paper, relying on [LM01] for the multi-fluid approach analysis and on [VH97] [HV98] for coalescence phenomena modeling, we extend the sectional approach to dense sprays where coalescence is present, in the simplified framework where the temperature of the droplets is not taken into account. This extension could seem impossible since one of the fundamental assumptions of the Eulerian multi-fluid models is the existence of a single velocity at a given location and droplet size, so that, even if the whole droplet sizes range is covered, the phase space is restricted to a one dimensional sub-manifold at each space location. The first step is then to consider Gaussian velocity distributions at a given droplet size with a uniform dispersion. We then derive a semi-kinetic model on the moments of the distribution with a continuous size variable as the limit of zero velocity dispersion. The semi-kinetic model is then averaged in fixed size intervals called the sections in order to only treat a finite number of size variables. We obtain a set of conservation equations on the mass and momentum of the spray for each section with quadratic terms describing the coalescence phenomenon [MV01]. We finally describe the numerical method where the collisional integrals for both appearance and disappearance can be pre-calculated in the set of conservation equations for mass and momentum.

The next step is to validate this model by comparing it to a classical Lagrangian description on the test case of a decelerating self-similar 2D axisymmetrical nozzle. The deceleration generates a velocity difference between droplets of various sizes and then coalescence takes place. The temperature of the gas is taken high enough in order to couple the vaporization process to the coalescence one. We consider two types of size distribution function, the first one is monomodal, really polydisperse in size around a mean value and covers a large spectrum of radii from 0 to 40 micrometers. It is close to what can be found in some combustion applications [LSN⁺02]. The second one is bimodal, with two very different characteristic sizes; it is typical of the alumina particles in booster applications [Hyl99]. The Lagrangian solver uses an efficient and already validated stochastic algorithm for the description of droplet coalescence [HV98]; it allows us to obtain a reference solution for both sprays. We validate the Eulerian multi-fluid model by showing the perfect correspondence with the reference solution when the size phase space is finely discretized. It is also shown that the behavior of the spray is correctly captured even if a very limited number of "fluids" is used for the Eulerian model. This proves the robustness and low computational cost of this new model and makes it a good candidate for more complex applications, all the more since its implicitation, vectorization or paralelization do not lead to any difficulty compared to Eulerian-Lagrangian methods. The validation of the method in multi-dimensional configurations is the topic of our current work.

The paper is organized as follows. We present in a second section a simplified version of the modeling of the spray at the kinetic level, the purpose of the paper being the clear introduction to a new numerical treatment of sprays. The third section is devoted to the exposition of the new Eulerian multi-fluid model. Only the expressions of the intermediate semi-kinetic model and of the final set of conservation equations are provided, the detailed proofs and technical details being presented in Appendix I and II. The numerical methods are given in a fourth section, with a special emphasis on the automatic pre-calculation of the

collisional integrals. The validation of the new multi-fluid model is conducted in section five, where the nozzle configuration is introduced, the reference Lagrangian solver described and the numerical results presented. The sixth section is devoted to the discussion and perspectives of this Eulerian multi-fluid model.

4.2 Modeling of the spray at the kinetic level

In this section, we present a simplified model for the description at the kinetic level of a dense polydisperse vaporizing spray where coalescence phenomena are taking place.

4.2.1 Williams transport equation

Let us define the distribution function f^ϕ of the spray, where $f^\phi(t, x, \phi, u, T) dx d\phi du dT$ denotes the averaged number of droplets (in a statistical sense), at time t , in a volume of size dx around x , with a velocity in a du -neighborhood of u , with a temperature in a dT -neighborhood of T and with a size in a $d\phi$ -neighborhood of ϕ . The droplets are considered to be spherical and characterized by $\phi = aR^\alpha$, where R is the radius of the droplet; ϕ can be the radius ($a = 1$ and $\alpha = 1$; $\phi = R$), the surface, ($a = 4\pi$ and $\alpha = 2$; $\phi = S$) or the volume ($a = \frac{4}{3}\pi$ and $\alpha = 3$; $\phi = v$). We will work with the volume in the following, f^V will be noted f . For the sake of simplicity and for the purpose of this paper, we are going to consider that the vaporization process is described by a d^2 law without convective corrections, that the drag force is given by a Stokes law, and finally that the nonstationary heating of the droplets does not need to be modeled so that the vaporization law coefficient does not depend on the heating status of the droplet. We refer to [Hyl99] [LM01] and [LSN⁺02] for more detailed droplets models. The evolution of the spray is then described by the Williams transport equation [Wil58]:

$$\partial_t f + \partial_x \cdot (u f) + \partial_v (R_v f) + \partial_u \cdot (F f) = \Gamma, \quad (4.1)$$

where R_v denoted the d^2 law vaporization rate, F the Stokes drag force due to the velocity difference with the gaseous phase, and Γ the collision operator leading to coalescence. These quantities have the following dependence (t, x, u, v) except for Γ for which it is (t, x, u, v, f) ; they all depend on the local gas composition, velocity and temperature and this dependence is implicitly written in the (t, x) dependence. The coalescence model will be described in the next sub-section.

4.2.2 Coalescence operator

The kinetic model for the collision operator leading to coalescence is taken from [VH97] and we neglect the influence of the impact parameter on the probability of rebound of two collisional partners. We then assume :

[Co1] We only take into account binary collisions (small volume fraction of the liquid phase).

[Co2] The mean collision time is very small compared to the intercollision time.

[Co3] Every collision leads to coalescence of the partners.

[Co4] During coalescence, mass and momentum are conserved.

Thus $\Gamma = Q_{\text{coll}}^- + Q_{\text{coll}}^+$, where Q_{coll}^- and Q_{coll}^+ respectively correspond to the creation and destruction of droplets due to coalescence. They read [Hyl99] [VH97] :

$$Q_{\text{coll}}^- = - \int_{v^*} \int_{u^*} f(t, x, v, u) f(t, x, v^*, u^*) B(|u - u^*|, v, v^*) dv^* du^*, \quad (4.2)$$

$$Q_{\text{coll}}^+ = \frac{1}{2} \int_{v^* \in [0, v]} \int_{u^*} f(t, x, v^\diamond(v, v^*), u^\diamond(v, v^*, u)) f(t, x, v^*, u^*) B(|u^\diamond - u^*|, v^\diamond, v^*) J dv^* du^*, \quad (4.3)$$

$$B(|u - u^*|, v, v^*) = \beta(v, v^*) |u - u^*|, \quad \beta(v, v^*) = \pi \left(\left(\frac{3v}{4\pi} \right)^{1/3} + \left(\frac{3v^*}{4\pi} \right)^{1/3} \right)^2, \quad u^\diamond = \frac{vu - v^*u^*}{v - v^*}, \quad (4.4)$$

where v^\diamond and u^\diamond are the pre-collisional parameters, $v^\diamond(v, v^*) = v - v^*$ and J is the Jacobian of the transform $(v, u) \rightarrow (v^\diamond, u^\diamond)$, at fixed (v^*, u^*) : $J = (v/v^\diamond)^K$, with K the dimension of the velocity phase space.

Remark 1 The assumption that all collisions lead to the coalescence of the partners is not realistic, especially if the colliding droplets have comparable sizes [BSJL72] [AP90]. In such situations the probability E_{coal} , that coalescence really occurs from the collision of two droplets has to be taken into account; the expression of B then becomes :

$$B(|u - u^*|, v, v^*) = E_{\text{coal}}(|u - u^*|, v, v^*) \beta(v, v^*) |u - u^*|.$$

The simplest model, originally obtained for water droplets, was proposed by Brazier-Smith et al. [BSJL72] and reads :

$$E_{\text{coal}}(|u - u^*|, v, v^*) = \text{Min} \left(1, \frac{\mathcal{F}(v, v^*)}{|u - u^*|^2} \right),$$

where the expression of \mathcal{F} can be found in [BSJL72]. Consequently, the expression of E_{coal} is not well-suited for the derivation of our Eulerian multi-fluid model from the kinetic level of description. It is necessary to obtain an approximation of E_{coal} under the form :

$$\tilde{E}_{\text{coal}}(|u - u^*|, v, v^*) = \sum_{k=0}^n \alpha_k (|u - u^*|) \beta_k(v, v^*), \quad (4.5)$$

with a well-chosen set of functions $(\alpha_k, \beta_k)_{k \in [1, n]}$. A possible choice which leads to easy computations, is to use a polynomial development :

$$\tilde{E}_{\text{coal}}(|u - u^*|, v, v^*) = \sum_{k=0}^n |u - u^*|^k \beta_k(v, v^*),$$

and to determine the functions $(\beta_k)_{k \in [1, n]}$ by minimizing the the quadratic functional

$$\mathcal{L}(\beta_1, \dots, \beta_n) = \int_0^{U_{\text{max}}} \left[\sum_{k=0}^n \beta_k(v, v^*) W^k - \tilde{E}_{\text{coal}}(W, v, v^*) \right]^2 dW,$$

where U_{max} is an estimate of the maximum relative velocity between two droplets; it has to be noticed that the integral in the previous equation can be explicitly calculated, given an expression for \mathcal{F} .

Since a statistical description of the spray is needed, and since $\mathcal{F}(v, v^*)$ rapidly becomes bigger than one as the size difference of the coalescence partners increases, a very high degree of precision can be reached with a limited degree of the considered polynomial (4.5).

Nevertheless, in the following, for the sake of simplicity, we will assume

$$E_{\text{coal}}(|u - u^*|, v, v^*) = 1,$$

which is equivalent to assumption [Co3].

4.3 Eulerian Multi-fluid Model

In order to obtain the set of conservation equations for the proposed Eulerian multi-fluid model, we proceed in two steps. Firstly, because we focus on the polydispersion in size of the spray, we do not want to describe the dispersion in velocity and derive a semi-kinetic model for the two variables $n(t, x, \phi) = \int \int f^\phi \, du_l \, dT_l$ and $\bar{u}(t, x, \phi) = \int \int f^\phi u_l \, du_l \, dT_l / n(t, x, \phi)$. However, the set of equations are only closed under precise assumptions on the distribution function f^ϕ , first emphasized in [LM01], which are not directly compatible with the coalescence phenomena. We then have to obtain the semi-kinetic model as a limit of a more general problem. At this level, we still describe a continuous and unbounded size phase space for the spray. We then invoke the usual “sectional approach” assumption in order to limit ourselves to only a finite number of degrees of freedom for the description of the polydisperse character of the spray. The expression of the collisional integrals are given. It is worth noticing that we do take into account the mean velocity difference of the droplets in the coalescence process as opposed to the model proposed in [GST93] which is mainly suited for very small particles such as soots.

4.3.1 Semi-kinetic model

Out of the assumptions related to the sectional approach, it was shown in [LM01] that the velocity dispersion of the distribution function at a given droplet size has to be zero. It is clear that this assumption is not compatible with the coalescence phenomenon, since there is no reason for a droplet created by the coalescence of two droplets of various sizes to exactly have the velocity corresponding to its new size. Besides, it is fundamental that the support of the distributions in size and velocities is really the whole space $(v, u) \in (0, +\infty) \times \mathbb{R}^K$ so that all the collisions can be described by the model. Therefore, we cope with this difficulty in the following proposition and obtain the final semi-kinetic model in the limit of zero dispersion of gaussian velocity distributions (the detail of the proof is given in Appendix I).

Proposition 4.1 *Let us make the following assumptions on the spray distribution function:*

- [H1] *For a given droplet size, at a given point (t, x) , there is only one characteristic averaged velocity $\bar{u}(t, x, v)$.*
- [H2] *The velocity dispersion around the averaged velocity $\bar{u}(t, x, v)$ is reduced to zero in each direction, whatever the point (t, x, v) .*
- [H3] *The droplet number density $n(t, x, v)$ is exponentially decreasing at infinity as a function of v uniformly in (t, x) .*

The semi-kinetic model is then given by two partial differential equations in the variables $n(t, x, v)$ and $\bar{u}(t, x, v)$:

$$\begin{aligned} \partial_t n + \partial_x (n\bar{u}) + \partial_v (nR_v) = -n(v) \int_{v^* \in [0, +\infty)} n(v^*) \beta(v, v^*) I_n^- dv^* \\ + \frac{1}{2} \int_{v^* \in [0, v]} n(v^\diamond(v, v^*)) n(v^*) \beta(v^\diamond(v, v^*), v^*) I_n^+ dv^* \end{aligned} \quad (4.6)$$

$$\begin{aligned} \partial_t (n\bar{u}) + \partial_x (n\bar{u} \otimes \bar{u}) + \partial_v (nR_v \bar{u}) - n\bar{F} = -n(v) \int_{v^* \in [0, +\infty)} n(v^*) \beta(v, v^*) I_u^- dv^* \\ + \frac{1}{2} \int_{v^* \in [0, v]} n(v^\diamond(v, v^*)) n(v) \beta(v^\diamond(v, v^*), v^*) I_u^+ dv^* \end{aligned} \quad (4.7)$$

where \bar{F} is the Stokes's drag force taken at $u = \bar{u}$, where $R_v = R_v(t, x, v)$ and where the partial collisional integrals I_n^- , I_n^+ , I_u^- and I_u^+ are functions of (t, x, v, v^*) and take the following expressions :

$$I_n^- = |\bar{u}(v) - \bar{u}(v^*)|, \quad I_u^- = \bar{u}(v) |\bar{u}(v) - \bar{u}(v^*)|, \quad (4.8)$$

$$I_n^+ = |\bar{u}(v^*) - \bar{u}(v - v^*)|, \quad I_u^+ = ((v - v^*)\bar{u}(v - v^*) + v^*\bar{u}(v^*)) |\bar{u}(v^*) - \bar{u}(v - v^*)|. \quad (4.9)$$

Equations (4.6) and (4.7) express respectively, the conservation of the number density of droplets and their momentum, at a given location x and for a given size v .

4.3.2 Eulerian multi-fluid model

The sectional model, introduced by Tambour and al. (See [GST93] and references therein), is based on the reduction of a continuous semi-kinetic equation as a function of size, such as (4.6-4.7), to a finite number of degrees of freedom. This reduction is performed by averaging, in fixed size intervals : the sections (the j^{th} section being defined by $\phi^{(j-1)} \leq \phi < \phi^{(j)}$), of the semi-kinetic model. As a fundamental assumption, the form of n as a function of the geometry is supposed to be independent of t and x in a given section. Thus the evolution of the mass concentration of droplets in a section $m^{(j)}$ is decoupled from the repartition in terms of sizes $\kappa^{(j)}(v)$ inside the section [GST93] :

$$n(t, x, v) = m^{(j)}(t, x) \kappa^{(j)}(v), \quad \int_{v^{(j-1)}}^{v^{(j)}} \rho_l v \kappa^{(j)}(v) dv = 1. \quad (4.10)$$

Besides, we make the following assumption on the velocity distribution inside a section :

[H4] In each section, the averaged velocity $\bar{u}(t, x, v)$ does not depend on v , $\bar{u}(t, x, v) = \bar{u}^{(j)}(t, x)$, $v^{(j-1)} \leq v < v^{(j)}$.

The sections have fixed sizes, which is a major difference compared to a sampling method; however, they are not independent from each other, they exchange mass and momentum. The choice of the discretization points $v^{(j)}$, $j \in [1, N]$ has been studied in [LSN⁺02]; consequently we choose the $(N + 1)^{\text{th}}$ section to be $[v^{(N)}, +\infty)$ in order to be able to describe the whole size spectrum. The final model is then obtained in the next proposition.

Proposition 4.2 Assuming [H1]-[H4], we obtain the multi-fluid system of $2(N+1)$ conservation equations :

$$\partial_t m^{(j)} + \partial_x \cdot (m^{(j)} \bar{u}^{(j)}) = - (E_1^{(j)} + E_2^{(j)}) m^{(j)} + E_1^{(j+1)} m^{(j+1)} + C_m^{(j)} \quad (4.11)$$

$$\begin{aligned} \partial_t (m^{(j)} \bar{u}^{(j)}) + \partial_x \left(m^{(j)} \bar{u}^{(j)} \otimes \bar{u}^{(j)} \right) &= - (E_1^{(j)} + E_2^{(j)}) m^{(j)} \bar{u}^{(j)} + E_1^{(j+1)} m^{(j+1)} \bar{u}^{(j+1)} \\ &+ m^{(j)} \bar{F}^{(j)} + C_{\text{mu}}^{(j)} \end{aligned} \quad (4.12)$$

where $E_1^{(j)}$ and $E_2^{(j)}$ are the “classical” pre-calculated vaporization coefficients [GST93] [LM01] :

$$E_1^{(j)} = -\rho_l v^{(j)} R_v(t, x, v^{(j)}) \kappa^{(j)}(v^{(j)}), \quad E_2^{(j)} = - \int_{v^{(j-1)}}^{v^{(j)}} \rho_l R_v(t, x, v) \kappa^{(j)}(v) dv, \quad (4.13)$$

where $\bar{F}^{(j)}$ is the “classical” pre-calculated drag force [GST93] [LM01] :

$$F^{(j)}(t, x) = \int_{v^{(j+1)}}^{v^{(j)}} \rho_l v \bar{F}(t, x, v) \kappa^{(j)}(v) dv,$$

and where the terms associated to the coalescence read, if $V_{jk} = |\bar{u}^{(j)} - \bar{u}^{(k)}|$:

$$C_m^{(j)} = -m^{(j)} \sum_{k=1}^N m^{(k)} V_{jk} Q_{jk} + \sum_{i=1}^{I^{(j)}} m^{(o_{ji}^\diamond)} m^{(o_{ji}^*)} V_{o_{ji}^\diamond, o_{ji}^*} (Q_{ji}^\diamond + Q_{ji}^*), \quad (4.14)$$

$$C_{\text{mu}}^{(j)} = -m^{(j)} \bar{u}^{(j)} \sum_{k=1}^N m^{(k)} V_{jk} Q_{jk} + \sum_{i=1}^{I^{(j)}} m^{(o_{ji}^\diamond)} m^{(o_{ji}^*)} V_{o_{ji}^\diamond, o_{ji}^*} \left(\bar{u}^{(o_{ji}^\diamond)} Q_{ji}^\diamond + \bar{u}^{(o_{ji}^*)} Q_{ji}^* \right). \quad (4.15)$$

The coalescence terms conserve the mass and the momentum :

$$\sum_{j=1}^N C_m^{(j)} = 0, \quad \sum_{j=1}^N C_{\text{mu}}^{(j)} = 0. \quad (4.16)$$

The disappearance integrals Q_{jk} are evaluated on $L_{jk} = [v^{(j-1)}, v^{(j)}] \times [v^{(k-1)}, v^{(k)}]$, whereas the appearance integrals, Q_{ji}^\diamond and Q_{ji}^* , are evaluated on the diagonal strips $D_j^{\diamond*} = \{(v^\diamond, v^*), v^{(j-1)} \leq v^\diamond + v^* \leq v^{(j)}\} / \cup_{k=1}^N L_{kk}$, which are symmetric strips with respect to the axis $v^\diamond = v^*$ (See $D_4^{\diamond*}$ on Fig. 1). These strips $D_j^{\diamond*}$ are divided into domains, denoted by X_{ji} and the symmetric one, X_{ji}^{sym} , where the velocity of the partners is constant. The domains X_{ji} and X_{ji}^{sym} are the intersection of $D_j^{\diamond*}$ with L_{kl} , $k > l$ and L_{kl} , $k < l$ respectively (4.19); their index is noted $i \in [1, I^{(j)}]$ and we define two pointers which indicate the collision partners for coalescence, at fixed i : $o_{ji}^\diamond = k$ and $o_{ji}^* = l$. Finally the expressions of the various collision integrals read :

$$Q_{jk} = \iint_{L_{jk}} \rho_l v \kappa^{(j)}(v) \kappa^{(k)}(v^*) \beta(v, v^*) dv dv^*, \quad Q_{ji}^\diamond = \iint_{X_{ji}} \rho_l v^\diamond \kappa^{(o_{ji}^\diamond)}(v^\diamond) \kappa^{(o_{ji}^*)}(v^*) \beta(v^\diamond, v^*) dv^\diamond dv^*, \quad (4.17)$$

$$Q_{ji}^* = \iint_{X_{ji}} \rho_l v^* \kappa^{(o_{ji}^\diamond)}(v^\diamond) \kappa^{(o_{ji}^*)}(v^*) \beta(v^\diamond, v^*) dv^\diamond dv^* = \iint_{X_{ji}^{\text{sym}}} \rho_l v^\diamond \kappa^{(o_{ji}^*)}(v^\diamond) \kappa^{(o_{ji}^\diamond)}(v^*) \beta(v^\diamond, v^*) dv^\diamond dv^*. \quad (4.18)$$

$$D_j^{\diamond*} = \bigcup_{k=2}^N \bigcup_{l=1}^{k-1} (L_{kl} \cap D_j^{\diamond*}) \cup (L_{lk} \cap D_j^{\diamond*}) = \bigcup_{i=1}^{I^{(j)}} (X_{ji} \cup X_{ji}^{\text{sym}}), \quad X_{ji} = L_{o_{ji}^\diamond, o_{ji}^*} \cap D_j^{\diamond*}. \quad (4.19)$$

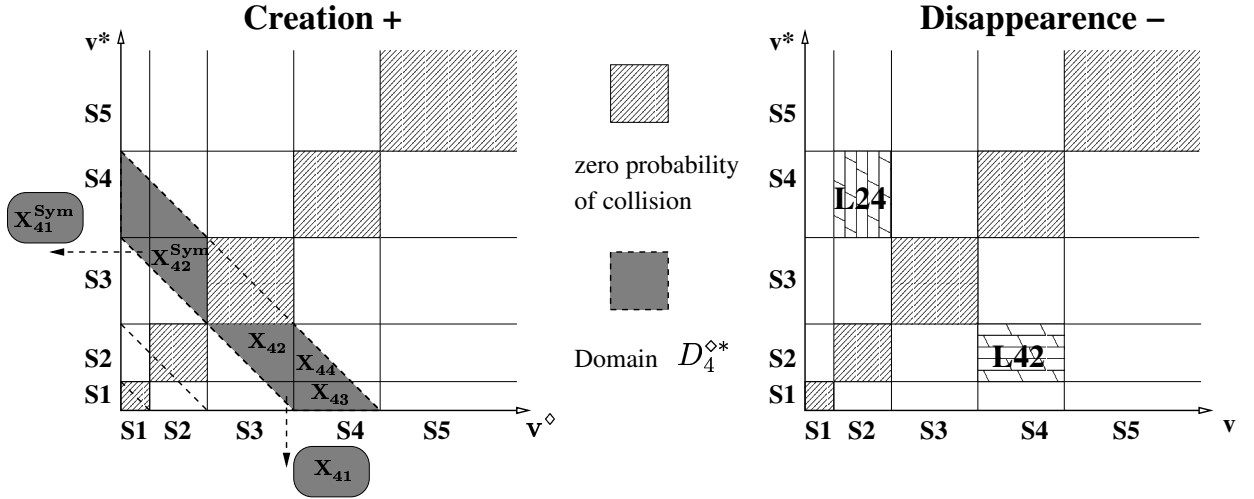


Figure 4.1: Diagram of the integration domains for the evaluation of the pre-calculated collisional integrals.

Finally, the coefficients used in the model, either for the vaporization process or the drag force $E_1^{(j)}$, $E_2^{(j)}$ and $\bar{F}^{(j)}$, $j = [1, N + 1]$ in (4.11-4.12), or for the coalescence : Q_{jk} , $j = [1, N + 1]$, $k = [1, N + 1]$, $k \neq j$, Q_{ji}^{\diamond} , Q_{ji}^* , $j = [2, N + 1]$, $i = [1, I^{(j)}]$ in (4.14-4.15) can be pre-evaluated from the choice of $\kappa^{(j)}$ in each section. The algorithms for the evaluation of this coefficients are provided in the next section.

Once the coefficients are evaluated, equations (4.11-4.12) can be either considered in their conservative form in order to use a finite volume formulation of the problem or in the non-conservative form in order to use the method of characteristic curves with a finite element of finite difference formulation. For the purpose of validating the method, we have chosen to focus on a stationary self-similar 2D axisymmetrical configuration in section 4.5. This configuration is presented in sub-section 4.5.1. In this context, a simple Eulerian solver can be used and it is presented in sub-section 4.5.4.

Remark 2 We did not consider coalescence due to random small velocity differences at the microscopic level. In this case, the link has to be made with, on the one side, the velocity distribution inside the section and on the other side, the local dispersion around the averaged velocity at a given size. The limit case is the one of soot particles where the macroscopic velocity difference is zero and the effective velocity difference is due to thermal dispersion of the gas velocity distribution. It can then be shown that, assuming a velocity distribution at a given size, we retrieve the original formalism of Greenberg et al. [GST93] but this is beyond the scope of this paper.

4.4 Precalculation of the various coefficients

For the sectional approach, the evaluation of the coalescence source terms can be done simply from the values of the constant parameters Q_{jk} , Q_{ji}^{\diamond} and Q_{ji}^* . It is the same as for vaporization and drag. We provide, in this section, a method in order to pre-calculate these constants for a sectional approach with $N+1$ sections $[v^{(i-1)}, v^{(j)}]$, with:

$$0 = v^{(0)} < v^{(1)} < \dots < v^{(N)} < v^{(N+1)} = +\infty.$$

In the following, $R^{(j)}$ and $s^{(j)}$ will respectively denote the radius and the surface corresponding to the volume $v^{(j)}$.

The distribution function is chosen constant as a function of the radius in the sections 1 to N and exponentially decreasing as a function of the surface in the last section. The function $\kappa^{(j)}$, as a function of the radius, the surface or the volume (with $\kappa^{(j)}(R)dR = \kappa^{(j)}(s)ds = \kappa^{(j)}(v)dv$) is then given by, for $j \in \{1, \dots, N\}$

$$\kappa^{(j)}(R) = \alpha_j \quad \kappa^{(j)}(v) = \frac{\alpha_j}{(4\pi)^{1/3}(3v)^{2/3}}, \quad (4.20)$$

and for the last section:

$$\kappa^{(N+1)}(s) = \lambda e^{-\beta(s-s^{(N)})} \quad \kappa^{(N+1)}(R) = \lambda 8\pi R e^{-\beta 4\pi(R^2 - R^{(N)2})}, \quad (4.21)$$

where α_j and λ are such as $\int_{v^{(j-1)}}^{v^{(j)}} \rho_l v \kappa^{(j)}(v) dv = 1$ for $j \in \{1, \dots, N+1\}$. We then have:

$$\alpha_j = \frac{3}{\rho_l \pi (R^{(j)4} - R^{(j-1)4})} \quad \lambda = \frac{6\sqrt{\pi}}{\rho_l} \left(\frac{s^{(N)3/2}}{\beta} + \frac{3\sqrt{s^{(N)}}}{2\beta^2} + \frac{3}{2\beta^{5/2}} J \right)^{-1}, \quad (4.22)$$

where

$$J = e^{\beta s^{(N)}} \int_{\sqrt{\beta s^{(N)}}}^{+\infty} e^{-x^2} dx. \quad (4.23)$$

The coefficients Q_{jk} , Q_{il}° and Q_{il}^* are integrals of the function $g(v, v^*) \kappa^{(j)}(v) \kappa^{(k)}(v^*)$ over different sets, where:

$$g(v, v^*) = \rho_l v \pi \left[\left(\frac{3v}{4\pi} \right)^{1/3} + \left(\frac{3v^*}{4\pi} \right)^{1/3} \right]^2.$$

We will then see how to perform this calculations.

4.4.1 Precalculation of the coalescence collisional integrals : Algorithm

Calculation of the destruction collisional integrals

The Q_{jk} are simply the integral of $g(v, v^*) \kappa^{(j)}(v) \kappa^{(k)}(v^*)$ over $[v^{(j-1)}, v^{(j)}] \times [v^{(k-1)}, v^{(k)}]$. We use the radius variables, easier for the calculations:

$$Q_{jk} = \int_{R^{(j-1)}}^{R^{(j)}} \left\{ \int_{R^{(k-1)}}^{R^{(k)}} \kappa^{(j)}(R) \kappa^{(k)}(R^*) g \left(\frac{4}{3}\pi R^3, \frac{4}{3}\pi (R^*)^3 \right) dR^* \right\} dR. \quad (4.24)$$

This integral depends on the shape of $\kappa^{(j)}$ and $\kappa^{(k)}$. We know that the collision probability between droplets of the same group is zero because they have the same velocity. We then have $Q_{jj} = 0$. For the other terms, the evaluation procedure is different depending if the last section is involved or not.

• **j and k less than N**

In this case, the $\kappa^{(j)}(R)$ and $\kappa^{(k)}(R)$ are the constants α_j and α_k . The evaluation of the collisional integral yields after some algebra :

$$Q_{j,k} = \alpha_j \alpha_k \rho_l \frac{4}{3} \pi^2 \left\{ \frac{R^{(j)6} - R^{(j-1)6}}{6} (R^{(k)} - R^{(k-1)}) + \frac{R^{(j)5} - R^{(j-1)5}}{5} (R^{(k)2} - R^{(k-1)2}) \right. \\ \left. + \left(\frac{R^{(j)4} - R^{(j-1)4}}{4} \right) \left(\frac{R^{(k)3} - R^{(k-1)3}}{3} \right) \right\} \quad (4.25)$$

• **k=N+1 or j=N+1**

In this case, one of the $\kappa^{(j)}$ and $\kappa^{(k)}$ is exponentially decreasing at infinity. Because the function g is not symmetric, we have to calculate the two coefficients. As a function of integral J defined by (4.23), we obtain:

$$Q_{j,N+1} = \alpha_j \rho_l \frac{4\pi^2 \lambda}{3\beta} \left\{ \frac{R^{(j)6} - R^{(j-1)6}}{6} + \frac{R^{(j)4} - R^{(j-1)4}}{4} \left(R^{(N)2} + \frac{1}{4\pi\beta} \right) \right. \\ \left. + \frac{R^{(j)5} - R^{(j-1)5}}{5} \left(2R^{(N)} + \frac{J}{\sqrt{\pi\beta}} \right) \right\} \quad (4.26)$$

$$Q_{N+1,k} = \alpha_k \frac{\rho_l \lambda}{3\beta^3} \left\{ (R^{(j)} - R^{(j-1)}) \left[4\pi^2 \beta^2 R^{(N)5} + \frac{5}{2} \pi \beta R^{(N)3} + \frac{15 R^{(N)}}{16} + \frac{15 J}{32\sqrt{\pi\beta}} \right] \right. \\ (R^{(j)2} - R^{(j-1)2}) \left[4\pi^2 \beta^2 R^{(N)4} + 2\pi \beta R^{(N)2} + \frac{1}{2} \right] \\ \left. + \frac{R^{(j)3} - R^{(j-1)3}}{3} \left[4\pi^2 \beta^2 R^{(N)3} + \frac{3\pi\beta}{2} R^{(N)} + \frac{3\sqrt{\pi\beta}}{4} J \right] \right\} \quad (4.27)$$

We only need to numerically evaluate the integral J . It can be made for example with a Simpson method, the integral $\int_a^{+\infty} e^{-x^2} dx$ being approached by $\int_a^{a+b} e^{-x^2} dx$ with b sufficiently large and then a precision higher than e^{-b^2} .

Calculation of Q_{ji}^\diamond and Q_{ji}^*

It has to be mentioned that we adopt here the opposite point of view as the one presented in section 4.3.1, where we were looking for the set of intersection, for a given section, of the corresponding diagonal strip with all the rectangles where the velocity field is constant. In this paragraph, we consider a given rectangle L_{jk} with $j < k$, because of symmetry, and we will find all the diagonal strips intersecting with it. It will allow us to calculate all the collisional integrals and then to reconstruct the pointers o_{ji}^\diamond and o_{ji}^* .

For each rectangle L_{jk} , we locate the $D_i^{\diamond*}$ which intersects L_{jk} , that is $D_i^{\diamond*}$ for $i \in [i_{\min}, i_{\max} + 1]$ such that i_{\min} is the minimum of $\{i \in \mathbb{N}, v^{(j-1)} + v^{(k-1)} < v_i\}$ and i_{\max} is the maximum of $\{i \in \mathbb{N}, v_i < v^{(j)} + v^{(k)}\}$. We then define $X_{il} = L_{jk} \cap D_i^{\diamond*}$ where $l - 1$ is the number of preceding rectangle which intersects $D_i^{\diamond*}$. We have also the value for the pointers: $o_{il}^\diamond = j$ and $o_{il}^* = k$.

If only one $D_i^{\diamond*}$ intersects L_{jk} ($i_{\min} = i_{\max} + 1$), then $Q_{il}^{\diamond} = Q_{jk}$ and $Q_{il}^* = Q_{kj}$. In the other cases, we obviously have $j \leq N$ and $k \leq N$ so that $\kappa^{(j)}$ and $\kappa^{(k)}$ are given by (4.20). We will also decompose the set in which we have to make the integral in rectangles and triangles (in the volume phase space).

We then have to calculate the integral of $\frac{g(v, v^*)}{(4\pi)^{2/3} 3^{4/3} v^{2/3} (v^*)^{2/3}}$ over three kinds of sets:

- rectangle $[v_1, v_2] \times [v_1^*, v_2^*]$ (this integral is noted $\mathcal{R}(v_1, v_2, v_1^*, v_2^*)$),
- lower isosceles triangles $\{(v, v^*), v_0 \leq v \leq v_0 + \Delta v, v_0^* \leq v^* \leq v_0 + v_0^* + \Delta v - v\}$ (this integral is noted $LT(v_0, v_0^*, \Delta v)$),
- upper isosceles triangles $\{(v, v^*), v_0 - \Delta v \leq v \leq v_0, v_0 + v_0^* - \Delta v - v \leq v^* \leq v_0^*\}$ (this integral is noted $UT(v_0, v_0^*, \Delta v)$).

where we have denoted $Q_{jk} = \alpha_j \alpha_k \mathcal{R}(v^{(j-1)}, v^{(j)}, v^{(k-1)}, v^{(k)})$, where the function \mathcal{R} is given in the previous subsection by (4.17)

LT and UT are given by:

$$\begin{aligned}
 LT(v_0, v_0^*, \Delta v) = & \frac{\rho_i 3^{1/3}}{4^{4/3} \pi^{1/3}} \left\{ \frac{3}{4} v_0 (v_0^* + \Delta v)^{4/3} - \frac{3}{4} (v_0 + \Delta v) (v_0^*)^{4/3} - \frac{9}{28} (v_0^*)^{7/3} + \frac{9}{28} (v_0^* + \Delta v)^{7/3} \right. \\
 & + \frac{1}{2} [(v_0 + \Delta v)^2 - v_0^2] (v_0^*)^{1/3} - \frac{3}{5} [(v_0 + \Delta v)^{5/3} - v_0^{5/3}] (v_0^*)^{2/3} + \frac{3}{28} (v_0 + \Delta v)^{7/3} \\
 & \left. + \frac{1}{4} (v_0 + \Delta v) v_0^{4/3} + \frac{1}{7} v_0^{7/3} + \int_0^{\Delta v} (v + v_0)^{2/3} (v_0^* + \Delta v - v)^{2/3} dv \right\}
 \end{aligned} \tag{4.28}$$

$$\begin{aligned}
 UT(v_0, v_0^*, \Delta v) = & \frac{\rho_i 3^{1/3}}{4^{4/3} \pi^{1/3}} \left\{ \frac{3}{4} v_0 (v_0^* - \Delta v)^{4/3} - \frac{3}{4} (v_0 - \Delta v) (v_0^*)^{4/3} - \frac{9}{28} (v_0^*)^{7/3} + \frac{9}{28} (v_0^* - \Delta v)^{7/3} \right. \\
 & + \frac{1}{2} [v_0^2 - (v_0 - \Delta v)^2] (v_0^*)^{1/3} - \frac{3}{5} [v_0^{5/3} - (v_0 - \Delta v)^{5/3}] (v_0^*)^{2/3} + \frac{3}{28} (v_0 - \Delta v)^{7/3} \\
 & \left. + \frac{1}{4} (v_0 - \Delta v) v_0^{4/3} + \frac{1}{7} v_0^{7/3} - \int_0^{\Delta v} (v + v_0 - \Delta v)^{2/3} (v_0^* - v)^{2/3} dv \right\}
 \end{aligned} \tag{4.29}$$

Only a simple integral have to be numerically calculated for each calculation of LT or UT .

We can then evaluate I_{jk}^i , the integral of $g(v, v^*) \kappa^{(j)}(v) \kappa^{(k)}(v^*)$ over $[v^{(j-1)}, v^{(j)}] \times [v^{(k-1)}, v^{(k)}] \cap \{(v, v^*), v + v^* \leq i\}$. We will then have $Q_{il}^{\diamond} = I_{jk}^i - I_{jk}^{i-1}$, if $I_{jk}^0 = 0$. In the same way, we can define I_{kj}^i and we will have: $Q_{il}^* = I_{kj}^i - I_{kj}^{i-1}$.

We can remark that $I_{jk}^{i_{\max}+1} = Q_{jk}$. In order to calculate the I_{jk}^i for $i \in [i_{\min}, i_{\max}]$, we distinguish areas bordered by the lines $v + v^* = a$, $v + v^* = b$ and the boundaries of the rectangle, where $a = v^{(j-1)} + v^{(k)}$ and $b = v^{(j)} + v^{(k-1)}$ (see Figure 2). Four cases have to be considered, according to the position of the line $v + v^* = v_i$ with respect to the areas 1, 2, 2' or 3:

- if $v_i \leq a$ and $v_i \leq b$ (area 1) then $I_{jk}^i = \alpha_j \alpha_k LT(v^{(j-1)}, v^{(k-1)}, v_i - v^{(j-1)} - v^{(k-1)})$,

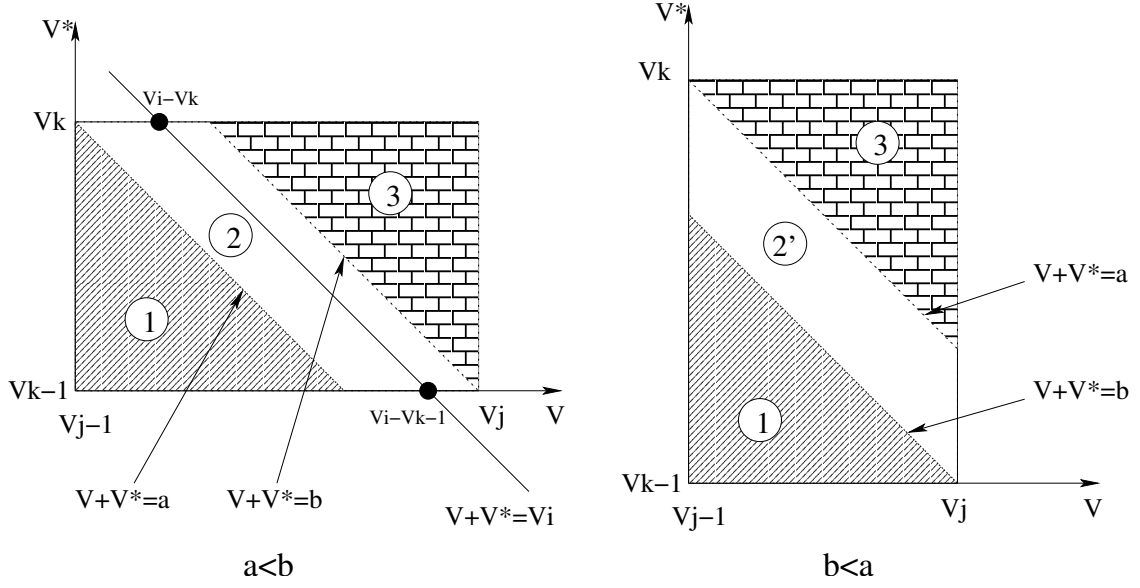


Figure 4.2: Various intersection possibilities of diagonal strips and rectangles.

- if $a < v_i < b$ (area 2, example in Figure 2) then $I_{jk}^i = \alpha_j \alpha_k \{ R(v^{(j-1)}, v_i - v^{(k)}, v^{(k-1)}, v^{(k)}) + LT(v_i - v^{(k)}, v^{(k-1)}, v^{(k)} - v^{(k-1)}) \}$
- if $b < v_i < a$ (area 2', example in Figure 2) then $I_{jk}^i = \alpha_j \alpha_k \{ R(v^{(j-1)}, v^{(j)}, v^{(k-1)}, v_i - v^{(j)}) + LT(v^{(j-1)}, v_i - v^{(j)}, v^{(j)} - v^{(j-1)}) \}$
- if $v_i \geq a$ and $v_i \geq b$ (area 3) then $I_{jk}^i = Q_{j,k} - \alpha_j \alpha_k UT(v^{(j)}, v^{(k)}, v^{(j)} + v^{(k)} - v_i)$

I_{kj}^i is given by the same formulae by changing j and k , in the four cases.

So far, we have obtained the values of Q_{jk} , Q_{il}° and Q_{il}^* and of the pointers $o_{il}^\circ = j$ and $o_{il}^* = k$.

4.4.2 Precalculation of the vaporization coefficients and mean drag

Calculation of the vaporization coefficients

In the context of the chosen configuration defined by equation (4.20), we get the following expressions for the vaporization coefficients $E_1^{(j)}$ and $E_2^{(j)}$, $j \leq N$:

$$E_1^{(j)} = -\rho_l v^{(j)} \kappa^{(j)}(t, x, v^{(j)}) R_v(t, x, v^{(j)}) = -\frac{1}{\pi} \frac{R^{(j)}}{R^{(j+1)^4} - R^{(j)^4}} R_v(t, x, v^{(j)}), \quad (4.30)$$

$$E_2^{(j)} = -\rho_l \int_{v^{(j)}}^{v^{(j+1)}} \kappa^{(j)}(t, x, v) R_v(t, x, v) dv = -\frac{3}{\pi} \frac{R^{(j+1)} - R^{(j)}}{R^{(j+1)^4} - R^{(j)^4}} R_v(t, x, v_{moy}^{(j)}), \quad (4.31)$$

where the mean vaporization volume is given by :

$$v_{moy}^{(j)} = \frac{4}{3} \pi R_{moy}^{(j)3}, \quad R_{moy}^{(j)} = \frac{R^{(j+1)} + R^{(j)}}{2}, \quad (4.32)$$

since R_v is proportional to the radius with the use of the d^2 law. For the last section, where $\kappa^{(N+1)}(s) = \lambda e^{-\beta(s-s^{(N)})}$, we obtain :

$$E_1^{(j)} = -\frac{4\sqrt{\pi}s^{(N)}}{\frac{s^{(N)3/2}}{\beta} + \frac{3\sqrt{s^{(N)}}}{2\beta^2} + \frac{3}{2}\frac{J}{\beta^{5/2}}} R_v(t, x, v^{(N)}), \quad (4.33)$$

$$E_2^{(j)} = -\frac{6\sqrt{\pi}}{s^{(N)3/2} + \frac{3\sqrt{s^{(N)}}}{2\beta} + \frac{3}{2}\frac{J}{\beta^{3/2}}} R_v(t, x, v_{moy}^{(N+1)}), \quad (4.34)$$

where J has been defined by equation (4.23) and where the mean vaporization volume reads :

$$v_{moy}^{(N+1)} = \frac{4}{3}\pi R_{moy}^{(N+1)3}, \quad R_{moy}^{(N+1)} = R^{(N)} + \frac{J}{2\sqrt{\pi}\beta}. \quad (4.35)$$

Calculation of the mean drag

The expression of the mean drag force in the j^{th} section is given by :

$$F^{(j)} = \int_{v^{(j)}}^{v^{(j+1)}} \rho_l v \overline{F}(t, x, v) \kappa^{(j)}(v) dv = \overline{F}(t, x, v_u^{(j)}), \quad (4.36)$$

where the mean drag volume $v_u^{(j)}$, $j \leq N$, reads :

$$v_u^{(j)} = \frac{4}{3}\pi R_u^{(j)3}, \quad R_u^{(j)} = \sqrt{\frac{(R^{(j+1)})^2 + (R^{(j)})^2}{2}}, \quad (4.37)$$

since the Stokes drag coefficient is proportional to the inverse of the radius to the square. For the last section, we obtain :

$$v_u^{(N+1)} = \frac{4}{3}\pi R_u^{(N+1)3}, \quad R_u^{(N+1)2} = \frac{R^{(N)3} + \frac{3R^{(N)}}{8\pi\beta} + \frac{3J}{16\pi^{3/2}\beta^{3/2}}}{R^{(N)} + \frac{J}{2\sqrt{\pi}\beta}}. \quad (4.38)$$

The Eulerian multi-fluid conservation equations governing the spray can then be resolved.

4.5 Validation through a reference Lagrangian solver: the nozzle test-case

This section is devoted to a representative test-case : a decelerating self-similar 2D axisymmetrical nozzle. The details of the configuration and of the characteristics parameters of two injected sprays are provided in the first subsection. The solvers for both the Lagrangian reference solution and the Eulerian multi-fluid method are then presented as well as the information of the various parameters involved with both methods.

The results obtained for various levels of refinement with the Eulerian multi-fluid method are finally compared to the reference Lagrangian solution for the two sprays.

4.5.1 Definition of configuration

The two models and associated numerical methods are going to be tested and compared on the test-case configuration of a conical diverging nozzle. This configuration is originally 2D axisymmetrical and can be considered as realistic. However, we are not going to precisely evaluate all the properties of the spray as in

[MKGS98] [LM01] and [LSN⁺02]. The purpose of the comparison is to prove on the one side the ability of the multi-fluid model to correctly describe the coalescence phenomenon and on the other side to provide a comparison tool for the numerical simulations based on Lagrangian models and solvers. Consequently, we only consider simple models as already mentioned in sub-section 4.2.1.

A spray of pure heptane fuel is carried by a gaseous mixture of heptane and nitrogen into a conical diverging nozzle. At the entrance, 99% of the mass of the fuel is in the liquid phase, whereas 1% is in the gaseous mixture. The mass fraction in the gas are then respectively of 2.9% for heptane and 97.1% for the nitrogen. The temperature of the gas mixture is supposed to be fixed during the whole calculation at 400 K. The flow is assumed stationary and the influence of the vaporization process on the gas characteristics is not taken into account in our one-way coupled calculation. It is clear that the vaporization process is going to change the composition of the gaseous phase and then of the vaporization itself. However, we do not want to achieve a fully coupled calculation, but only to compare two ways of evaluating the coupling of the dynamics, vaporization and coalescence of the droplets.

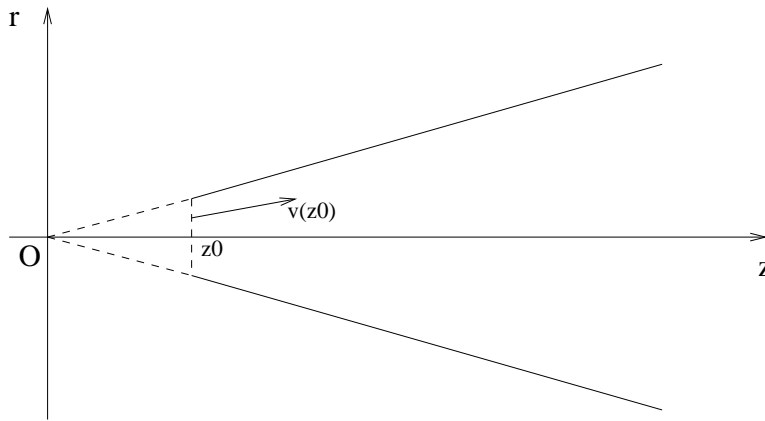


Figure 4.3: Sketch of the conical diverging nozzle.

In order to only solve a 1D problem, we make a similarity assumption on the gas and droplets variables. Actually, we choose the gas flow in the conical nozzle such that the axial velocity does not depend on the radial coordinate r and such that the radial velocity is linear as a function of the radial coordinate, whereas the linearity coefficient does not depend on r :

$$v_z = V(z), \quad v_r = rU(z). \quad (4.39)$$

In this stationary configuration of an incompressible flow, we can determine the velocity field given by $(V(z), U(z))$ such that the stream lines are straight :

$$V(z) = \frac{z_0^2 V(z_0)}{z^2}, \quad U(z) = \frac{V(z)}{z} = \frac{z_0^2 V(z_0)}{z^3}, \quad (4.40)$$

where $z_0 > 0$ is fixed as well as $V(z_0)$. The trajectories of the fluid particles are then given by:

$$r(t) = r(0) \left(1 + \frac{3V(z_0)}{z_0} t \right)^{1/3}, \quad z(t) = z(0) \left(1 + \frac{3V(z_0)}{z_0} t \right)^{1/3}.$$

As for the droplets, we also assume similarity; their trajectories are straight if their injection velocity is co-linear to the one of the gas. The similarity assumption is only valid when no collision is to be found. However, even in the presence of coalescence, it is verified in a neighborhood of the central line.

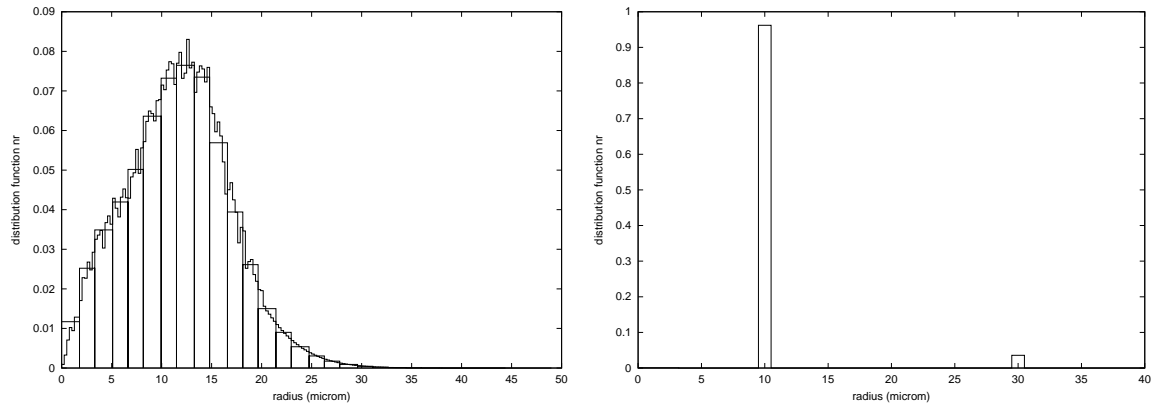


Figure 4.4: Figure a: Monomodal distribution function and 30 section discretization. Figure b: Bimodal distribution function and 50 section discretization.

Let us finally consider two droplet distribution functions. The first one, called monomodal, is composed of droplets with radii between 0 and 35 microns, with a Sauter mean radius of 15.6 microns and a variance of $D_{10} = 24$ microns. It is represented on Fig. 4 and is typical of the experimental condition reported in [LSN⁺02]. The droplets are only constituted of liquid heptane, their initial velocity is the one of the gas, their initial temperature, fixed at the equilibrium temperature 325.4K (corresponding to an infinite conductivity model), does not change along the trajectories. The second distribution is called bimodal since it involves only two groups of radii respectively 10 microns and 30 microns with equivalent mass density. This bimodal distribution function is typical of alumina particles in solid propergol rocket boosters [Hyl99]. It is represented on Fig. 5.

Because of the deceleration of the gas flow in the conical nozzle, droplets are going to also decelerate, however at a different rate depending on their size and inertia. This will induce coalescence. The deceleration at the entrance of the nozzle is taken at $a(z_0) = -2\frac{V(z_0)}{z_0}$; it is chosen big enough so that the velocity difference developed by the various sizes of droplets is important ($V(z_0) = 5\text{m/s}$, $z_0 = 0.1\text{cm}$). The initial mass density is then taken at $0.0036\text{g}\cdot\text{cm}^{-3}$ so that the volume fraction occupied by the liquid phase is 0.57%.

Before coming to the result section and before comparing the methods with both distributions, let us present the two solvers.

4.5.2 A reference Lagrangian solver

Euler-Lagrange numerical methods are commonly used for the calculation of polydisperse sprays in various application fields (see for example [HV98] [O'R81] [RHSK00] [DFV⁺00] and the references therein). In this kind of approach, the gas phase is generally computed with a finite volume Eulerian solver, while the dispersed phase is treated with a random particle method. The influence of the droplets on the gas flow is taken into account by the presence of source terms in the r.h.s. of the Navier-Stokes (or Euler) equations.

A complete exposition on the derivation and the implementation of such a method is out the scope of this paper. We refer, for example, to [AOB89], [HV98] or [Hyl99] for more details. Here, for the sake of completeness, we present the main features of the numerical method that we used in order to provide a "reference numerical solution".

A particle method can be interpreted as a direct discretization of the kinetic equation (4.1). At each time step, the droplet distribution function $f(t^k)$ is approximated by a finite weighted sum of Dirac masses, $\tilde{f}(t^k)$, which reads :

$$f(t^k) = \sum_{i=1}^{N^k} n_i^k \delta_{z_i^k, u_i^k, v_i^k}. \quad (4.41)$$

Each weighted Dirac mass is generally called a "parcel" and can be physically interpreted as an aggregated number of droplets (the weight n_i^k), located around the same point, x_i^k , with about the same velocity, u_i^k and about the same volume, v_i^k . N^k denotes the total number of parcels in the computational domain, at time t^k . In all our calculations, the weights n_i^k were chosen in such a way that each parcel represents the same volume of liquid ($n_i^k v_i^k = Const$).

Each time step of the particle method is divided in two stages. The first one is devoted to the discretization of the l.h.s. of the kinetic equation (4.1), modeling the motion and evaporation of the droplets. In our code, the new position, velocity and volume of each parcel are calculated according to the following numerical scheme:

$$\begin{cases} u_i^{k+1} = u_i^k \exp(-\Delta t/\tau_i^k) + V(z_i^k) (1 - \exp(-\Delta t/\tau_i^k)) \\ v_i^{k+1} = \frac{4\pi}{3} \max\left(0, \left[\left(\frac{3v_i^k}{4\pi}\right)^{2/3} - E\Delta t\right]\right)^{3/2} \\ z_i^{k+1} = z_i^k + \Delta t V(z_i^k) + (u_i^k - V(z_i^k)) \exp(-\Delta t/\tau_i^k) \end{cases} \quad (4.42)$$

where V denotes the axial gas velocity, E is the constant of the evaporation model ($E = 1.58310^{-8}$), u_i^k - respectively z_i^k - corresponds to the axial coordinate of the position - respectively of the velocity - of the parcel i at time and τ_i^k is the parcel relaxation time defined as :

$$\tau_i^k = \frac{2\rho_l (r_i^k)^2}{9\mu_g},$$

with r_i^k being the parcel radius, ρ_l the liquid density and μ_g the gas viscosity.

In system (4.42), the parcel radial coordinate is not calculated, in order to keep the same hypothesis as for the one dimensional multi-fluid Eulerian model. Besides, as mentioned above, the influence of the droplets on the gas flow is not taken into account. Hence, equation (4.40) is used to calculate the gas velocity, $V(z_i^k)$ at the parcel location.

The second stage of a time step is devoted to the discretization of the collision operator. A lot of Monte-Carlo algorithms have been proposed in the literature for the treatment of droplet collisions ([O'R81] [HV98] [RHSK00] [Hy199] [SR00]). They are all inspired by the methods used in molecular gas dynamics [Bir94] and, in particular, they suppose that the computational domain is divided into cells, or control volumes, which are small enough to consider that the droplet distribution function is almost uniform over them.

The algorithm used in our reference Lagrangian solver is close to the one proposed by O'Rourke. It consists of the following 3 steps (see also [HV98] for more details).

1. For each computational cell C_J , containing N_J parcels, we choose randomly, with a uniform distribution law, $\frac{N_J}{2}$ pairs of parcels ($\frac{N_J-1}{2}$, if N_J is odd).

2. For each pair p , let p_1 and p_2 denote the two corresponding parcels with the convention $n_1 \geq n_2$, where n_1 and n_2 denote the parcel numerical weights. Then for each pair p of the cell C_J , we choose randomly an integer ν_p , according to the Poisson distribution law:

$$P(\nu) = \frac{\lambda_{12}}{\nu!} \exp(-\lambda_{12}),$$

with

$$\lambda_{12} = \pi \frac{n_1(N_J - 1)\Delta t}{\text{vol}(C_J)} (R_1 + R_2)^2 |u_1 - u_2|$$

with $\text{Vol}(C_J)$ being the volume of the cell C_J (proportional to $(z_J/z_0)^2$ for the nozzle test case problem) and R_1, R_2 being the radii of the parcels p_1, p_2 . The coefficient λ_{12} represents the mean number of collision, during $(N_j - 1)$ time steps, between a given droplet of the parcel p_2 and any droplet of the parcel p_1 . Note that a given pair of parcels is chosen, in average, every $(N_j - 1)$ time steps.

3. If $\nu_p = 0$, no collision occurs during this time step between the parcels p_1 and p_2 . Otherwise, if $\nu_p > 0$, the parcel p_1 undergoes ν_p coalescences with the parcel p_2 and the outcome of the collision is treated as follows. First the weight n_1 of the parcel p_1 is replaced by $n'_1 = n_1 - n_2$ and its other characteristics are left unchanged. If $n'_1 \leq 0$, the parcel p_1 is removed from the calculation. Secondly, the velocity u_2 and the volume v_2 of the parcel p_2 are replaced by

$$v'_2 = v_2 + \nu_p v_1, \quad u'_2 = \frac{v_2 u_2 + \nu_p v_1 u_1}{v_2 + \nu_p v_1},$$

and its weight, n_2 , is left unchanged.

Let us mention that, for each time step and each control volume C_J , the computational cost of this algorithm behaves like $O(N_J)$. This is a great advantage compare to O'Rourke method, which behaves like $O(N_J^2)$. Another algorithm, with the same features, has been recently introduced by Schmidt and Rutland in [SR00].

To obtain a good accuracy, the time step, Δt , must be chosen small enough to ensure that the number of collisions between two given parcels, p_1 and p_2 , is such that for almost every time : $\nu_p n_2 \leq n_1$. The average value of ν_p being λ_{12} , this constraint is equivalent to the condition:

$$\frac{n_2 N_J \Delta t}{\text{vol}(C_J)} \pi (R_1 + R_2)^2 |u_1 - u_2| \ll 1. \quad (4.43)$$

For the nozzle test case described above, this constraint reveals to be less restrictive than the "CFL" like condition

$$\forall i = 1, \dots, N, \quad \frac{|u_i| \Delta t}{\Delta z} \ll 1, \quad (4.44)$$

with Δz being the mesh size. This condition is necessary to compute accurately the droplet movement and in particular to avoid that a parcel goes through several control volumes during the same time step. This is essential to have a good representation of the droplet distribution function in each mesh cell.

4.5.3 Characteristic computation parameters, reference solution

The main numerical parameters used in order to compute the reference solution with the Lagrangian approach are summarized in Table I.

	Number of parcels	Mesh size Δz (m)	Time step Δt (s)
Monomodal Case	14000	$2.5 \cdot 10^{-3}$	$1.25 \cdot 10^{-5}$
Bimodal Case	63000	$1.8 \cdot 10^{-3}$	$0.9 \cdot 10^{-5}$

Table I : Parameters for the reference solution

Moreover, to eliminate the numerical noise intrinsic to the Lagrangian approach, time averages (over a period of 0.6s) have been used to calculate the mass density, the Sauter mean radius and the mean velocity of the droplets in each computational cell, once the steady state has been reached.

Let us now analyze the main features of the obtained solutions for both initial droplet size distribution. It can be easily seen on Fig. 6 that the influence of the coalescence phenomenon is important in both the monomodal and bimodal configurations. Since the droplets of various sizes develop a velocity difference reaching one meter per second due to the deceleration in the monomodal case, coalescence takes place and changes the profile of the size distribution function and consequently influences the vaporization process by transferring some mass from the small droplets into the big ones. It can also be seen on Fig. 7 that the influence on the Sauter mean diameter can reach five to seven microns in the monomodal case. This demonstrate that the coalescence phenomenon really plays a crucial role in this configuration and is strongly coupled to the dynamics and vaporization of the spray, thus offering a good test-case in order to validate the multi-fluid Eulerian model.

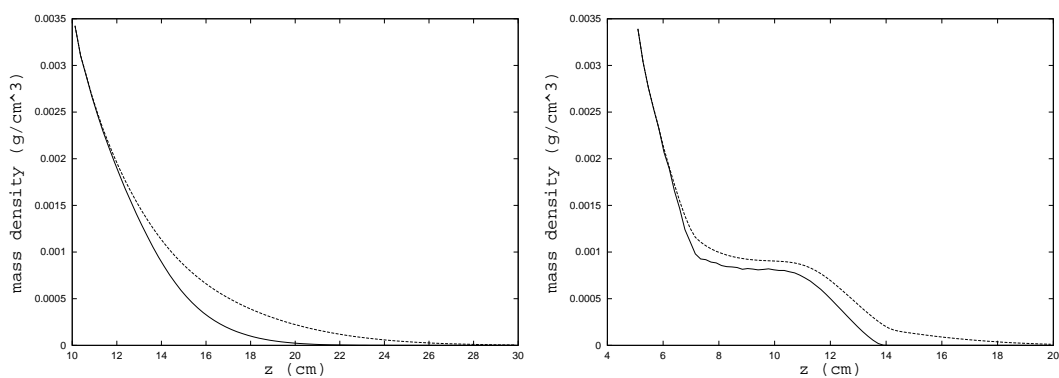


Figure 4.5: Evolution of the mass density of liquid for the Lagrangian reference solution with (dashed line) and without (solid line) coalescence for both the monomodal case and the bimodal one.

4.5.4 Eulerian solver, computational cost

The Eulerian multi-fluid model (4.11-4.12) can be rewritten and simplified in the self-similar 2D axisymmetrical configuration we are considering. The resulting set of equations can be found in [MKGS98]. In the present calculation, only the one-way coupled equations are resolved. Consequently, since the structure of

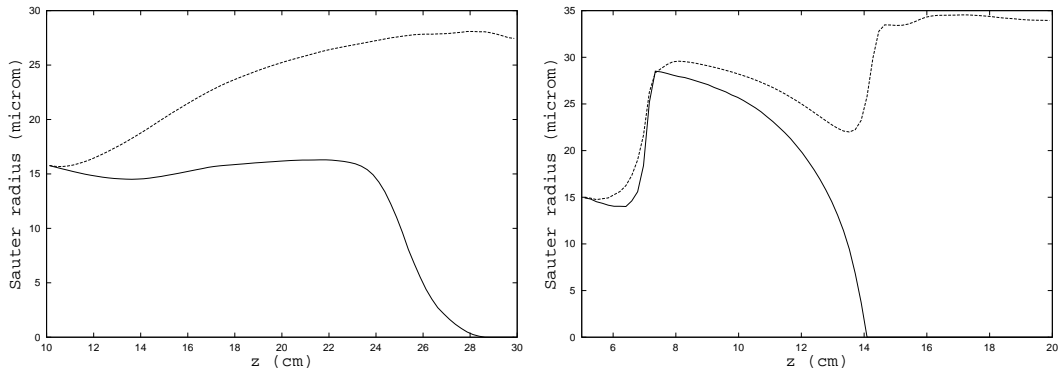


Figure 4.6: Evolution of the Sauter mean radius of the spray size distribution and of the mass mean value of the spray velocity for the Lagrangian reference solution with (dashed line) and without (solid line) coalescence for both the monomodal case and the bimodal one.

the gaseous velocity field is prescribed, we only have to solve the 1D ordinary differential system of equations in the z variable. The problem is then reduced to the integration of a stiff initial value problem from the inlet where the droplets are injected until the point where 99.9% of the mass has vaporized. In particular, we do not have to cope with the problem of the localization of the vaporization front. The integration is performed using LSODE for stiff ordinary differential equations from the ODEPACK library [Hin83]. It is based on BDF methods [HW91] (Backward Differentiation Formulae) where the space step is evaluated at each iteration, given relative and absolute error tolerances [Hin83]. The relative tolerance, for the solutions presented in the following are taken to be 10^{-4} and the absolute tolerance are related to the initial amount of mass in the various sections, since it can vary of several orders of magnitude. Repeated calculation with smaller tolerances have proved to provide the same solutions. The distribution function in the sections is always taken to be constant as a function of radius, except in the last one where it is exponentially decreasing as a function of surface, as already mentioned in section 4.4.

The reduced CPU time for both the monomodal and bimodal distributions is presented in Table II for various numbers of sections. It is worth noticing that the complexity behaves like the number of sections to the square, but more importantly, that the resolution of the coalescence phenomenon only brings in an additional cost of about 50% compared to the computation without the coalescence quadratic terms. The strategy is then the same as the one used in [LSN⁺02], that is to reduce the number of unknowns in the problem while still correctly describing the coupling of vaporization, dynamics and coalescence.

Nb. Sections	Mon. without Collision	Mon. with Collision	Nb. Sections	Bim. without Collision	Bim. with Collision
90	22.7	35.2	100	70.9	114.1
60	10.9	25.6	50	16.0	24.0
30	3.0	4.2	25	9.0	13.0
15	1.0	1.8	13	1.0	1.3

Table II : Reduced CPU times for various numbers of sections

4.5.5 Eulerian results for the monomodal test case

The Eulerian multi-fluid model is especially well-suited for the monomodal distribution where a large spectrum of droplets are present, with a distribution tail. It can be seen on Fig. 8, left, that the curves corresponding to the 90 sections solutions and the reference Lagrangian solution almost coincide; the difference is quantified on Fig. 8 right, where the solid line, except at the early beginning (an artefact due to the cell discretization and time step used for the reference solution in a zone of high velocities) the difference never gets bigger than five per a thousand of the initial mass density of droplets. This, on the one side, demonstrates the ability of the Eulerian model to simulate the proposed configuration, and on the other hand provides a numerical validation tool for the Lagrangian solver.

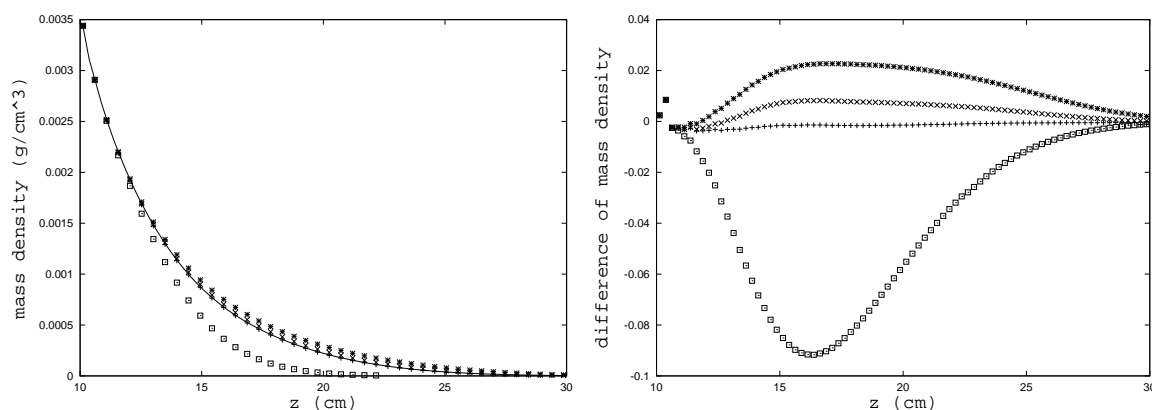


Figure 4.7: Evolution of the mass density of liquid for the Lagrangian reference solution (solid line) and for various discretizations with the Eulerian multi-fluid model (+ : 90 sections, \times : 30 section, * : 15 sections, \square : 90 sections without collision). Mass density difference relative to the mass density at the entrance between the Lagrangian reference solution and the Eulerian multi-fluid model with 90 sections (+), 30 sections (\times), 15 sections (*) and 90 sections without collision (\square).

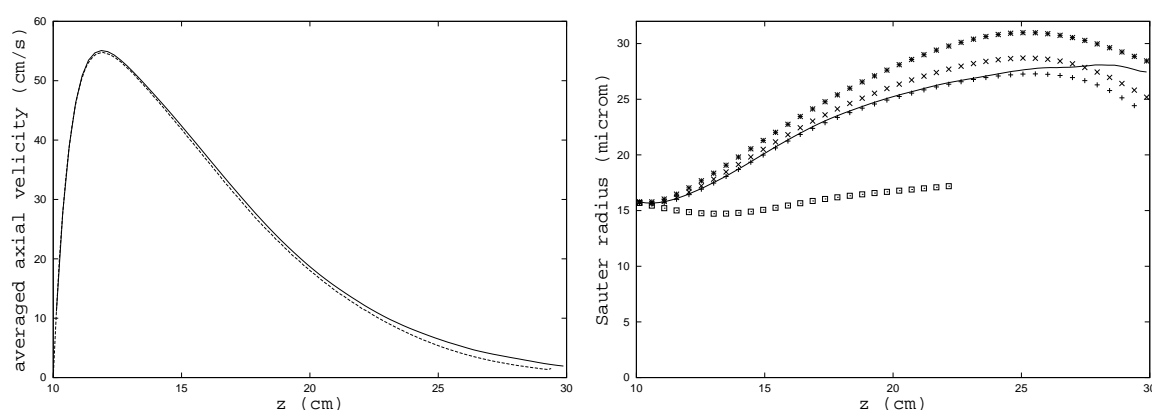


Figure 4.8: Evolution of the mass averaged velocity of liquid for the Lagrangian reference solution (solid line) and for the 90 sections discretization with the Eulerian multi-fluid model (long-dashed). Sauter mean radius for the Lagrangian reference solution (solid line) and for various discretizations with the Eulerian multi-fluid model (+ : 90 sections, \times : 30 section, * : 15 sections, \square : 90 sections without collision).

As mentioned previously, the strength of such multi-fluid models, is to be able to reproduce the global

behavior of the spray with a limited number of sections. Consequently, calculations with various numbers of sections were performed : 90, 60, 30 and 15. For completeness, we have also represented, both on Fig 8. left and right, the solution without coalescence calculated with 90 sections (which is superimposed on the one calculated with the reference Lagrangian solver on Fig. 6. left). The conclusion to be drawn from these figures is that the multi-fluid is able to predict fairly well, even in the case of 15 sections for which the computational cost is very reasonable, the global coupling of the various phenomena occurring in the nozzle, whereas the solution without coalescence only provides a crude approximation of the solution. One crucial point is related to the localization of the vaporization front for pollutant formation purposes. It is clear that even with 15 sections, the vaporization front is precisely computed whereas neglecting the coalescence phenomenon leads to a substantial error of more than 5 cm.

It is particularly interesting to note that the average dynamics are correctly reproduced with 90 sections. Concerning the Sauter mean radius of the distribution, it is extremely well-predicted by the 90 section solution, fairly well-reproduced by the 30 section one and the difference gets bigger when we use 15 sections, even if the mass difference does not get bigger than 2 percent of the initial one.

We can then conclude, with this first test case, on the ability of the Eulerian multi-fluid model to reproduce with high accuracy the behavior of the reference Lagrangian solution and also to correctly predict the global coupling of vaporization, dynamics and coalescence with a limited number of sections.

4.5.6 Eulerian Results for the bimodal test case

If the monomodal distribution is well-suited for the sectional approach, the bimodal can be considered as the most difficult task; first the method can be shown to be of first order in the size discretization step [Lau02] and some previous calculations have proved the difficulty of calculating the interaction of two groups like the one proposed in this example [LM01]. In such a situation, the numerical diffusion is introducing some artificial coupling at the dynamical level since only one velocity is prescribed per section.

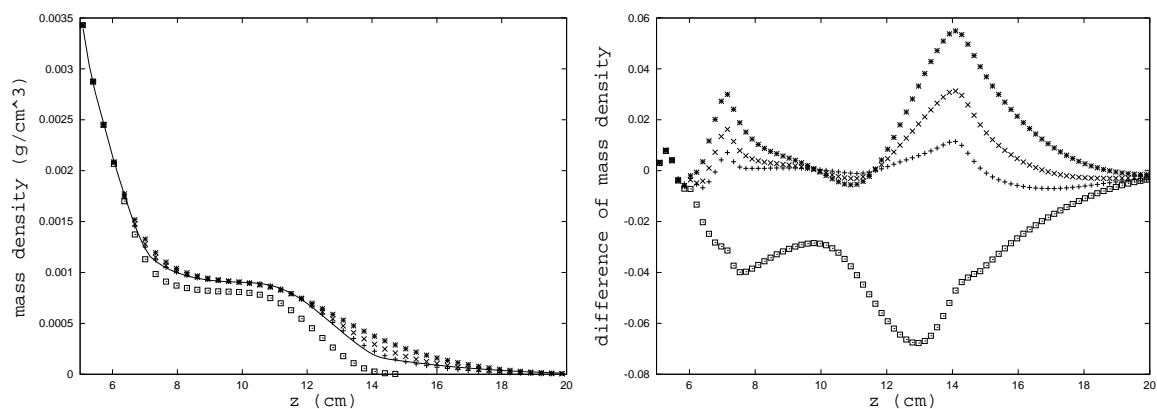


Figure 4.9: Evolution of the mass density of liquid for the Lagrangian reference solution (solid line) and for various discretizations with the Eulerian multi-fluid model (+ : 100 sections, \times : 50 section, * : 25 sections, \square : 100 sections without collision). Mass density difference relative to the mass density at the entrance between the Lagrangian reference solution and the Eulerian multi-fluid model with 100 sections (+), 50 sections (\times), 25 sections (*) and 100 sections without collision (\square).

However, the results presented on Fig. 10 show that the mass evolution is very well captured, the difference with the reference solution stays below 1%. The evolution of the Sauter mean radius on Fig. 11-

right is also well-captured. However, once 93% of the initial mass has vaporized, there is a little difference in the mass density decrease which seems to be due to a difficulty to correctly reproduce the dynamics and granulometry of the distribution function.

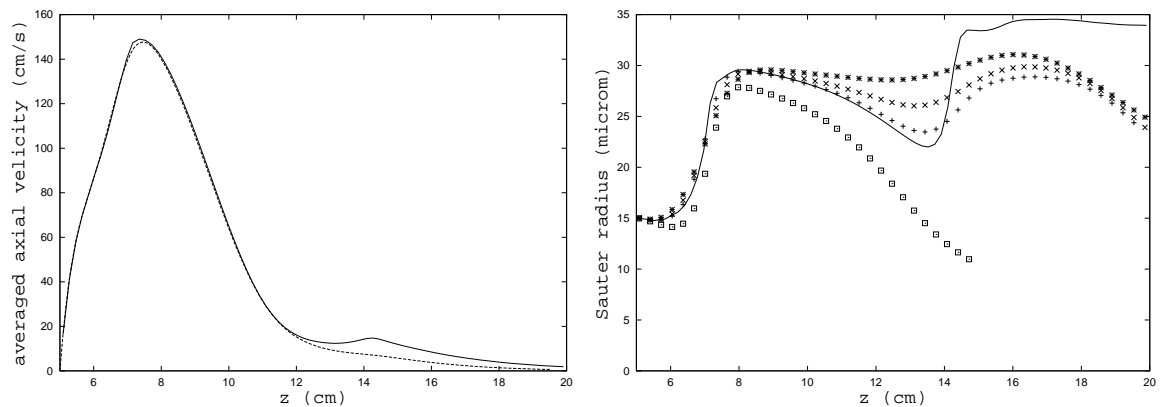


Figure 4.10: Evolution of the mass averaged velocity difference of liquid for the Lagrangian reference solution (solid line) and for the 100 sections discretization with the Eulerian multi-fluid model (long-dashed). Sauter mean radius for the Lagrangian reference solution (solid line) and for various discretizations with the Eulerian multi-fluid model (+ : 100 sections, x : 50 section, * : 25 sections, □ : 100 sections without collision).

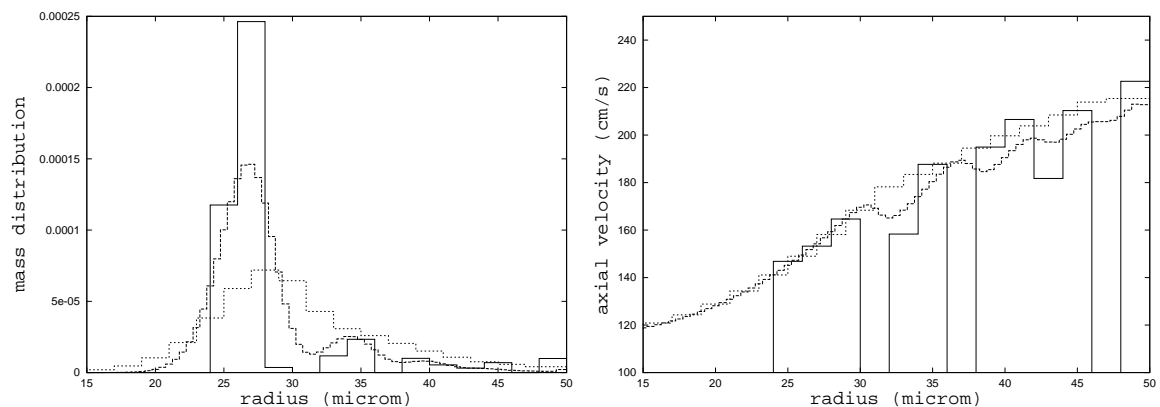


Figure 4.11: Droplet mass distribution at the location $z = 10.53$ cm as well as velocity distribution as a function of droplet size at this same location (dashed line : 100 sections, dotted line : 25 section and solid line : Lagrangian).

In order to have a more precise idea of what is happening, we have represented on Fig. 12. left the mass distribution function at the point $z = 10.53$ cm as well as the velocity distribution as a function of the droplet size at this point in Fig. 12-right. It appears very clearly that the numerical diffusion, if too high, can smooth out the mass distribution function and consequently the velocity distribution function. In the 25 sections case, the peaks of the distribution have disappeared and the velocity distribution function has become monotone. This configuration allows to understand what will be the limits of such an approach. However, the simulation with 100 sections allows to predict very accurately the various peaks of the mass distribution function, as well as their dynamics, except for the “big” droplets, the velocity of which is becoming higher thus causing the difference to be observed on Figure 11-left on the mass averaged velocity. This small discrepancy can be attributed to the numerical diffusion which prevents the Eulerian multi-fluid

method to accurately reproduce the intensity of the peaks representing the “big” droplets (Fig. 12-left). The influence of such a discrepancy is minimal on the mass distribution function as can be seen on Fig. 11-right, but can influence the mass averaged velocity as shown on Fig. 11-left.

4.6 Discussion and Conclusion

We have proposed in this paper a new Eulerian multi-fluid approach in order to simulate polydisperse dense sprays. The main advantage of this approach is that it can be derived from a kinetic level of description and allows for a description of the droplet coalescence phenomenon, an uncommon feature of the usual Eulerian models.

We have proved the ability of such a method to reproduce the solution provided by a reference Lagrangian solver in a particular 2D axisymmetrical nozzle configuration. The limitations of the approach have been presented as well as its strength. It is able to reproduce the global behavior of the spray with a limited number of unknowns at a very limited computational cost. However, in such a situation, the numerical diffusion is introducing artificial couplings and smoothens out the details of the dynamics of the droplets. This can be related to the only first order of the sectional approach as studied in [Lau02].

In a recent work [LM02], we introduce a new second order method which can be extended to dense sprays with coalescence. This should improve the robustness of the method thus making it a real efficient tool for more complex configurations. We are also currently using this approach in multi-dimensional situations.

Bibliography

- [AOB89] A.A. Amsden, P. J. O'Rourke, and T. D. Butler. Kiva II, a computer program for chemically reactive flows with sprays. Technical Report LA-11560-MS, Report Los Alamos National Laboratory, Los Alamos, New Mexico, 1989.
- [AP90] N. Ashgriz and J. Y. Poo. Coalescence and separation in binary collisions of liquid droplets. *Journal of Fluid Mechanics*, 221:183–204, 1990.
- [Bir94] G. A. Bird. Molecular gas dynamics and the direct simulation of gas flows. *Oxford science publications*, 42, 1994.
- [BSJL72] P.R. Brazier-Smith, S.G. Jennings, and J. Latham. The interaction falling water drops : coalescence. *Proceedings of the Royal Society*, 326:393–408, 1972.
- [DFV⁺00] J. Dupays, Y. Fabignon, P. Villedieu, G. Lavergne, and J. L. Estivalezes. Some aspects of two-phase flows in solid propellant rocket motors, in solid propellant chemistry, combustion and interior ballistics. *Progress in Astronautics and Aeronautics*, 185, 2000.
- [DS97] K. Domelevo and L. Sainsaulieu. A numerical method for the computation of the dispersion of a cloud of particles by a turbulent gas flow field. *J. Comput. Phys.*, 133(2):256–278, 1997.
- [Duk80] John K. Dukowicz. A particle-fluid numerical model for liquid sprays. *J. Comput. Phys.*, 35(2):229–253, 1980.
- [GB78] H. C. Gupta and F. V. Bracco. Numerical computations of two-dimensional unsteady sprays for applications to engines. *AIAA Journal*, 16(10):1053–1061, 1978.
- [GST93] J.B. Greenberg, I. Silverman, and Y. Tambour. On the origin of spray sectional conservation equations. *Combustion and Flame*, 93:90–96, 1993.
- [Hin83] Alan C. Hindmarsh. ODEPACK, a systematized collection of ODE solvers. In *Scientific computing (Montreal, Que., 1982)*, pages 55–64. IMACS, New Brunswick, NJ, 1983.
- [HV98] J. Hylkema and P. Villedieu. A random particle method to simulate coalescence phenomena in dense liquid sprays. In *Lecture Notes in Physics*, volume 515, pages 488–493, Arcachon, France, 1998. Proc. 16th Int. Conf. on Num. Meth. in Fluid Dyn.
- [HW78] L. C. Hasselman and C. K. Westbrook. A theoretical model for fuel injection in stratified charge engines. *SAE paper 780138*, 1978.

- [HW91] E. Hairer and G. Wanner. *Solving ordinary differential equations. II*. Springer-Verlag, Berlin, 1991. Stiff and differential-algebraic problems.
- [Hyl99] J. Hylkema. *Modélisation cinétique et simulation numérique d'un brouillard dense de gouttelettes. Application aux propulseurs à poudre*. PhD thesis, ENSAE, 1999.
- [Lau02] Frédérique Laurent. Analyse numérique d'une méthode multi-fluide Eulérienne pour la description de sprays qui s'évaporent. *C. R. Math. Acad. Sci. Paris*, 334(5):417–422, 2002.
- [LM01] Frédérique Laurent and Marc Massot. Multi-fluid modeling of laminar poly-dispersed spray flames: origin, assumptions and comparison of the sectional and sampling methods. *Combust. Theory and Modelling*, 5:537–572, 2001.
- [LM02] F. Laurent and M. Massot. Numerical analysis of Eulerian multi-fluid models in the context of kinetic formulations for dilute evaporating sprays. in preparation, 2002.
- [LSN⁺02] F. Laurent, V. Santoro, M. Noskov, A. Gomez, M.D. Smooke, and M. Massot. Accurate treatment of size distribution effects in polydispersed spray diffusion flames: multi-fluid modeling, computations and experiments. prépublication, MAPLY, UMR 5585 Lyon, 2002. (<http://maply.univ-lyon1.fr/publis/publiv/2002/publis.html>).
- [MKGS98] M. Massot, M. Kumar, A. Gomez, and M. D. Smooke. Counterflow spray diffusion flames of heptane: computations and experiments. In *Proceedings of the 27th Symp. (International) on Combustion, The Comb. Institute*, pages 1975–1983, 1998.
- [MV01] Marc Massot and Philippe Villedieu. Modélisation multi-fluide eulérienne pour la simulation de brouillards denses polydispersés. *C. R. Acad. Sci. Paris Sér. I Math.*, 332(9):869–874, 2001.
- [O'R81] P. J. O'Rourke. *Collective drop effects on vaporizing liquid sprays*. PhD thesis, Los Alamos National Laboratory 87545, University of Princeton, 1981.
- [RHSK00] Rüger, Hohmann, Sommerfeld, and Kohnen. Euler/Lagrange calculations of turbulent sprays : the effect of droplet collisions and coalescence. *Atomization and Sprays*, 10(1), 2000.
- [RS95] Pierre-Arnaud Raviart and Lionel Sainsaulieu. A nonconservative hyperbolic system modeling spray dynamics. I. Solution of the Riemann problem. *Math. Models Methods Appl. Sci.*, 5(3):297–333, 1995.
- [SR00] D. P. Schmidt and C. J. Rudtland. A new droplet collision algorithm. *Journal of computational physics*, 164(1):62–80, 2000.
- [VH97] Philippe Villedieu and Jouke Hylkema. Une méthode particulière aléatoire reposant sur une équation cinétique pour la simulation numérique des sprays denses de gouttelettes liquides. *C. R. Acad. Sci. Paris Sér. I Math.*, 325(3):323–328, 1997.
- [Wil58] F.A. Williams. Spray combustion and atomization. *Phys. Fluids*, 1:541–545, 1958.
- [Wil85] F.A. Williams. *Combustion Theory (Combustion Science and Engineering Series)*. ed F A Williams (Reading, MA: Addison-Wesley), 1985.

4.7 Appendix I

The purpose of this Appendix is to restore the details of the proof of Proposition 4.1 of subsection 4.3.1. We have seen that the assumption of zero dispersion is not compatible with the coalescence term and the conservation of momentum. Starting from assumptions **[H1]** and **[H3]**, we then consider a small and uniform dispersion σ which is going to converge to zero and make the following assumption instead of **[H2]**:

[D1] At a given size, the velocity distribution in each space direction, $k = 1, K$, is a Gaussian function φ_σ of dispersion σ around $\bar{u}_k(t, x, v)$:

$$f(t, x, v, u) = n(t, x, v) \prod_{k=1}^K \varphi_\sigma(u_k - \bar{u}_k(t, x, v)). \quad (4.45)$$

Let us notice that **[D1]** implies **[H1]**. We then use the same arguments as in [LM01] in order to obtain the macroscopic conservation equations when coalescence is present through the collisional operator Γ . The transport equation (4.1) is multiplied by 1 and u ; we then integrate with respect to the velocity variable. We then obtain a first set of conservation equations parametrized by the size of the droplets :

$$\begin{aligned} \partial_t n + \partial_x \cdot (n\bar{u}) + \partial_v (nR_v) &= -n(v) \int_{v^*} n(v^*) \beta(v, v^*) I_n^- dv^* \\ &+ \frac{1}{2} \int_{v^* \in [0, v]} n(v^\diamond(v, v^*)) n(v^*) \beta(v^\diamond(v, v^*), v^*) I_n^+ dv^* \end{aligned} \quad (4.46)$$

$$\begin{aligned} \partial_t (n\bar{u}) + \partial_x \cdot (n\bar{u} \otimes \bar{u} + n\mathbf{P}(\sigma)) + \partial_v (nR_v \bar{u}) - n\bar{F} &= -n(v) \int_{v^*} n(v^*) \beta(v, v^*) I_u^- dv^* \\ &+ \frac{1}{2} \int_{v^* \in [0, v]} n(v^\diamond(v, v^*)) n(v) \beta(v^\diamond(v, v^*), v^*) I_u^+ dv^*, \end{aligned} \quad (4.47)$$

where \bar{F} is the Stokes's drag force taken at $u = \bar{u}$ and where the partial collisional integrals I_n^-, I_n^+, I_u^- and I_u^+ take the following expressions

$$I_n^-(v, v^*, \sigma) = \int \int_{u, u^*} |u - u^*| \varphi_\sigma(u - \bar{u}(v)) \varphi_\sigma(u^* - \bar{u}(v^*)) du du^*, \quad (4.48)$$

$$I_u^-(v, v^*, \sigma) = \int \int_{u, u^*} u |u - u^*| \varphi_\sigma(u - \bar{u}(v)) \varphi_\sigma(u^* - \bar{u}(v^*)) du du^* \quad (4.49)$$

$$I_n^+(v, v^*, \sigma) = \int \int_{u^\diamond, u^*} |u^\diamond - u^*| \varphi_\sigma(u^* - \bar{u}(v^*)) \varphi_\sigma(u^\diamond - \bar{u}(v - v^*)) du^\diamond du^* \quad (4.50)$$

$$v I_u^+(v, v^*, \sigma) = \int \int_{u^\diamond, u^*} ((v - v^*)u^\diamond + v^*u^*) |u^\diamond - u^*| \varphi_\sigma(u^* - \bar{u}(v^*)) \varphi_\sigma(u^\diamond - \bar{u}(v - v^*)) du^\diamond du^* \quad (4.51)$$

In the previous expressions, we have used the new velocity variables (u^\diamond, u^*) in the creation integrals. It is here fundamental that assumptions **[D1]** and **[H3]** are satisfied, i.e. that the support of the distributions in size and velocities is really the whole space $(v, u) \in (0, +\infty) \times \mathbb{R}^K$ so that all the collisions can be described by our model.

Lemma 4.1 *When the dispersion σ goes to zero, we have the following convergence :*

$$\mathbf{P} \rightarrow \mathbf{O}_{\mathbf{K} \times \mathbf{K}}, \quad I_n^- \rightarrow |\bar{u}(v) - \bar{u}(v^*)|, \quad I_u^- \rightarrow \bar{u}(v) |\bar{u}(v) - \bar{u}(v^*)|, \quad (4.52)$$

$$I_n^+ \rightarrow |\bar{u}(v^*) - \bar{u}(v - v^*)|, \quad v I_u^+ \rightarrow ((v - v^*)\bar{u}(v - v^*) + v^*\bar{u}(v^*)) |\bar{u}(v^*) - \bar{u}(v - v^*)| \quad (4.53)$$

Proof. – It can be easily proved that, up to an error linear in the dispersion σ , it is sufficient to consider the 1D case. We then switch to the polar coordinates around the point $(\bar{u}(v), \bar{u}(v^*))$ with $\Psi = \bar{u}(v) - \bar{u}(v^*)$.

$$I_n^- = \int \int_{r, \theta} \frac{r \exp(-\frac{r^2}{\sigma^2})}{\sigma^2} |r(\cos(\theta) - \sin(\theta)) + \Psi| dr d\theta.$$

Two cases are then to be distinguished, either $\Psi = 0$ and $I_n^- = \sqrt{2\pi}\sigma$, either $\Psi \neq 0$ and $I_n^- - \Psi \rightarrow 0$ when σ becomes lower than the distance between Ψ and 0 so that the Gaussian distribution approaches a Dirac delta function. $I_n^- - \Psi = \int \int_{r, \theta} \frac{r \exp(-\frac{r^2}{\sigma^2})}{\pi\sigma^2} (|r(\cos(\theta) - \sin(\theta)) - \Psi| - \Psi) d\theta$ For all given ε and Ψ , there exists a small disk D of radius δ around zero such that on D , $|r(\cos(\theta) - \sin(\theta)) - \Psi| - \Psi \leq \varepsilon/2$ and there exists σ such that on the complementary of D , the previous integral is lower than $\varepsilon/2$; consequently, $I_n^- - \Psi \rightarrow 0$ as $\sigma \rightarrow 0$. The other integrals are treated following the same arguments. \square

Finally if we pass to the limit of zero dispersion in equations (4.46)-(4.47), we obtain the semi-kinetic model presented in section 4.3.1 by equations (4.6)-(4.7) and the proof is complete.

4.8 Appendix II

The purpose of the present Appendix is to restore the details of the evaluation of the quadratic coalescence terms in the conservation equations (4.11)-(4.15) from the semi-kinetic model (4.6)-(4.7).

Let us come back to the definition of the coalescence terms in (4.11-4.12):

$$C_m^{(j)} = - \sum_{k=1}^N m^{(k)} \int_{v^{(j)}}^{v^{(j+1)}} \rho_l v^* f(v^*) \int_{v^{(k-1)}}^{v^{(k)}} f(v) B(\bar{u}^{(j)} - \bar{u}^{(k)}, v, v^*) dv^* dv + \frac{1}{2} \int \int_{D_j^{\diamond*}} \rho_l n(v^\diamond) n(v^*) (v^\diamond + v^*) B(\bar{u}(v^*) - \bar{u}(v^\diamond), v^*, v^\diamond) dv^* dv^\diamond. \quad (4.54)$$

$$C_{\mu}^{(j)} = - m^{(j)} \bar{u}^{(j)} \sum_{k=1}^N m^{(k)} \int_{v^{(j-1)}}^{v^{(j)}} \rho_l v^* f(v^*) \int_{v^{(k-1)}}^{v^{(k)}} f(v) B(\bar{u}^{(j)} - \bar{u}^{(k)}, v, v^*) dv^* dv + \frac{1}{2} \int \int_{D_j^{\diamond*}} \rho_l n(v^\diamond) n(v^*) (v^\diamond \bar{u}(v^\diamond) + v^* \bar{u}(v^*)) B(\bar{u}(v^*) - \bar{u}(v^\diamond), v^*, v^\diamond) dv^* dv^\diamond. \quad (4.55)$$

At this level, we make the assumption (4.10) on n and f in such a way that we introduce the mass densities in the sections $m^{(j)}$. Besides, we take advantage of the fact that the velocity is constant inside a

section, so that the right integration supports are introduced :

$$\begin{aligned}
C_m^{(j)} &= -m^{(j)} \sum_{k=1}^N m^{(k)} V_{jk} \iint_{L_{jk}} \rho_l v \kappa^{(j)}(v) \kappa^{(k)}(v^*) \beta(v, v^*) dv dv^* \\
&+ \frac{1}{2} \sum_{i=1}^{I^{(j)}} m^{(o_{ji}^\diamond)} m^{(o_{ji}^*)} V_{o_{ji}^\diamond o_{ji}^*} \left(\iint_{X_{ji}} \rho_l v^\diamond \kappa^{(o_{ji}^\diamond)}(v^\diamond) \kappa^{(o_{ji}^*)}(v^*) \beta(v^\diamond, v^*) dv^\diamond dv^* \right. \\
&+ \iint_{X_{ji}} \rho_l v^* \kappa^{(o_{ji}^\diamond)}(v^\diamond) \kappa^{(o_{ji}^*)}(v^*) \beta(v^\diamond, v^*) dv^\diamond dv^* \\
&+ \left. \iint_{X_{ji}^{\text{sym}}} \rho_l v^\diamond \kappa^{(o_{ji}^*)}(v^\diamond) \kappa^{(o_{ji}^\diamond)}(v^*) \beta(v^\diamond, v^*) dv^\diamond dv^* + \right. \\
&\left. \iint_{X_{ji}^{\text{sym}}} \rho_l v^* \kappa^{(o_{ji}^*)}(v^\diamond) \kappa^{(o_{ji}^\diamond)}(v^*) \beta(v^\diamond, v^*) dv^\diamond dv^* \right)
\end{aligned} \tag{4.56}$$

$$\begin{aligned}
C_{\text{mu}}^{(j)} &= -m^{(j)} \bar{u}^{(j)} \sum_{k=1}^N m^{(k)} V_{jk} \iint_{L_{jk}} \rho_l v \kappa^{(j)}(v) \kappa^{(k)}(v^*) \beta(v, v^*) dv dv^*, \\
&+ \frac{1}{2} \sum_{i=1}^{I^{(j)}} m^{(o_{ji}^\diamond)} m^{(o_{ji}^*)} V_{o_{ji}^\diamond o_{ji}^*} \left(\bar{u}^{(o_{ji}^\diamond)} \iint_{X_{ji}} \rho_l v^\diamond \kappa^{(o_{ji}^\diamond)}(v^\diamond) \kappa^{(o_{ji}^*)}(v^*) \beta(v^\diamond, v^*) dv^\diamond dv^* \right. \\
&+ \bar{u}^{(o_{ji}^*)} \iint_{X_{ji}} \rho_l v^* \kappa^{(o_{ji}^\diamond)}(v^\diamond) \kappa^{(o_{ji}^*)}(v^*) \beta(v^\diamond, v^*) dv^\diamond dv^* \\
&+ \bar{u}^{(o_{ji}^*)} \iint_{X_{ji}^{\text{sym}}} \rho_l v^\diamond \kappa^{(o_{ji}^*)}(v^\diamond) \kappa^{(o_{ji}^\diamond)}(v^*) \beta(v^\diamond, v^*) dv^\diamond dv^* \\
&+ \left. \bar{u}^{(o_{ji}^\diamond)} \iint_{X_{ji}^{\text{sym}}} \rho_l v^* \kappa^{(o_{ji}^*)}(v^\diamond) \kappa^{(o_{ji}^\diamond)}(v^*) \beta(v^\diamond, v^*) dv^\diamond dv^* \right)
\end{aligned} \tag{4.57}$$

This yields the final system of equations and we recall the expression of the collisional integrals :

$$\begin{aligned}
Q_{jk} &= \iint_{L_{jk}} \rho_l v \kappa^{(j)}(v) \kappa^{(k)}(v^*) \beta(v, v^*) dv dv^*, \quad Q_{ji}^\diamond = \iint_{X_{ji}} \rho_l v^\diamond \kappa^{(o_{ji}^\diamond)}(v^\diamond) \kappa^{(o_{ji}^*)}(v^*) \beta(v^\diamond, v^*) dv^\diamond dv^*, \\
Q_{ji}^* &= \iint_{X_{ji}} \rho_l v^* \kappa^{(o_{ji}^\diamond)}(v^\diamond) \kappa^{(o_{ji}^*)}(v^*) \beta(v^\diamond, v^*) dv^\diamond dv^* = \iint_{X_{ji}^{\text{sym}}} \rho_l v^\diamond \kappa^{(o_{ji}^*)}(v^\diamond) \kappa^{(o_{ji}^\diamond)}(v^*) \beta(v^\diamond, v^*) dv^\diamond dv^*.
\end{aligned}$$

We have represented the strip $D_4^{\diamond*}$, X_{4i} , $i = 1, 4$ and X_{4i}^{sym} , $i = 1, 2$ on Fig. 1, as well as the rectangular integration domains L_{42} and L_{24} for the disappearance operator. Let us recall :

$$D_j^{\diamond*} = \bigcup_{k=2}^N \bigcup_{l=1}^{k-1} (L_{kl} \cap D_j^{\diamond*}) \cup (L_{lk} \cap D_j^{\diamond*}) = \bigcup_{i=1}^{I^{(j)}} (X_{ji} \cup X_{ji}^{\text{sym}}), \quad X_{ji} = L_{o_{ji}^\diamond o_{ji}^*} \cap D_j^{\diamond*}.$$

For $j = 4, i = 1$, X_{41} corresponds to $o_{41}^\diamond = 3$ and $o_{41}^* = 1$. let us notice that two droplets in the same section can not coalesce since the velocity difference between them is zero. The conservation of mass and momentum are based on

$$\mathbb{R}_+^2 = \bigcup_{j=1}^N \bigcup_{k=1}^N L_{jk} = \bigcup_{j=1}^N \bigcup_{i=1}^{I^{(j)}} (X_{ji} \cup X_{ji}^{\text{sym}}) \cup \bigcup_{j=1}^N L_{jj},$$

an equality that can be easily observed on Fig. 1.

Chapitre 5

Analyse numérique des méthodes multi-fluides eulériennes ; Méthodes d'ordre supérieur

Ce chapitre fait l'objet d'une note aux CRAS, donnée en annexe et d'un article en préparation avec M. Massot.

5.1 Introduction

La modélisation des sprays (par spray, nous entendons une phase liquide dispersée sous forme de gouttelettes, i.e. dont la fraction volumique est petite devant un) revêt une importance particulière dans le cadre de la propulsion par combustion où la plupart des fuels utilisés sont stockés sous forme condensée. La détermination précise de la quantité de masse de fuel fournie au gaz par les gouttelettes est essentielle et repose sur une bonne représentation de la polydispersion en taille du brouillard : en effet, ces facteurs influencent fortement la structure des flammes diphasiques considérées, même dans le cas de brouillards dilués [MKGS98].

C'est dans ce contexte que les modèles multi-fluides eulériens ont été étudiés récemment [LM01], [LSN⁺02], [MV01], [LMV01]. Une première méthode, la méthode sectionnelle, a été introduite par Greenberg et al. [GST93]. Son lien avec le niveau cinétique [Wil58] est rigoureusement établi dans [LM01] pour les sprays dilués, où les collisions peuvent être négligées, et dans [MV01], [LMV01] pour les spray denses. Il s'agit d'une méthode de moments en vitesse et température, l'espace des phases en taille de gouttes étant quant à lui discrétisé par volumes finis sur la masse, avec contrainte de moment, l'intervalle choisi étant dénommé section en référence à [GST93]. L'évolution de la densité massique de chaque section, ainsi que de la vitesse moyenne et de la température moyenne correspondantes sont alors calculées directement grâce à des équations de conservation obtenues à partir d'un niveau cinétique. Pour le cas des sprays dilués, le modèle a été validé sur des flammes de diffusion diphasiques laminares par comparaisons expérimentales [MKGS98], [LSN⁺02] et comparé numériquement à une approche classique d'échantillonnage [LM01].

Cependant, cette méthode a été utilisée jusqu'à maintenant sans réelle justification quant à sa précision ou au choix de la discrétisation en taille. Un facteur essentiel est l'évaporation des gouttes : il est important de comprendre comment il agit sur la masse de fuel en phase vapeur. Pour mieux isoler ses effets, on considère donc la configuration, déjà introduite dans [Dom01], [LM01], d'un écoulement 1D, stationnaire, sans effet

dynamique ni thermique : l'évaporation d'un spray poly-dispersé dans un gaz chaud où les gouttelettes sont injectées à la température d'équilibre. On mène alors l'analyse numérique de cette méthode multi-fluides eulérienne dans ce cas qui a l'avantage de présenter une solution analytique. On a pu constater qu'elle provoquait une diffusion numérique assez importante [LM01], ce qui est confirmé par l'analyse numérique : cette méthode est d'ordre 1.

Afin d'améliorer ce point, on introduit ici des méthodes multi-fluides eulériennes d'ordre supérieur. Il s'agit toujours de méthodes de moments en vitesse et température, l'espace des phases en taille de gouttes est encore discrétisé par volumes finis, mais on considère cette fois, non pas des densités massiques dans chaque section, mais des moments en surface, toujours dans chaque section. C'est à partir de ces moments que l'on calcule les densités massiques. On va donner l'ordre de ces méthodes. Ce travail est une ouverture vers une nouvelle classe de schémas qui est en cours de développement.

5.2 Modèle cinétique

Le spray est constitué de gouttes supposées sphériques caractérisées par un paramètre de géométrie ϕ , une vitesse u_l et une température T_l . Il peut être décrit par sa fonction de distribution $f^\phi(t, x, \phi, u_l, T_l)$ appelée aussi densité de probabilité, de sorte que $f^\phi dx d\phi du_l dT_l$ représente le nombre probable, normalisé, de gouttes à l'instant t , dans le volume élémentaire $dx d\phi du_l dT_l$ autour du point (x, ϕ, u_l, T_l) . Le paramètre ϕ représente par exemple le volume V comme dans [GST93], la surface S comme dans [Dom01] ou le rayon R ($f^R dR = f^S dS = f^V dV$).

La fonction f^ϕ satisfait l'équation de transport suivante [Wil58] :

$$\partial_t f^\phi + \partial_x \cdot (u_l f^\phi) + \partial_\phi (R_\phi f^\phi) + \partial_{u_l} \cdot (F f^\phi) + \partial_{T_l} (E f^\phi) = \Gamma + Q \quad (5.1)$$

où $R_\phi(t, x, \phi, u_l, T_l)$ est le taux de changement de ϕ dû à l'évaporation, $F(t, x, \phi, u_l, T_l)$ est la force de traînée du gaz sur les gouttes, $E(t, x, \phi, u_l, T_l)$ est le taux d'échange de chaleur entre les deux milieux, $\Gamma(t, x, \phi, u_l, T_l, f^\phi)$ est l'opérateur de collision menant à la coalescence et à la dissociation des gouttes et $Q(t, x, \phi, u_l, T_l, f^\phi)$ est l'opérateur de collisions élastiques.

Pour réaliser l'analyse numérique des méthodes eulériennes dérivées du modèle cinétique, on considère une configuration purement 1D où le spray poly-dispersé est injecté dans un gaz chaud, de manière stationnaire. Le gaz est à vitesse constante $u > 0$, sa composition et sa température sont aussi constantes (on ne tient pas compte de l'influence du liquide sur le gaz dans la mesure où seule la description de l'évaporation des gouttes nous intéresse). Le spray, quant à lui, est injecté à la même vitesse que le gaz et reste donc en équilibre dynamique. De plus, on suppose que les gouttelettes sont initialement à la température d'équilibre et restent donc à cette température. Seule reste à considérer l'évaporation.

Ainsi, les gouttes ont toutes la même vitesse et la même température et l'écoulement est stationnaire. La fonction de distribution peut donc être réduite à la densité $f^\phi(x, \phi)$ de gouttes au point x en fonction de leur taille ϕ . D'autre part, d'après la loi du d^2 , à vitesse, température et composition du gaz constantes, la surface de la goutte décroît linéairement (i.e. le taux R_S de variation de surface dû à l'évaporation est constant). Le paramètre $a = -\frac{R_S}{u}$ est alors une constante positive et l'équation (5.1) se réduit à :

$$\partial_x f^S - a \partial_S f^S = 0. \quad (5.2)$$

On remarquera que la variable d'espace x joue le rôle attribué habituellement au temps.

On notera la condition 'initiale' $f^S(x=0, S) = f_0(S)$, où f_0 est une fonction d'intégrale 1 sur \mathbb{R}^+ , qui sera supposée au moins C^2 sur \mathbb{R}^+ et à support compact inclus dans $[0, S_{max}]$ (on verra aussi que cette étude se généralise au cas où f_0 est exponentiellement décroissante à l'infini, comme dans [LSN⁺02]). La solution de l'équation d'advection (5.2) à vitesse constante est alors $f^S(x, S) = f_0(S + ax)$.

Adimensionnons le système, afin de faire disparaître la constante a . Notons les nouvelles variables et fonctions :

$$\bar{S} = \frac{S}{S_{max}} \quad \bar{x} = \frac{ax}{S_{max}} \quad \bar{f}^{\bar{S}}(\bar{x}, \bar{S}) = S_{max} f^S(x, S) \quad \bar{f}_0(\bar{S}) = S_{max} f_0(S). \quad (5.3)$$

Le problème s'écrit alors :

$$\partial_{\bar{x}} \bar{f}^{\bar{S}} - \partial_{\bar{S}} \bar{f}^{\bar{S}} = 0, \quad \bar{f}^{\bar{S}}(\bar{x}=0, \bar{S}) = \bar{f}_0(\bar{S}). \quad (5.4)$$

Dans la suite, pour simplifier les notations, \bar{S} , \bar{x} , $\bar{f}^{\bar{S}}$ et $\bar{f}_0(\bar{S})$ seront notés encore S , x , f^S et f_0 . On notera aussi $R = S^{1/2}$ et $V = S^{3/2}$ les rayon et volume adimensionnés. D'autre part, le support de f_0 est alors inclus dans $[0, 1]$.

Cependant, on ne s'intéresse pas directement à la distribution f^ϕ mais plutôt à la densité massique de gouttes m et aussi aux densités massiques m_i dans des sections $[\phi_{i-1}, \phi_i]$, variables importantes pour décrire l'évaporation. Adimensionnées par $\rho_l \frac{S_{max}^{3/2}}{6\sqrt{\pi}}$ où ρ_l est la densité volumique du liquide, elles sont définies par :

$$m_i(x) = \int_{\phi_{i-1}}^{\phi_i} V(\phi) f^\phi(x, \phi) d\phi, \quad m(x) = \sum_{i=1}^N m_i(x) = \int_0^{+\infty} V(\phi) f^\phi(x, \phi) d\phi, \quad (5.5)$$

où $V(\phi)$ est le volume adimensionné correspondant à ϕ (on notera de même $S(\phi)$ et $R(\phi)$ la surface et le rayon adimensionnés correspondant à ϕ). Dans la suite, on note Ψ la variable en laquelle les sections $[\Psi_{i-1}, \Psi_i]$ réalisent une partition uniforme de $[0, 1]$ avec pour tout $i \in \{0, \dots, N\}$, $\Psi_i = i\Delta\Psi$ (et donc $\Delta\Psi = 1/N$). On supposera que $\Psi = R^\alpha$ avec $\alpha > 0$ (c'est par exemple, à un facteur multiplicatif près, le rayon, la surface ou le volume des gouttes).

On veut donc comparer, sur cette configuration, le modèle cinétique pour lequel on a une solution analytique, et des modèles multi-fluides eulériens qui permettent une approximation des densités massiques de gouttes pour chaque section.

5.3 Analyse Numérique de la méthode sectionnelle

Dans un premier temps, nous rappelons, dans la configuration étudiée, le schéma de cette méthode multi-fluides eulérienne qui permet une approximation directe des densités massiques de gouttes pour chaque section. Puis on détermine l'ordre de cette méthode multi-fluides. Dans le cas de θ -schémas pour la discrétisation en espace, on donne des conditions sur le pas d'espace et de taille de gouttes qui permettent la stabilité du schéma et la positivité des variables. Ces résultats suggèrent et justifient la 'bonne' façon de discrétiser l'espace des phases correspondant à la taille de gouttes et la 'bonne variable' de taille à considérer.

5.3.1 Méthode sectionnelle pour la configuration étudiée

Dans la configuration étudiée, le système semi-cinétique se réduit à l'équation (5.4). L'approche sectionnelle est une méthode de type volumes finis sur l'équation cinétique. Elle donne une approximation \tilde{m}_i des m_i par le schéma semi-discrétisé suivant :

$$\partial_x \tilde{m}_i(x) = F_{i+1} \tilde{m}_{i+1}(x) - (F_i + M_i) \tilde{m}_i(x), \quad \tilde{m}_i(0) = m_i(0). \quad (5.6)$$

Le terme en M_i représente le flux de masse entre la section i et le gaz. Le terme en F_i représente le flux de masse entre la section i et la section $i-1$. Ces coefficients M_i et F_i sont déterminés par un choix préliminaire de la forme κ_i^ϕ de la fonction de distribution dans chaque section : la fonction de distribution f^ϕ en x est approchée par $\kappa_i^\phi(\phi) \tilde{m}_i(x)$ pour $\phi \in [\phi_{i-1}, \phi_i]$. On a alors :

$$\forall i \in \{1, \dots, N\} \quad F_i = \frac{V(\phi_{i-1})}{S'(\phi_{i-1})} \kappa_i^\phi(\phi_{i-1}), \quad M_i = \int_{\phi_{i-1}}^{\phi_i} \frac{V'(\phi)}{S'(\phi)} \kappa_i^\phi(\phi) d\phi \quad (5.7)$$

et $F_{N+1} = 0$; les fonctions κ_i^ϕ vérifient :

$$\int_{\phi_{i-1}}^{\phi_i} V(\phi) \kappa_i^\phi(\phi) d\phi = 1. \quad (5.8)$$

La forme de la fonction f^ϕ pouvant varier, on choisit κ_i^ϕ constant dans la section. Reste à déterminer pour quelle variable ϕ ($\kappa_i^R dR = \kappa_i^S dS = \kappa_i^\phi d\phi$). On se place dans le cas général où $\phi = R^\beta$ avec $\beta > 0$. La constante κ_i^ϕ est alors donnée par :

$$\kappa_i^\phi = \frac{1}{\int_{\phi_{i-1}}^{\phi_i} \phi^{3/\beta} d\phi}. \quad (5.9)$$

Les coefficients F_i et M_i se réécrivent alors :

$$\forall i \in \{1, \dots, N\} \quad F_i = \frac{\beta}{2} \frac{\phi_{i-1}^{1+1/\beta}}{\int_{\phi_{i-1}}^{\phi_i} \phi^{3/\beta} d\phi}, \quad M_i = \frac{3}{2} \frac{\int_{\phi_{i-1}}^{\phi_i} \phi^{1/\beta} d\phi}{\int_{\phi_{i-1}}^{\phi_i} \phi^{3/\beta} d\phi}. \quad (5.10)$$

5.3.2 Ordre du schéma semi-discrétisé

On commence par déterminer l'ordre du schéma semi-discrétisé (5.6). Il nous faut donc évaluer les erreurs locales γ_i :

$$\gamma_i(x) = \partial_x m_i(x) + (F_i + M_i) m_i(x) - F_{i+1} m_{i+1}(x), \quad (5.11)$$

où les m_i ont été définis au paragraphe 2.1. Pour calculer l'ordre global (c'est à dire l'ordre pour le calcul de la densité massique totale du spray), il faudra évaluer $\gamma(x) = \sum_i \gamma_i(x)$.

Commençons par calculer les γ_i . L'équation vérifiée par $V(\phi) f^\phi$ est la suivante :

$$\partial_x (V(\phi) f^\phi) = \partial_\phi \left(\frac{V(\phi)}{S'(\phi)} f^\phi \right) - \frac{V'(\phi)}{S'(\phi)} f^\phi. \quad (5.12)$$

On calcule $\partial_x m_i$ en intégrant l'équation précédente sur la section i :

$$\partial_x m_i(x) = \frac{\beta}{2} \left[\phi^{1+1/\beta} f^\phi \right]_{\phi_{i-1}}^{\phi_i} - \frac{3}{2} \int_{\phi_{i-1}}^{\phi_i} \phi^{1/\beta} f^\phi(x, \phi) d\phi. \quad (5.13)$$

Introduisons la différence $h_i(x, \phi)$ entre la distribution réelle $f^\phi(x, \phi)$ et la distribution approchée $m_i(x)\kappa_i^\phi(\phi)$. A cause de la forme de κ_i^ϕ donnée par (5.9), la fonction h_i s'écrit :

$$h_i(x, \phi) = \frac{\int_{\phi_{i-1}}^{\phi_i} \varphi^{3/\beta} [f^\phi(x, \phi) - f^\phi(x, \varphi)] d\varphi}{\int_{\phi_{i-1}}^{\phi_i} \varphi^{3/\beta} d\varphi}. \quad (5.14)$$

En introduisant l'équation (5.13) dans l'expression (5.11) de γ_i , on obtient finalement :

$$\gamma_i(x) = \frac{\beta}{2} \phi_i^{1+1/\beta} h_{i+1}(x, \phi_i) - \frac{\beta}{2} \phi_{i-1}^{1+1/\beta} h_i(x, \phi_{i-1}) - \frac{3}{2} \int_{\phi_{i-1}}^{\phi_i} \phi^{1/\beta} h_i(x, \phi) d\phi, \quad (5.15)$$

où on a posé $h_{N+1} = 0$. On notera de plus $\Delta_i = \phi_i - \phi_{i-1}$.

Ordre global

Donnons tout d'abord un résultat d'ordre global :

Théorème 5.1 *Si $f^\phi(x, \phi)$ est C^1 en la variable ϕ , alors le schéma semi-discrétisé (5.6) est globalement d'ordre $\frac{2\beta+1}{\alpha} < 1$ en $\Delta\Psi$ pour $2\beta+1-\alpha < 0$ et, pour $2\beta+1-\alpha = 0$, on a $\gamma(x) = O(\Delta\Psi \ln \Delta\Psi)$. Pour $2\beta+1-\alpha > 0$, le schéma est d'ordre 1 et on a :*

$$|\gamma(x)| \leq \frac{3}{2} \left\| \frac{\partial f^\phi}{\partial \phi} \right\|_\infty u_N \Delta\Psi \quad (5.16)$$

où u_N est une suite qui tend vers $\frac{\beta^2}{\alpha(2\beta+1-\alpha)}$ quand le nombre de sections N tend vers $+\infty$.

Démonstration. – En sommant les équations (5.15), on obtient :

$$\gamma(x) = -\frac{3}{2} \sum_{i=1}^N \int_{\phi_{i-1}}^{\phi_i} \phi^{1/\beta} h_i(x, \phi) d\phi.$$

En majorant uniquement $|f^\phi(x, \phi) - f^\phi(x, \varphi)|$, pour ϕ et φ dans $[\phi_{i-1}, \phi_i]$, par $\left\| \frac{\partial f^\phi}{\partial \phi} \right\|_\infty \Delta_i$, on a immédiatement :

$$|\gamma(x)| \leq \frac{3}{2} \left\| \frac{\partial f^\phi}{\partial \phi} \right\|_\infty u_N \Delta\Psi,$$

avec

$$u_N = \frac{1}{\Delta\Psi} \sum_{i=1}^N \Delta_i \int_{\phi_{i-1}}^{\phi_i} \phi^{1/\beta} d\phi.$$

Il reste alors à montrer le résultat de convergence sur u_N .

Comme $\psi_i = i \Delta\Psi = i/N$, on a immédiatement, pour u_N :

$$u_N = \frac{\beta}{1+\beta} N^{\frac{\alpha-2\beta-1}{\alpha}} \sum_{k=0}^{N-1} \left[(k+1)^{\frac{\beta}{\alpha}} - k^{\frac{\beta}{\alpha}} \right] \left[(k+1)^{\frac{\beta+1}{\alpha}} - k^{\frac{\beta+1}{\alpha}} \right].$$

Il existe donc des réels λ_k et μ_k , dans $]k, k+1[$ tels que :

$$u_N = \frac{\beta}{1+\beta} N^{\frac{\alpha-2\beta-1}{\alpha}} + \frac{\beta^2}{\alpha^2} N^{\frac{\alpha-2\beta-1}{\alpha}} \left[\sum_{k=1}^{N-1} \lambda_k^{\frac{\beta}{\alpha}-1} \mu_k^{\frac{\beta+1}{\alpha}-1} \right].$$

Dans les cas où $\alpha \leq \beta$ et où $\alpha \geq \beta + 1$, c'est à dire quand les exposants $\frac{\beta}{\alpha} - 1$ et $\frac{\beta+1}{\alpha} - 1$ sont de même signe, on peut encadrer u_N entre les 2 valeurs suivantes :

$$\frac{\beta}{1+\beta} N^{\frac{\alpha-2\beta-1}{\alpha}} + \frac{\beta^2}{\alpha^2} N^{\frac{\alpha-2\beta-1}{\alpha}} v_{N-1}, \quad \frac{\beta}{1+\beta} N^{\frac{\alpha-2\beta-1}{\alpha}} + \frac{\beta^2}{\alpha^2} N^{\frac{\alpha-2\beta-1}{\alpha}} v_N,$$

avec

$$v_N = \sum_{k=1}^N k^{\frac{2\beta+1-\alpha}{\alpha}-1}.$$

Ainsi, si $2\beta + 1 - \alpha < 0$, alors v_N est convergente et u_N est équivalent, quand N tend vers l'infini, à un terme en $N^{\frac{\alpha-2\beta-1}{\alpha}}$, c'est à dire que :

$$\gamma(x) = O\left(\Delta \Psi^{\frac{2\beta+1}{\alpha}}\right),$$

et l'ordre global est $\frac{2\beta+1}{\alpha} < 1$.

Si $2\beta + 1 - \alpha = 0$, alors v_N est équivalent, quand N tend vers l'infini, à $\ln N$ et $\gamma(x) = O(-\Delta \Psi \ln \Delta \Psi)$.

Enfin, si $2\beta + 1 - \alpha > 0$, alors u_N converge vers $\frac{\beta^2}{\alpha(2\beta + 1 - \alpha)}$.

Dans le cas où $\beta < \alpha < \beta + 1$, on a $2\beta + 1 - \alpha > \beta > 0$ et on peut minorer $\lambda_k^{\frac{\beta}{\alpha}-1} \mu_k^{\frac{\beta+1}{\alpha}-1}$ par :

$$\lambda_k^{\frac{\beta}{\alpha}-1} \mu_k^{\frac{\beta+1}{\alpha}-1} \geq (k+1)^{\frac{\beta}{\alpha}-1} k^{\frac{\beta+1}{\alpha}-1} = \frac{k^{\frac{2\beta+1-\alpha}{\alpha}-1}}{\left(1+\frac{1}{k}\right)^{1-\frac{\beta}{\alpha}}} \geq k^{\frac{2\beta+1-\alpha}{\alpha}-1} - \left(1-\frac{\beta}{\alpha}\right) k^{\frac{2\beta+1-\alpha}{\alpha}-2},$$

et le majorer par :

$$\begin{aligned} \lambda_k^{\frac{\beta}{\alpha}-1} \mu_k^{\frac{\beta+1}{\alpha}-1} &\leq k^{\frac{\beta}{\alpha}-1} (k+1)^{\frac{\beta+1}{\alpha}-1} = k^{\frac{2\beta+1-\alpha}{\alpha}-1} \left(1+\frac{1}{k}\right)^{\frac{\beta+1}{\alpha}-1} \\ &\leq k^{\frac{2\beta+1-\alpha}{\alpha}-1} + \left(\frac{2\beta+1}{\alpha} - 1\right) 2^{\frac{\beta+1-\alpha}{\alpha}-1} k^{\frac{2\beta+1-\alpha}{\alpha}-2}. \end{aligned}$$

Ainsi, u_N est équivalent au terme suivant :

$$\frac{\beta^2}{\alpha^2} N^{\frac{\alpha-2\beta-1}{\alpha}} \frac{\alpha}{2\beta+1-\alpha} N^{\frac{2\beta+1-\alpha}{\alpha}} = \frac{\beta^2}{\alpha(2\beta+1-\alpha)}.$$

On a donc bien l'ordre 1 dans ce cas et le théorème est démontré. \square

Remarque 1 On a supposé que $f^\phi(x, \cdot)$ est C^2 en ϕ sur \mathbb{R}^+ et à support compact, par exemple. Or on a, ici, la relation entre f^ϕ et f_0 :

$$f^\phi(x, \phi) = \frac{2}{\beta} \phi^{\frac{2}{\beta}-1} f_0\left(\phi^{\frac{2}{\beta}} + x\right).$$

Ainsi, si on suppose que f_0 est une fonction au moins C^2 sur \mathbb{R}^+ et à support compact, alors $f^\phi(x, \cdot)$ est à support compact. Cependant, pour une fonction f , C^2 sur \mathbb{R}^+ , les fonctions g_x , définies par $g_x(\phi) = \phi^\delta f(\phi^{\frac{2}{\beta}} + x)$ sont définies et continues sur \mathbb{R}^+ pour chaque $x \geq 0$ si et seulement si $\delta \geq 0$ ou $f = 0$. Ici f_0

et ses dérivées sont non nulles et on a :

$$\begin{aligned}\partial_\phi f^\phi(x, \phi) &= \frac{2}{\beta} \left[\left(\frac{2}{\beta} - 1 \right) \phi^{2/\beta-2} f_0(\phi^{2/\beta} + x) + \frac{2}{\beta} \phi^{2(2/\beta-1)} f'_0(\phi^{2/\beta} + x) \right], \\ \partial_\phi^2 f^\phi(x, \phi) &= \frac{2}{\beta} \left[\left(\frac{2}{\beta} - 1 \right) \left(\frac{2}{\beta} - 2 \right) \phi^{2/\beta-3} f_0(\phi^{2/\beta} + x) + 3 \frac{2}{\beta} \left(\frac{2}{\beta} - 1 \right) \phi^{4/\beta-3} f'_0(\phi^{2/\beta} + x) \right. \\ &\quad \left. + \left(\frac{2}{\beta} \right)^2 \phi^{3(2/\beta-1)} f''_0(\phi^{2/\beta} + x) \right].\end{aligned}$$

Donc, $f^\phi(x, \cdot)$ est C^1 pour chaque $x \geq 0$, si et seulement si $\beta = 2$ ou $\beta \leq 1$ et $f^\phi(x, \cdot)$ est C^2 pour chaque $x \geq 0$ si et seulement si $\beta = 2$ ou $\beta = 1$ ou $\beta \leq 2/3$. On considère alors les deux cas : $\beta = 2$ et $\beta \leq 1$. En particulier, dans le cas $\beta \leq 1$, l'hypothèse $f_0 C^1$ est plus forte que l'hypothèse $\partial_\phi f^\phi C^1$. On peut ainsi obtenir un ordre 1 pour $\beta - \alpha + 2 > 0$.

Ordre local

On a aussi le résultat sur l'ordre local dans le cas particulier $\alpha = \beta$, où on a nécessairement un ordre global égal à 1, moyennant les conditions de régularité de f^ϕ .

Mais auparavant, afin que les calculs soient plus faciles à effectuer, on montre le lemme suivant :

Lemme 5.2 Soient f et g deux fonction définies sur un intervalle $[a, b]$ telles que f est C^1 sur $[a, b]$, f' étant dérivable sur $]a, b[$ et g est C^0 sur $[a, b]$ et dérivable sur $]a, b[$. On suppose de plus que g' ne s'annule pas sur $]a, b[$. Alors, il existe un réel c dans $]a, b[$ tel que :

$$\frac{f(b) - f(a) - (b - a) f'(b)}{g(b) - g(a)} = -(c - a) \frac{f''(c)}{g'(c)}.$$

Démonstration. – On introduit la fonction h définie sur $[a, b]$ par :

$$h(x) = f(x) - f(a) - (x - a) f'(x) - K[g(x) - g(a)],$$

où K est choisi de sorte que $h(b) = 0$. On peut appliquer le théorème de Rolle à h et on obtient le résultat du lemme. \square

Théorème 5.3 Dans le cas $\alpha = \beta$, si $f^\phi(x, \phi)$ est C^2 en la variable ϕ , alors le schéma semi-discrétisé (5.6) localement d'ordre 2 en $\Delta\Psi$. Plus précisément :

$$|\gamma_i(x)| \leq \left[\left(5 + \frac{\beta}{2} \right) \left\| \frac{\partial f^\phi}{\partial \phi} \right\|_\infty + \frac{\beta}{2} \left(1 + \frac{3}{\beta} \Delta\Psi \right) \left\| \frac{\partial^2 f^\phi}{\partial \phi^2} \right\|_\infty \right] (\Delta\Psi)^2. \quad (5.17)$$

Démonstration. – Ici, on a $\phi = \Psi$ et $\Delta_i = \Delta\Psi$. On introduit une fonction continue \bar{h} qui va coïncider en ϕ_{i-1} avec la différence $h_i(x, \phi)$ entre les distributions réelle et approchée :

$$\bar{h}(x, \phi) = f^\phi(x, \phi) - \frac{\int_\phi^{\phi+\Delta\Psi} \sigma^{3/\beta} f^\phi(x, \sigma) d\sigma}{\int_\phi^{\phi+\Delta\Psi} \sigma^{3/\beta} d\sigma}. \quad (5.18)$$

A partir de l'équation (5.15), on obtient γ_i en fonction de \bar{h} :

$$\gamma_i(x) = \frac{\beta}{2} \int_{\phi_{i-1}}^{\phi_i} \phi^{1+1/\beta} \partial_\phi \bar{h}(x, \phi) d\phi + \frac{\beta+1}{2} \int_{\phi_{i-1}}^{\phi_i} \phi^{1/\beta} \bar{h}(x, \phi) d\phi - \frac{3}{2} \int_{\phi_{i-1}}^{\phi_i} \phi^{1/\beta} h_i(x, \phi) d\phi. \quad (5.19)$$

Les deux derniers termes de cette inégalité se majorent facilement car, pour $\phi \in [\phi_{i-1}, \phi_i]$, une formule de Taylor sur $f^\phi(x, \cdot)$ donne :

$$|h_i(x, \phi)| \leq \left\| \frac{\partial f^\phi}{\partial \phi} \right\|_\infty \Delta\Psi, \quad |\bar{h}(x, \phi)| \leq \left\| \frac{\partial f^\phi}{\partial \phi} \right\|_\infty \Delta\Psi.$$

Ainsi, on a :

$$\left| \int_{\phi_{i-1}}^{\phi_i} \phi^{1/\beta} h_i(x, \phi) d\phi \right| \leq \left\| \frac{\partial f^\phi}{\partial \phi} \right\|_\infty \Delta\Psi \int_{\phi_{i-1}}^{\phi_i} \phi^{1/\beta} d\phi \leq \phi_i^{1/\beta} \left\| \frac{\partial f^\phi}{\partial \phi} \right\|_\infty (\Delta\Psi)^2.$$

Le majorant est le même, pour l'intégrale intervenant dans le deuxième terme de (5.19).

Majorons alors le premier terme de (5.19). Commençons par réécrire la fonction $\partial_\phi \bar{h}(x, \phi)$:

$$\begin{aligned} \partial_\phi \bar{h}(x, \phi) &= \frac{\partial_\phi f^\phi(x, \phi) \int_\phi^{\phi+\Delta\Psi} \sigma^{3/\beta} d\sigma - (\phi + \Delta\Psi)^{3/\beta} [f^\phi(x, \phi + \Delta\Psi) - f^\phi(x, \phi)]}{\int_\phi^{\phi+\Delta\Psi} \sigma^{3/\beta} d\sigma} \\ &\quad - \frac{[(\phi + \Delta\Psi)^{3/\beta} - \phi^{3/\beta}] \int_\phi^{\phi+\Delta\Psi} \sigma^{3/\beta} [f^\phi(x, \phi) - f^\phi(x, \sigma)] d\sigma}{\left(\int_\phi^{\phi+\Delta\Psi} \sigma^{3/\beta} d\sigma \right)^2}. \end{aligned}$$

Dans la première fraction, on utilise un développement de Taylor de f^ϕ : il existe un réel ϕ_c dans $]\phi, \phi + \Delta\Psi[$ tel que :

$$f^\phi(x, \phi + \Delta\Psi) = f^\phi(x, \phi) + \Delta\Psi \partial_\phi f^\phi(x, \phi) + \frac{(\Delta\Psi)^2}{2} \partial_\phi^2 f^\phi(x, \phi_c).$$

Ainsi, on a :

$$\begin{aligned} |\phi \partial_\phi \bar{h}(x, \phi)| &\leq \left\| \frac{\partial f^\phi}{\partial \phi} \right\|_\infty \left| \phi \frac{\int_\phi^{\phi+\Delta\Psi} \sigma^{3/\beta} d\sigma - \Delta\Psi (\phi + \Delta\Psi)^{3/\beta}}{\int_\phi^{\phi+\Delta\Psi} \sigma^{3/\beta} d\sigma} \right| \\ &\quad + \frac{(\Delta\Psi)^2}{2} \left\| \frac{\partial^2 f^\phi}{\partial \phi^2} \right\|_\infty \phi \frac{(\phi + \Delta\Psi)^{3/\beta}}{\int_\phi^{\phi+\Delta\Psi} \sigma^{3/\beta} d\sigma} \\ &\quad + \left\| \frac{\partial f^\phi}{\partial \phi} \right\|_\infty \Delta\Psi \phi \frac{(\phi + \Delta\Psi)^{3/\beta} - \phi^{3/\beta}}{\int_\phi^{\phi+\Delta\Psi} \sigma^{3/\beta} d\sigma}. \end{aligned} \quad (5.20)$$

Le premier terme de (5.20) peut être majoré grâce au lemme 5.2 : on sait qu'il existe un réel c_1 dans $]0, \Delta\Psi[$ tel que

$$\left| \phi \frac{\int_\phi^{\phi+\Delta\Psi} \sigma^{3/\beta} d\sigma - \Delta\Psi (\phi + \Delta\Psi)^{3/\beta}}{\int_\phi^{\phi+\Delta\Psi} \sigma^{3/\beta} d\sigma} \right| = \left| -c_1 \phi \frac{\frac{3}{\beta} (\phi + c_1)^{3/\beta-1}}{(\phi + c_1)^{3/\beta}} \right| = \left| c_1 \frac{3}{\beta} \frac{\phi}{\phi + c_1} \right| \leq \frac{3}{\beta} \Delta\Psi.$$

De la même manière, on peut majorer le troisième terme de (5.20) : il existe un réel c_2 dans $]0, \Delta\Psi[$ tel que

$$\phi \frac{(\phi + \Delta\Psi)^{3/\beta} - \phi^{3/\beta}}{\int_\phi^{\phi+\Delta\Psi} \sigma^{3/\beta} d\sigma} = \phi \frac{\frac{3}{\beta} c_2^{3/\beta-1}}{c_2^{3/\beta}} = \frac{3}{\beta} \frac{\phi}{c_2} \leq \frac{3}{\beta}.$$

Enfin, pour le deuxième terme de (5.20), on remarque que :

$$\phi \frac{(\phi + \Delta\Psi)^{3/\beta}}{\int_{\phi}^{\phi+\Delta\Psi} \sigma^{3/\beta} d\sigma} = \phi \frac{(\phi + \Delta\Psi)^{3/\beta} - \phi^{3/\beta}}{\int_{\phi}^{\phi+\Delta\Psi} \sigma^{3/\beta} d\sigma} + \phi \frac{\phi^{3/\beta}}{\int_{\phi}^{\phi+\Delta\Psi} \sigma^{3/\beta} d\sigma} \leq \frac{3}{\beta} + \frac{\phi}{\Delta\Psi}.$$

On obtient finalement la majoration de $|\phi \partial_{\phi} \bar{h}(x, \phi)|$:

$$|\phi \partial_{\phi} \bar{h}(x, \phi)| \leq \Delta\Psi \left[\frac{6}{\beta} \left\| \frac{\partial f^{\phi}}{\partial \phi} \right\|_{\infty} + \frac{1}{2} \left(1 + \frac{3}{\beta} \Delta\Psi \right) \left\| \frac{\partial^2 f^{\phi}}{\partial \phi^2} \right\|_{\infty} \right].$$

D'où la majoration de l'intégrale dans le premier terme de (5.19) :

$$\int_{\phi_{i-1}}^{\phi_i} \phi^{1+1/\beta} \partial_{\phi} \bar{h}(x, \phi) d\phi \leq \left[\frac{6}{\beta} \left\| \frac{\partial f^{\phi}}{\partial \phi} \right\|_{\infty} + \frac{1}{2} \left(1 + \frac{3}{\beta} \Delta\Psi \right) \left\| \frac{\partial^2 f^{\phi}}{\partial \phi^2} \right\|_{\infty} \right] (\Delta\Psi)^2.$$

Le théorème est donc démontré. \square

Remarque 2 Dans le cas $\alpha \neq \beta$, lorsqu'on a l'ordre 1 et si $f^{\phi}(x, \phi)$ est C^2 en la variable ϕ , on peut montrer de la même manière que $|\gamma_i|$ est majoré par une constante multipliée par $(\Delta\Psi)^{\frac{2\beta+1}{\alpha}}$ si $i = 1$ et $F_{i-1}^{2\beta+1-2\alpha} (\Delta\Psi)^2$ sinon. Pour cela, il suffit d'introduire des fonctions \bar{h}_i coïncidant en ϕ_{i-1} et ϕ_i avec h_i et définies par :

$$\bar{h}_i(x, \phi) = \frac{\int_{\phi}^{\phi+\Delta_i(\phi)} \varphi^{3/\beta} [f^{\phi}(x, \phi) - f^{\phi}(v, \varphi)] d\varphi}{\int_{\phi}^{\phi+\Delta_i(\phi)} \varphi^{3/\beta} d\varphi},$$

où $\Delta_i(\phi)$ vaut Δ_i en ϕ_{i-1} et Δ_{i+1} en ϕ_i :

$$\Delta_i(\phi) = \Delta_i + (\phi - \phi_{i-1}) \frac{\Delta_{i+1} - \Delta_i}{\Delta_i}.$$

On écrit encore γ_i en fonction des \bar{h}_i et on peut majorer.

5.3.3 Théta-schéma : stabilité et positivité

On introduit la discrétisation en $x : x_k = k\Delta x$ avec $\Delta x > 0$ et $k \in \mathbb{N}$. Le θ -schéma correspondant à (5.6) permet d'obtenir une approximation \hat{m}_i^k des $m_i^k = m_i(x_k)$ par :

$$\frac{\hat{m}_i^{k+1} - \hat{m}_i^k}{\Delta x} = F_{i+1}[\theta \hat{m}_{i+1}^{k+1} + (1-\theta) \hat{m}_{i+1}^k] - (F_i + M_i)[\theta \hat{m}_i^{k+1} + (1-\theta) \hat{m}_i^k], \quad \hat{m}_i^0 = m_i^0, \quad (5.21)$$

où θ est fixé entre 0 et 1. Ce schéma se met sous la forme :

$$A_{\theta} \hat{m}^{k+1} = B_{\theta} \hat{m}^k, \quad (5.22)$$

où $\hat{m}^k = (\hat{m}_1^k, \hat{m}_2^k, \dots, \hat{m}_N^k)^t$ et où les matrices A_{θ} et B_{θ} sont bidiagonales, les coefficients diagonaux étant $1 + \theta\Delta x(F_i + M_i)$ pour A_{θ} et $1 - (1-\theta)\Delta x(F_i + M_i)$ pour B_{θ} avec $i \in \{1, \dots, N\}$; les coefficients de la diagonale supérieure sont $-\theta\Delta x F_i$ pour A_{θ} et $(1-\theta)\Delta x F_i$ pour B_{θ} avec $i \in \{2, \dots, N\}$.

On détermine une condition de type CFL pour la stabilité du schéma (5.22) ainsi qu'une condition pour que le schéma donne des valeurs toujours positives des densités massiques de gouttes \hat{m}_i^k . Pour donner ces conditions, il faut tout d'abord donner une propriété sur les coefficients $M_i + F_i$ et plus précisément, sur $\mathcal{M} = \max \{M_i + F_i, \quad i \in \{1, \dots, N\}\}$.

Lemme 5.4 Coefficients – Si $\alpha < 2$ alors \mathcal{M} varie comme $(\Delta\Psi)^{-2/\alpha}$.

Si $\alpha = 2$ alors $\mathcal{M} = F_1 + M_1 = \frac{3}{2} \frac{3+\beta}{1+\beta} (\Delta\Psi)^{-1}$.

Si $\alpha > 2$ alors, pour N 'assez grand', on a $\mathcal{M} = F_N + M_N$ et \mathcal{M} varie comme $(\Delta\Psi)^{-1}$.

Démonstration. – On commence par écrire les coefficients sous la forme :

$$M_i + F_i = \frac{1}{2} \frac{3+\beta}{1+\beta} (\Delta\Psi)^{-2/\alpha} \lambda(i-1), \quad \lambda(x) = \frac{3(x+1)^{\frac{1+\beta}{\alpha}} + (\beta-2)x^{\frac{1+\beta}{\alpha}}}{(x+1)^{\frac{3+\beta}{\alpha}} - x^{\frac{3+\beta}{\alpha}}}. \quad (5.23)$$

La fonction λ est équivalente en $+\infty$ à $\alpha \frac{\beta+1}{\beta+3} x^{1-2/\alpha}$.

Si $\alpha > 2$, $\lambda(x)$ tend donc vers $+\infty$ quand s tend vers $+\infty$. Ainsi, si N est suffisamment grand, alors $\lambda(i-1)$ est maximale pour $i = N$ et on a $\mathcal{M} = F_N + M_N$ qui est équivalent à N quand N tend vers $+\infty$. Cela montre le troisième point du théorème puisque $\Delta\Psi = 1/N$.

Si $\alpha < 2$ alors λ est une fonction continue sur \mathbb{R}^+ de limite 0 en $+\infty$. Elle est donc bornée et \mathcal{M} varie comme $(\Delta\Psi)^{-2/\alpha}$.

Si $\alpha = 2$, on réalise le changement de variable suivant :

$$\forall y \in [0, 1[\quad \mu(y) = \lambda\left(\frac{y}{1-y}\right) = \frac{1-y}{1-y^{\frac{3+\beta}{2}}} [3 + (\beta-2)y^{\frac{1+\beta}{2}}] \quad (5.24)$$

en remarquant que la fonction qui à y associe $\frac{y}{1-y}$ est strictement croissante de $[0, 1[$ dans \mathbb{R}^+ . On va montrer que μ est maximale en 0.

Pour tout $y \in [0, 1[$, on a $y^{(1+\beta)/2} \leq y$. Ainsi, pour $\beta \leq 2$ on a $\mu(y) \leq 3 + (\beta-2)y^{(1+\beta)/2} \leq 3 = \mu(0)$ et μ est maximale en 0.

Pour $\beta > 2$, on a :

$$\mu(0) - \mu(y) = \frac{y}{1-y^{\frac{3+\beta}{2}}} [3 - \varphi(y)], \quad \varphi(y) = (\beta-2)y^{\frac{\beta-1}{2}} + (5-\beta)y^{\frac{1+\beta}{2}} \quad (5.25)$$

et la dérivée de φ est alors :

$$\varphi'(y) = \frac{y^{\frac{\beta-3}{2}}}{2} [(\beta-2)(\beta-1) - (\beta-5)(1+\beta)] \geq 0 \quad (5.26)$$

Ainsi φ est inférieure à $\varphi(1) = 3$ sur $[0, 1[$ et μ est maximale en 0 à cause de (5.25). Cela montre le deuxième point du théorème. \square

On a le résultat de stabilité suivant, pour le schéma (5.22) :

Théorème 5.5 Stabilité – Supposons que les $M_i + F_i$ sont positifs et 2 à 2 distincts.

Si $\theta \geq 1/2$, alors le schéma (5.22) est inconditionnellement stable.

Si $\theta < 1/2$, alors le schéma (5.22) est stable si et seulement si $\mathcal{M} \leq \frac{2}{(1-2\theta)\Delta x}$.

Démonstration. – Pour montrer ce résultat, on considère la matrice $C = A_\theta^{-1}B_\theta$. Celle-ci est triangulaire supérieure et ses termes diagonaux s'écrivent :

$$c_{ii} = \varphi_\theta(F_i + M_i), \quad \varphi_\theta(y) = \frac{1 - y(1 - \theta)\Delta x}{1 + y\theta\Delta x}. \quad (5.27)$$

La fonction φ_θ est continue et strictement décroissante sur \mathbb{R}^+ . Les $M_i + F_i$ étant 2 à 2 distincts, les c_{ii} le sont aussi. Donc C est diagonalisable, ses valeurs propres étant les c_{ii} . Ainsi, le schéma est stable si et seulement si pour tout $i \in \{1, \dots, N\}$, on a $|c_{ii}| \leq 1$. Or $\varphi_\theta(y)$ varie entre $-\frac{1-\theta}{\theta}$ et 1 lorsque y varie entre 0 et $+\infty$. On a donc une stabilité inconditionnelle pour $\theta \geq 1/2$. Dans le cas $\theta < 1/2$ la condition de stabilité est : $F_i + M_i \leq \varphi_\theta^{-1}(-1)$. D'où le théorème. \square

La forme du schéma (5.22) peut se réécrire :

$$[1 + \theta \Delta x (F_i + M_i)] \hat{m}_i^{k+1} = [1 - (1 - \theta) \Delta x (F_i + M_i)] \hat{m}_i^k + \theta \Delta x F_{i+1} \hat{m}_{i+1}^{k+1} + (1 - \theta) \Delta x F_{i+1} \hat{m}_{i+1}^k.$$

On démontre alors directement le théorème suivant :

Théorème 5.6 Positivité – *Le schéma (5.22) donne des valeurs positives des \hat{m}_i^k quelles que soient les conditions 'initiales' m_i^0 positives si et seulement si on a $\mathcal{M} \leq \frac{1}{(1 - \theta)\Delta x}$.*

On peut remarquer de plus que le schéma implicite ($\theta = 1$) donne toujours des valeurs positives des \hat{m}_i^k quelles que soient les conditions 'initiales' m_i^0 positives.

Le Lemme 5.4 et les Théorèmes 5.5 et 5.6 permettent donc de déterminer les conditions CFL pour la stabilité et la positivité pour les différentes valeurs de α et β . En particulier, dans le cas $\alpha < 2$, \mathcal{M} varie comme $\Delta\Psi^{-2/\alpha}$. On va donc avoir des conditions CFL du type $\frac{\Delta x}{\Delta\Psi^{2/\alpha}}$ inférieur à une constante, c'est à dire une condition plus restrictive que dans le cas $\alpha \geq 2$. Prenons par exemple le cas $\alpha = \beta = 1$ ($\Delta\Psi = \Delta R$) couramment utilisé et comparons-le au cas $\alpha = 2, \beta = 1$ ($\Delta\Psi = \Delta S$). Les conditions du Théorème 5.5 sont réalisées dans les deux cas, car la fonction λ du Lemme 5.4 est strictement décroissante. Et quand $\theta < 1/2$, la condition de stabilité est, pour ces 2 cas :

$$\frac{\Delta x}{\Delta S} \leq \frac{2}{3(1 - 2\theta)}, \quad \frac{\Delta x}{(\Delta R)^2} \leq \frac{2}{3(1 - 2\theta)}. \quad (5.28)$$

Les conditions de positivité, quand $\theta < 1$, sont de la même forme que pour la stabilité. Ainsi, on a des conditions CFL plus restrictives dans le premier cas que dans le second.

5.3.4 Choix optimal de la discrétisation et de la forme de la distribution dans chaque section

Finalement, dans le cas général, on obtient des conditions CFL pour la stabilité et la positivité, peu restrictives pour $\alpha \geq 2$. De plus, on a représenté sur la figure 5.1 les courbes $\frac{\beta^2}{\alpha(2\beta + 1 - \alpha)} = \nu$, pour différentes valeurs de ν .

Il apparaît ainsi que, parmi les cas $\alpha \geq 2$, la précision la plus grande (c'est à dire avec un ordre 1 et la constante intervenant dans la majoration de γ minimale) est obtenue pour $\alpha = 2$ et $\beta = 1$. D'autre part, on peut remarquer que, pour ce cas, la régularité de f^ϕ est induite par celle de f_0 . C'est le meilleur compromis entre précision, stabilité et positivité. Ainsi, le cas 'optimal' est une discrétisation uniforme en surface et une distribution choisie constante en rayon.

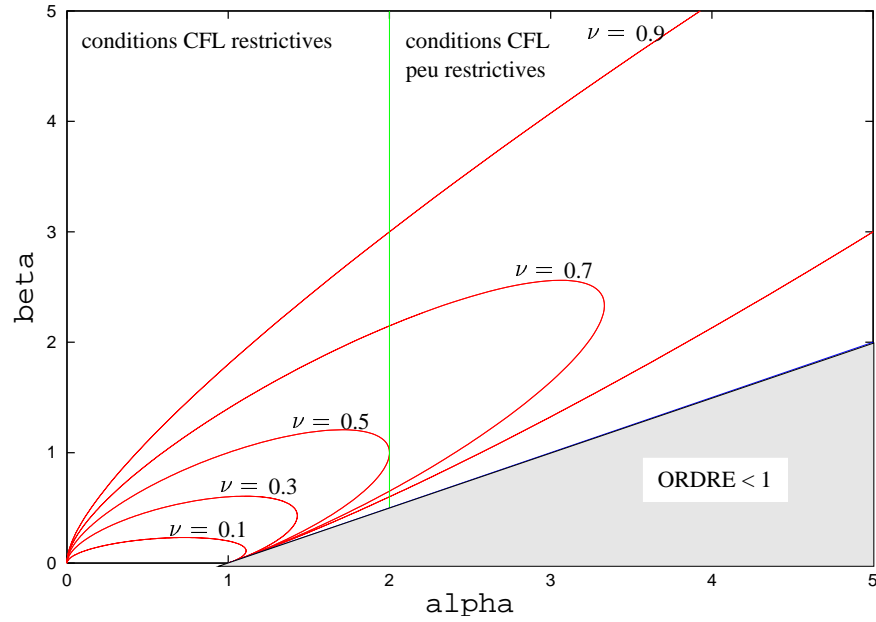


FIG. 5.1 – Schéma pour l'ordre et la stabilité de l'approche sectionnelle suivant les valeurs de α et β .

5.4 Simulations instationnaires de la méthode sectionnelle

L'analyse numérique de la méthode sectionnelle ayant été réalisée, on s'intéresse maintenant à son comportement pour des simulations instationnaires, dans un cas 1D sans effet dynamique. La configuration est à peu près la même que celle de la section précédente : on considère une configuration purement 1D où le spray poly-dispersé est injecté dans un gaz chaud, mais cette fois de manière instationnaire. C'est à dire qu'un brouillard de distribution constante est injecté pendant un intervalle de temps fini, dans l'espace considéré. On va étudier deux cas, suivant que la fonction de distribution en surface du brouillard injecté est régulière, comme dans le cadre du Théorème 5.3 ou discontinue, cas qui convient mal à l'approche sectionnelle. On commence par donner, plus précisément, le modèle cinétique, les conditions initiales et les conditions aux limites. On donne alors le schéma numérique et les résultats obtenus.

5.4.1 Configuration et Modèle cinétique

On considère donc une configuration 1D sans effet dynamique. Le gaz est à vitesse constante $u > 0$, sa composition et sa température sont aussi constantes. Le spray, quant à lui, est injecté à la même vitesse que le gaz et reste donc en équilibre dynamique. De plus, on suppose que les gouttelettes sont initialement à la température d'équilibre et restent donc à cette température. La fonction de distribution est donc réduite à la densité $f^\phi(t, x, \phi)$ de gouttes à l'instant t , au point x en fonction de leur taille ϕ . D'autre part, ici encore, le taux R_S de variation de surface dû à l'évaporation est uniforme et constant. L'équation (5.1) se réduit alors à :

$$\partial_t f^S + u \partial_x f^S + R_S \partial_S f^S = 0. \quad (5.29)$$

On adimensionne le système grâce au changement de variables suivant :

$$\bar{S} = \frac{S}{S_{max}} \quad \bar{x} = \frac{-R_S x}{u S_{max}} \quad \bar{t} = \frac{-R_S t}{S_{max}} \quad \bar{f}^{\bar{S}}(\bar{x}, \bar{S}) = S_{max} f^S(x, S). \quad (5.30)$$

En notant encore S , x , t et f^S les nouvelles variables \bar{S} , \bar{x} , \bar{t} et $\bar{f}^{\bar{S}}$, on obtient l'équation :

$$\partial_t f^S + \partial_x f^S - \partial_S f^S = 0. \quad (5.31)$$

On suppose qu'au départ, aucune gouttelette n'est présente dans l'espace de calcul. On injecte constamment en $x = 0$, entre les temps $t = 0$ et $t = 0.5$, des gouttelettes de distribution constante. Cette distribution est donnée par une fonction de la surface f_0 . La solution analytique du modèle cinétique est donc :

$$f^S(t, x, S) = \begin{cases} f_0(S + x) & \text{si } t - \frac{1}{2} \leq x \leq t \\ 0 & \text{si } x > t \text{ ou } x < t - \frac{1}{2} \end{cases}. \quad (5.32)$$

On a réalisé les calculs avec deux fonctions de distribution f_0 différentes : l'une, régulière est donnée par la figure 5.2a, l'autre, discontinue, est donnée par la figure 5.2b. De plus, toutes deux sont d'intégrale 1.

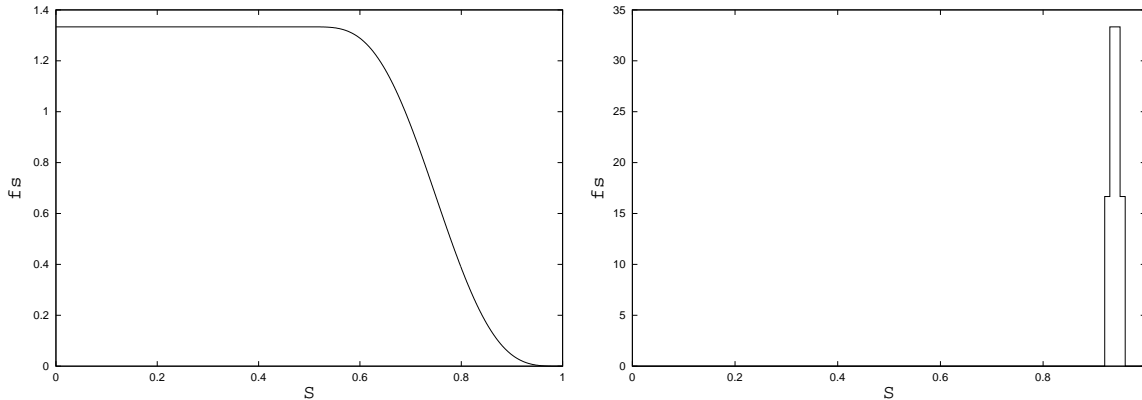


FIG. 5.2 – Distributions de taille des gouttes injectées en $x = 0$, en fonction de leur surface.

On peut utiliser une grande variété de schémas pour la discrétisation en temps et en espace. Il ne s'agit pas ici de les détailler, on pourra par exemple se référer à [LeV92]. Les calculs ont été réalisés avec la méthode sectionnelle et un schéma d'ordre 2 en temps et en espace, afin de limiter la diffusion en ces variables.

5.4.2 Schéma numérique

Le schéma semi-discrétisé de la méthode sectionnelle s'écrit, cette fois :

$$\partial_t \tilde{m}_i(t, x) + \partial_x \tilde{m}_i(t, x) = F_{i+1} \tilde{m}_{i+1}(t, x) - (F_i + M_i) \tilde{m}_i(t, x). \quad (5.33)$$

On introduit des discrétisations uniformes en temps et en espace : $t_n = n \Delta t$ et $x_j = j \Delta x$. Le schéma utilisé pour la variable temporelle est un schéma de Runge-Kutta explicite d'ordre 2. Pour la variable spatiale, on utilise un schéma d'ordre 2, avec limiteur de pente de type minmod [LeV92]. On obtient ainsi une valeur approchée $\hat{m}_i^{j+1/2, n}$ de la masse de la section i , au temps t_n et au point $x_{j+1/2} = x_j + \frac{1}{2} \Delta x$.

La méthode sectionnelle est alors utilisée, avec 100 sections ($\Delta S = 0.01$), 100 pas d'espace ($\Delta x = 0.01$) et 800 pas de temps ($\Delta t = 0.00125$). L'injection des gouttes se traduit alors simplement, dans le schéma par la présence, en $x = 0$, pour $0 \leq t_n \leq 0.5$ des masses dans chaque section :

$$\hat{m}_i^{0, n} = \int_{S_{i-1}}^{S_i} s^{3/2} f_0(s) ds. \quad (5.34)$$

5.4.3 Résultats

Cas de l'injection d'un brouillard de distribution régulière

Dans ce premier cas, la distribution de gouttes du brouillard injecté est donnée par la figure 5.2a. On peut voir, sur la figure 5.3, en quelques points, la distribution de masse donnée par la méthode sectionnelle, par rapport à la distribution exacte (cette distribution exacte est $S^{3/2}f_0(S+x)$ aux points considérés). On constate un très bon accord pour les 3 premiers points, un léger décalage apparaissant un peu plus loin en x , là où la quantité totale de masse devient faible.

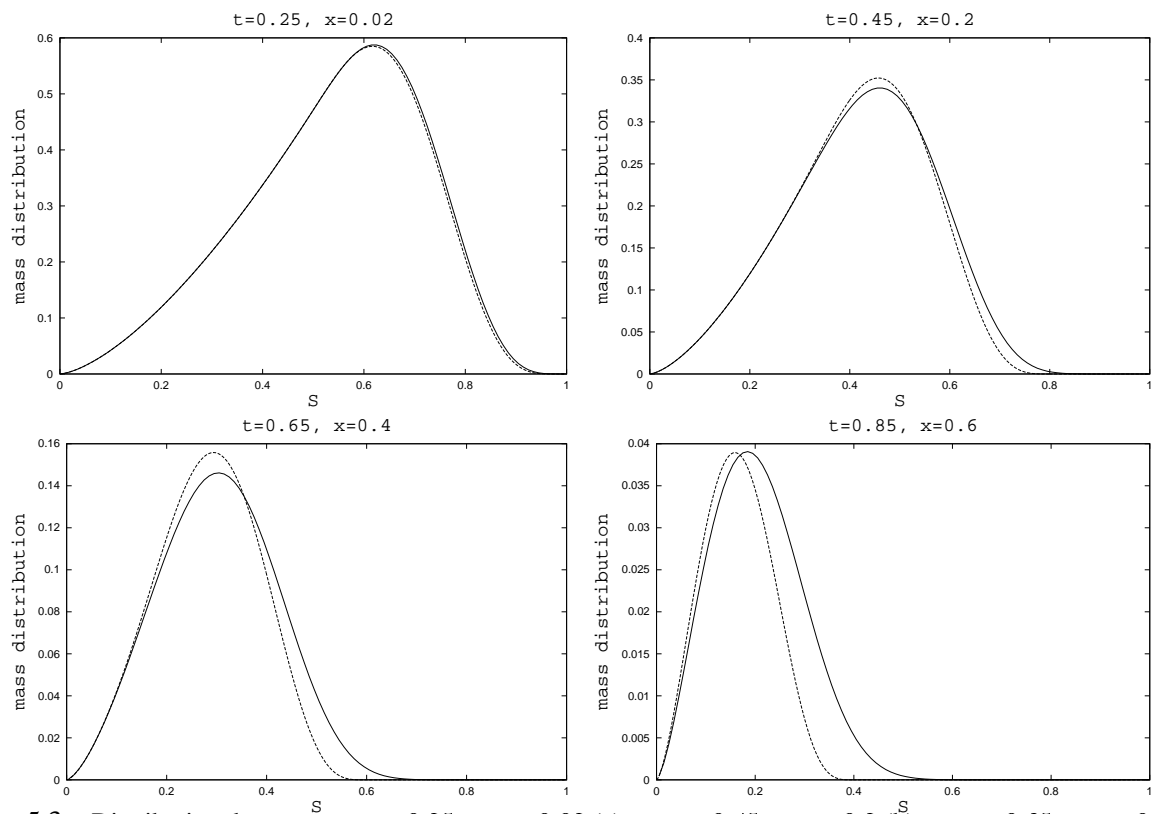


FIG. 5.3 – Distribution de masse en $t = 0.25$ et $x = 0.02$ (a), en $t = 0.45$ et $x = 0.2$ (b), en $t = 0.65$ et $x = 0.4$ (c), et en $t = 0.85$ et $x = 0.6$ (d) exacte (en pointillés) ou calculée avec la méthode sectionnelle (en trait plein).

Cas de l'injection d'un brouillard de distribution irrégulière

Dans ce second cas, la distribution de gouttes du brouillard injecté est donnée par la figure 5.2b. Il s'agit de voir comment se comporte la méthode sectionnelle, sur ce cas 'extrême' pour lequel elle n'est pas adaptée. On peut voir l'évolution de la distribution de masse sur la figure 5.5. On remarque notamment la diffusion numérique rapidement importante. Celle-ci est due à l'utilisation de la méthode sectionnelle, qui est d'ordre 1, alors que les discrétisations en temps et en espace sont d'ordre 2. D'autre part, on constate que petit à petit, se crée un décalage de la distribution de masse, calculée avec la méthode sectionnelle, par rapport à la distribution réelle (voir la figure 5.4). Ainsi, la vitesse de propagation prévue par la méthode sectionnelle est inférieure à la vitesse réelle. Ce résultat classique est démontré théoriquement, par une analyse de Fourier, par exemple dans [Dur99].

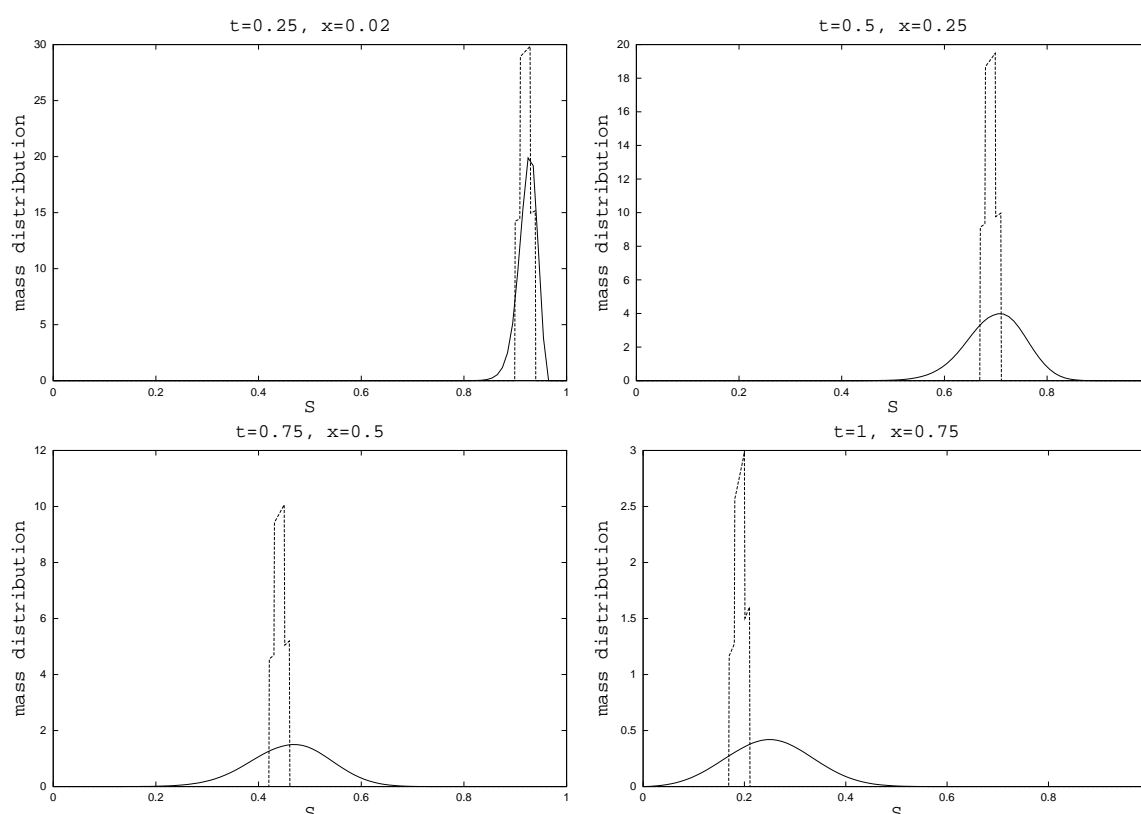


FIG. 5.4 – Distribution de masse en $t = 0.25$ et $x = 0.02$ (a), en $t = 0.5$ et $x = 0.25$ (b), en $t = 0.75$ et $x = 0.5$ (c), et en $t = 1$ et $x = 0.75$ (d) exacte (en pointillés) ou calculée avec la méthode sectionnelle (en trait plein).

Afin de réduire la diffusion numérique, et de mieux prévoir la vitesse de propagation, il faut développer des méthodes adaptées, d'ordre plus élevé. Une première solution envisagée est une méthode d'ordre 2 pour le calcul des nombres de gouttes dans chaque section : une discrétisation, suivant la taille des gouttes, de type MUSCL avec un limiteur de pente de type minmod. La distribution de masse est ensuite reconstruite. Cette méthode a été programmée et on constate une diffusion moindre que dans le cas de l'approche sectionnelle (voir la figure 5.6). Cependant, la variable qui nous intéresse est la densité massique de gouttes et celle-ci n'est pas conservée par ce type de méthode. D'autre part, l'erreur sur la masse des grosses gouttes est plus importante.

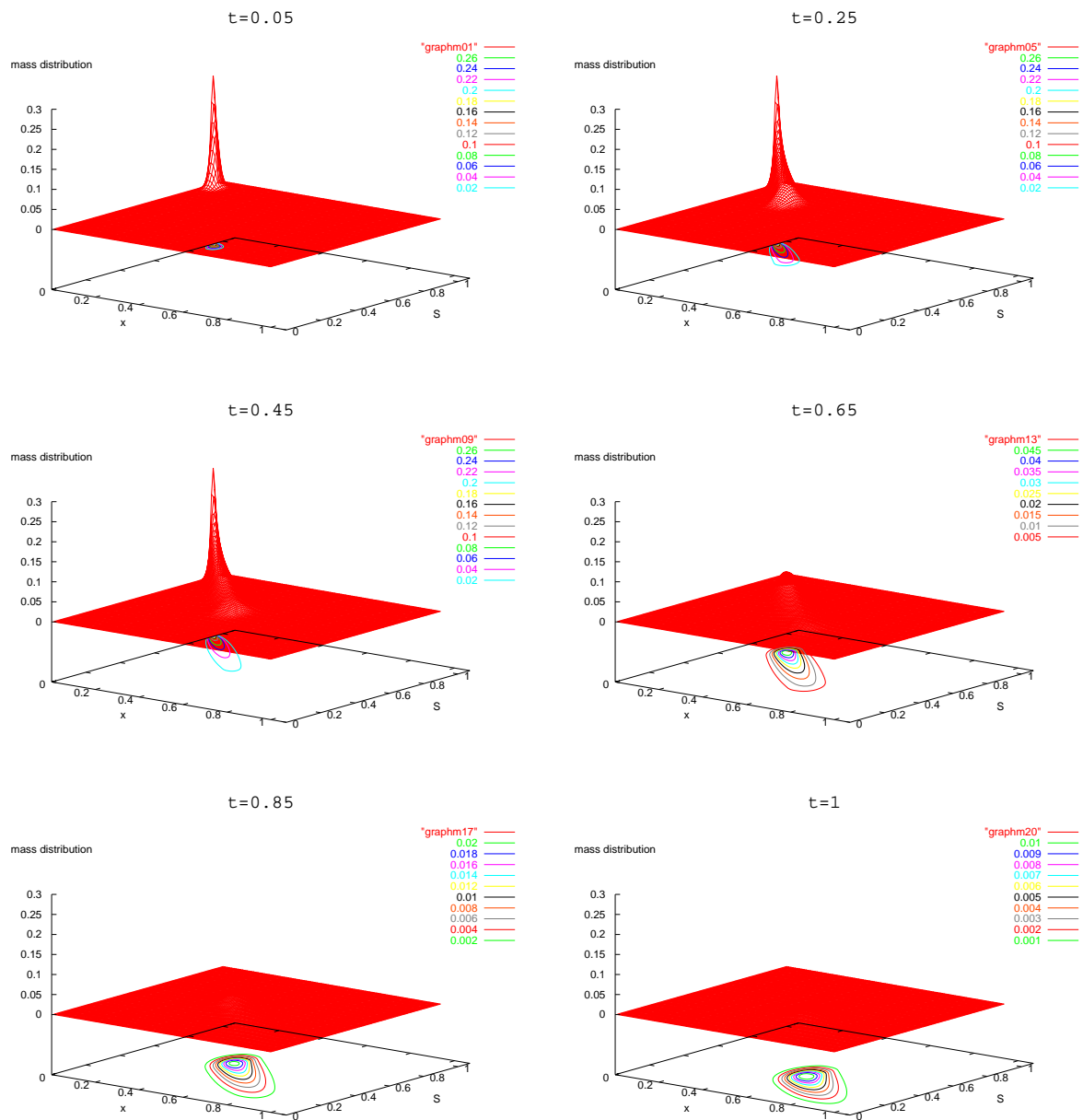


FIG. 5.5 – Distribution de masse en $t = 0.05$, en $t = 0.25$, en $t = 0.45$, en $t = 0.65$, en $t = 0.85$ et en $t = 1$, calculée avec la méthode sectionnelle.

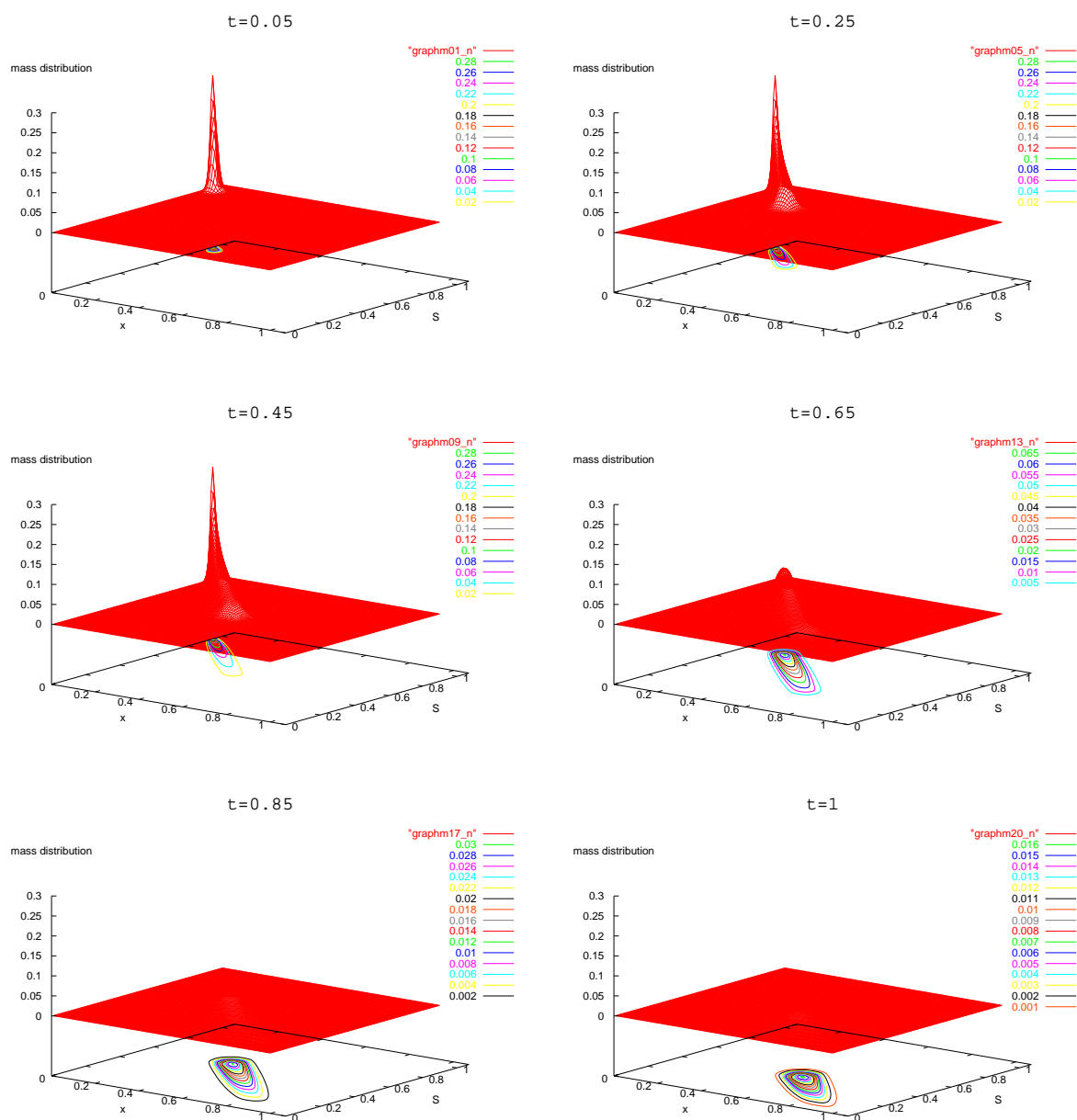


FIG. 5.6 – Distribution de masse en $t = 0.05$, en $t = 0.25$, en $t = 0.45$, en $t = 0.65$, en $t = 0.85$ et en $t = 1$, calculée à partir de la distribution du nombre de gouttes, elle-même évaluée avec une méthode d'ordre 2.

C'est pourquoi un autre type de méthode a été envisagé : l'utilisation plusieurs moments en surface dans chaque section. C'est cette dernière approche qui est étudiée, dans la section suivante.

5.5 Méthodes d'ordre supérieur

Comme pour la méthode sectionnelle, on utilise des méthodes de moments en vitesse et température des gouttes. L'espace des phases en taille de gouttes est aussi discrétisé par volumes finis, mais sur des moments en S de la distribution.

On calcule ici l'ordre de la méthode dans le cas où on a m moments, sur la configuration 1D sans effet dynamique ni thermique. On revient ensuite à une méthode à deux moments, puis à sa généralisation à des problèmes non stationnaires et avec effet dynamique.

5.5.1 Méthode à m moments

On choisit ici, directement, une discrétisation en surface de l'espace des phases de gouttes réalisant une partition uniforme de $[0, 1]$: pour $i \in \{1, \dots, N\}$ on pose $S_i = i\Delta S$ (avec $\Delta S = 1/N$). La seule fonction de distribution utilisée ici est f^S que l'on notera donc, pour simplifier, f .

Il s'agit donc ici de donner une méthode de volumes finis type upwind sur chacune des équations :

$$\partial_x(S^\alpha f) = \partial_S(S^\alpha f) - \alpha S^{\alpha-1} f \quad (5.35)$$

où α est un entier. Il s'agit d'approcher les moments :

$$\forall i \in \{1, \dots, N\} \quad \forall \alpha \in \{0, \dots, m-1\} \quad \overline{nS_i^\alpha} = \int_{S_{i-1}}^{S_i} S^\alpha f(x, S) dS \quad (5.36)$$

Le schéma donne alors une approximation $\widetilde{nS_i^\alpha}$ des $\overline{nS_i^\alpha}$ par les équations suivantes, pour $i \in \{1, \dots, N\}$ et $\alpha \in \{0, \dots, m-1\}$:

$$\partial_x(\widetilde{nS_i^\alpha}) + \alpha \widetilde{nS_i^{\alpha-1}} = S_i^\alpha F_{i+1} - S_{i-1}^\alpha F_i \quad (5.37)$$

où les $F_i(x)$ sont des flux. Ce sont par exemple des approximations des $f(x, S_{i-1})$. Pour les calculer, on approche f par la fonction f_a telle que pour chaque $i \in \{1, \dots, N\}$, $f_a|_{[S_{i-1}, S_i]}$ soit une fonction polynôme de degré inférieur ou égal à $m-1$ et telle qu'on ait :

$$\forall i \in \{1, \dots, N\} \quad \forall \alpha \in \{0, \dots, m-1\} \quad \int_{S_{i-1}}^{S_i} S^\alpha f_a(x, S) dS = \widetilde{nS_i^\alpha}. \quad (5.38)$$

Les flux F_i et une approximation de la densité massique de gouttes \tilde{m}_i dans chaque section peuvent alors être définis par :

$$F_i = f_a(x, S_{i-1}), \quad \tilde{m}_i(x) = \int_{S_{i-1}}^{S_i} S^{3/2} f_a(x, S) dS. \quad (5.39)$$

Fonction de distribution approchée

Commençons par vérifier l'existence et l'unicité d'une telle fonction f_a . Pour cela, on va introduire des bases de l'ensemble $\mathbb{R}_{m-1}[X]$ des polynômes de degré au plus $m-1$, et exprimer f_a en fonction de celles-ci. Pour construire ces bases, on utilise des bijections, définies dans la proposition suivante :

Proposition 5.7 Les applications φ et $\varphi^{(i)}$ définies sur $\mathbb{R}_{m-1}[X]$ et à valeur dans \mathbb{R}^m :

$$\varphi(P) = \left(\int_0^1 P(x)dx, \int_0^1 xP(x)dx, \dots, \int_0^1 x^{m-1}P(x)dx \right)^t, \quad (5.40)$$

$$\varphi^{(i)}(P) = \left(\int_{S_{i-1}}^{S_i} P(x)dx, \int_{S_{i-1}}^{S_i} xP(x)dx, \dots, \int_{S_{i-1}}^{S_i} x^{m-1}P(x)dx \right)^t \quad (5.41)$$

sont des applications linéaires inversibles.

Démonstration. – Commençons par montrer que φ est bijective, le reste en découlera. La matrice de φ dans les bases canoniques $(1, X, \dots, X^{m-1})$ de $\mathbb{R}_{m-1}[X]$ et (e_1, \dots, e_m) de \mathbb{R}^m a pour coefficients $\frac{1}{i+j-1}$. C'est une matrice de Cauchy qui est donc inversible. Donc φ est une bijection.

Montrons maintenant que $\varphi^{(i)}$ est injective. Soit $P \in \mathbb{R}_{m-1}[X]$ tel que $\varphi^{(i)}(P) = 0$. On a alors, pour chaque $j \in \{0, \dots, m-1\}$:

$$\int_0^1 y^j P(S_{i-1} + y\Delta S) dy = \int_{S_{i-1}}^{S_i} \left(\frac{x - S_{i-1}}{\Delta S} \right)^j P(x) \frac{dx}{\Delta S} = 0.$$

Ainsi, puisque φ est injective, le polynôme $P(S_{i-1} + X\Delta S)$ est nul, et donc P aussi. On a montré que $\varphi^{(i)}$ est bijective. La proposition est démontrée. \square

On note alors :

$$R_k = \varphi^{-1}(e_{k+1}), \quad P_k^{(i)} = (\varphi^{(i)})^{-1}(e_{k+1}), \quad (5.42)$$

où (e_1, \dots, e_m) est la base canonique de \mathbb{R}^m .

Ainsi, les m -uplets (R_0, \dots, R_{m-1}) et $(P_0^{(i)}, \dots, P_{m-1}^{(i)})$ forment chacun une base de $\mathbb{R}_{m-1}[X]$, la première étant indépendante de la discrétisation choisie, et leur moments sont :

$$\int_0^1 y^j R_k(y) dy = \delta_{j,k}, \quad \int_{S_{i-1}}^{S_i} S^j P_k^{(i)}(S) dS = \delta_{j,k}, \quad (5.43)$$

où $\delta_{j,k}$ vaut 1 si $j = k$ et 0 dans le cas contraire.

Ainsi, la fonction f_a existe et est donnée par :

$$\forall S \in [S_{i-1}, S_i[\quad f_a(x, S) = \sum_{k=0}^{m-1} \widetilde{nS_i^k}(x) P_k^{(i)}(S). \quad (5.44)$$

D'autre part, les flux sont alors :

$$F_i = \sum_{k=0}^{m-1} \widetilde{nS_i^k}(x) P_k^{(i)}(S_{i-1}). \quad (5.45)$$

Résultat préliminaire

Avant de poursuivre, on montre un lemme qui permettra de donner des estimations d'erreur. Introduisons tout d'abord les quantités indépendantes de ΔS qui vont nous servir pour les majorations :

$$M_m = \sup_{y \in \mathbb{R}^+} |f_0^{(m)}(y)|, \quad M_{m+1} = \sup_{y \in \mathbb{R}^+} |f_0^{(m+1)}(y)|, \quad \|R\| = \sup_{k \in \{0, \dots, m-1\}} \sup_{s \in [0,1]} |R_k(s)|. \quad (5.46)$$

où les R_k forment la base de $\mathbb{R}_{m-1}[X]$ définie par (5.42).

On a alors le résultat :

Lemme 5.8 Soit h une fonction de classe C^m sur $[0, 1]$ et ψ la fonction définie pour $y \in [0, 1]$ par :

$$\psi(y) = h(y) - \sum_{k=0}^{m-1} R_k(y) \int_0^1 z^k h(z) dz.$$

Alors on a, pour $y \in [0, 1]$:

$$|\psi(y)| \leq \frac{H_m}{m!} \left[1 + \|R\| \sum_{k=1}^m \frac{1}{k} \right]$$

où H_m est la norme dans $L^\infty([0, 1])$ de $h^{(m)}$.

Démonstration. – La formule de Taylor-Lagrange à l'ordre m , entre 0 et y , nous permet d'écrire h sous la forme : $h = Q + \epsilon$, où Q est un polynôme de degré au plus égal à $m - 1$ et où ϵ vérifie, pour $y \in [0, 1]$:

$$|\epsilon(y)| \leq \frac{H_m}{m!}. \quad (5.47)$$

On va pouvoir exprimer ψ uniquement en fonction de ϵ . Pour cela, décomposons le polynôme Q dans la base des R_k :

$$Q(y) = \sum_{j=0}^{m-1} R_j(y) \int_0^1 u^j Q(u) du.$$

On injecte cette expression dans ψ :

$$\psi(y) = h(y) - \sum_{k=0}^{m-1} \sum_{j=0}^{m-1} R_k(y) \int_0^1 z^k R_j(z) dz \int_0^1 u^j Q(u) du - \sum_{k=0}^{m-1} R_k(y) \int_0^1 z^k \epsilon(z) dz.$$

Vue la définition des R_k traduite dans l'équation (5.43), on a :

$$\begin{aligned} \psi(y) &= h(y) - \sum_{k=0}^{m-1} R_k(y) \int_0^1 u^k Q(u) du - \sum_{k=0}^{m-1} R_k(y) \int_0^1 z^k \epsilon(z) dz \\ &= \epsilon(y) - \sum_{k=0}^{m-1} R_k(y) \int_0^1 z^k \epsilon(z) dz. \end{aligned}$$

On obtient alors, grâce à (5.47), l'estimation de ψ donnée dans le lemme. \square

Calcul de la masse

Une approximation \tilde{m}_i de la masse m_i dans la section i est donnée par :

$$\tilde{m}_i(x) = \int_{S_{i-1}}^{S_i} S^{3/2} f_a(x, S) dS = \sum_{k=0}^{m-1} \widetilde{nS}_i^k(x) \int_{S_{i-1}}^{S_i} S^{3/2} P_k^{(i)}(S) dS. \quad (5.48)$$

Si les valeurs des moments étaient exactes, alors l'erreur commise par un tel calcul de la masse serait donnée par :

$$\zeta_i(x) = m_i(x) - \sum_{k=0}^{m-1} \overline{nS_i^k(x)} \int_{S_{i-1}}^{S_i} S^{3/2} P_k^{(i)}(S) dS, \quad (5.49)$$

c'est à dire :

$$\zeta_i(x) = \int_{S_{i-1}}^{S_i} S^{3/2} g_i(x, S) dS, \quad g_i(x, S) = f(x, S) - \sum_{k=0}^{m-1} P_k^{(i)}(S) \int_{S_{i-1}}^{S_i} \sigma^k f(x, \sigma) d\sigma. \quad (5.50)$$

On va déterminer l'ordre de ζ_i en fonction de ΔS :

Proposition 5.9 *Si f_0 est de classe C^m sur \mathbb{R}^+ , alors $\zeta_i = O(\Delta S^{m+1})$.*

Démonstration. – On va écrire les g_i sous une forme différente qui va nous permettre d'appliquer le Lemme 5.8. Remarquons que les m premiers moments en S de g_i sur $[S_{i-1}, S_i]$ sont nuls. En effet, pour $k \in \{0, \dots, m-1\}$, on a :

$$\int_{S_{i-1}}^{S_i} S^k g_i(x, S) dS = \overline{nS_i^k(x)} - \sum_{l=0}^{m-1} \overline{nS_i^l(x)} \int_{S_{i-1}}^{S_i} S^k P_l^{(i)}(S) dS = 0.$$

Ainsi, les m premiers moments de $g_i(x, S_{i-1} + y \Delta S)$ sur $[0, 1]$ sont nuls :

$$\int_0^1 z^k g_i(x, S_{i-1} + z \Delta S) dz = \int_{S_{i-1}}^{S_i} \left(\frac{S - S_{i-1}}{\Delta S} \right)^k g_i(x, S) \frac{dS}{\Delta S} = 0, \quad k \in \{0, \dots, m-1\}.$$

On écrit alors le polynôme $(f - g_i)(x, S_{i-1} + y \Delta S)$ en y dans la base des R_k :

$$(f - g_i)(x, S_{i-1} + y \Delta S) = \sum_{k=0}^{m-1} R_k(y) \int_0^1 z^k f(x, S_{i-1} + z \Delta S) dz.$$

D'où la forme des g_i :

$$g_i(x, S) = f(x, S) - \sum_{k=0}^{m-1} R_k \left(\frac{S - S_{i-1}}{\Delta S} \right) \int_0^1 z^k f(x, S_{i-1} + z \Delta S) dz. \quad (5.51)$$

On applique alors le Lemme 5.8 à g_i , avec $h(y) = f(x, S_{i-1} + y \Delta S)$. Etant donné que $f(x, S) = f_0(x + S)$ et avec les notations introduites dans (5.46), la norme dans $L^\infty([0, 1])$ de $h^{(m)}$ est inférieure à $\Delta S^m M_m$. On obtient donc :

$$g_i(x, S) \leq \frac{M_m}{m!} \left[1 + \|R\| \sum_{k=1}^m \frac{1}{k} \right] (\Delta S)^m.$$

Les ζ_i sont donnée en fonction des g_i par (5.50). On obtient ainsi le résultat du théorème :

$$|\zeta_i| \leq \int_{S_{i-1}}^{S_i} S^{3/2} |g_i(x, S)| dS \leq \frac{M_m}{m!} S_{max}^{3/2} \left[1 + \|R\| \sum_{k=1}^m \frac{1}{k} \right] \Delta S^{m+1}. \quad (5.52)$$

□

Ordre de la méthode

On veut également évaluer l'ordre de la méthode, pour le calcul des moments $\overline{nS_i^k}$. On introduit donc les erreurs locales :

$$\epsilon_i^\alpha = \partial_x(\overline{nS_i^\alpha}) + \alpha \overline{nS_i^{\alpha-1}} - S_i^\alpha \Phi_{i+1} + S_{i-1}^\alpha \Phi_i, \quad \alpha \in \{0, \dots, m-1\}, \quad i \in \{0, \dots, N\}, \quad (5.53)$$

avec

$$\Phi_i(x) = \sum_{k=0}^{m-1} \overline{nS_i^k(x)} P_k^{(i)}(S_{i-1}). \quad (5.54)$$

En utilisant les équations (5.35) et (5.36) vérifiées par les $\overline{nS_i^k}$, on obtient :

$$\epsilon_i^\alpha = S_i^\alpha [f(x, S_i) - \Phi_{i+1}] - S_{i-1}^\alpha [f(x, S_{i-1}) - \Phi_i],$$

c'est à dire

$$\epsilon_i^\alpha(x) = S_i^\alpha g_{i+1}(S_i) - S_{i-1}^\alpha g_i(S_{i-1}), \quad (5.55)$$

où g_i est la fonction introduite par l'équation (5.50).

On va déterminer l'ordre de ϵ_i^α en fonction de ΔS :

Proposition 5.10 *Si f_0 est de classe C^{m+1} sur \mathbb{R}^+ , alors $\epsilon_i^\alpha = O(\Delta S^{m+1})$.*

Démonstration. – Comme pour la démonstration de l'ordre local de la méthode sectionnelle, on veut introduire une fonction g , C^1 , qui coïncident en S_{i-1} avec g_i . Or, on a montré dans la démonstration de la proposition précédente (équation (5.51)) que les $g_i(S_{i-1})$ peuvent s'écrire :

$$g_i(x, S_{i-1}) = f(x, S_{i-1}) - \sum_{k=0}^{m-1} R_k(0) \int_0^1 y^k f(x, S_{i-1} + y \Delta S) dy.$$

On introduit donc la fonction g définie par :

$$g(x, S) = f(x, S) - \sum_{k=0}^{m-1} R_k(0) \int_0^1 y^k f(x, S + y \Delta S) dy. \quad (5.56)$$

Les ϵ_i^α , donnés par (5.55), s'écrivent donc :

$$\epsilon_i^\alpha(x) = S_i^\alpha g(x, S_i) - S_{i-1}^\alpha g(x, S_{i-1}) = [\alpha S_c^{\alpha-1} g(x, S_c) + S_c^\alpha \partial_S g(x, S_c)] \Delta S$$

où S_c est dans l'intervalle $]S_{i-1}, S_i[$. Les fonctions g et $\partial_S g$ sont de la forme donnée dans le Lemme 5.8, avec $h(y) = f(x, S + y \Delta S) = f_0(x + S + y \Delta S)$ ou $h(y) = \partial_S f(x, S + y \Delta S) = f'_0(x + S + y \Delta S)$. Le lemme nous donne donc des majorations de $|g|$ et $|\partial_S g|$ dont on déduit une majoration de $|\epsilon_i^\alpha|$:

$$|\epsilon_i^\alpha(x)| \leq \left[1 + \|R\| \sum_{k=1}^m \frac{1}{k} \right] (\alpha S_{max}^{\alpha-1} M_m + S_{max}^\alpha M_{m+1}) \frac{\Delta S^{m+1}}{m!},$$

et la proposition est démontrée. \square

Dans le cas d'une fonction f_0 régulière, la méthode est d'ordre local égal à $m + 1$ et donc d'ordre global égal à m . Cependant, cette méthode, telle qu'elle est écrite, n'est pas nécessairement TVD (Total Variation Diminishing) : il se peut que la distribution approchée prenne des valeurs négatives. Il convient alors de les adapter pour obtenir des schémas TVD. Cela fait l'objet de développements en cours.

5.6 Conclusion

On a montré que la méthode multi-fluides eulérienne de type sectionnelle, pour la description de l'évaporation des gouttes est d'ordre 1 en le pas de discrétisation de l'espace des tailles de gouttes, moyennant certaines conditions de compatibilité. On a donné également la meilleure manière de faire cette discrétisation, dans un cas général. Des simulations instationnaires, dans des cas 1D, sans effet dynamique, montrent que cette méthode se comporte bien sur ce type de configuration, dans le cas où la distribution du brouillard injecté est régulière.

Cependant, sur un cas où la distribution du brouillard injecté est très irrégulière, on a vu que la méthode sectionnelle engendre une diffusion numérique importante, et une sous-évaluation de la vitesse de propagation des gouttes. Il convient donc de développer les méthodes d'ordres plus élevés. Un premier pas en ce sens est l'introduction de méthodes d'ordre m , où l'on considère m moments en surface dans chaque section. Les développements ultérieurs, pour obtenir des méthodes TVD, sont en cours.

Bibliographie

- [Dom01] K. Domelevo. The kinetic sectional approach for noncolliding evaporating sprays. *Atomization and Sprays*, 11 :291–303, 2001.
- [Dur99] Dale R. Durran. *Numerical methods for wave equations in geophysical fluid dynamics*. Springer-Verlag, New York, 1999.
- [GST93] J.B. Greenberg, I. Silverman, and Y. Tambour. On the origin of spray sectional conservation equations. *Combustion and Flame*, 93 :90–96, 1993.
- [LeV92] Randall J. LeVeque. *Numerical methods for conservation laws*. Birkhäuser Verlag, Basel, second edition, 1992.
- [LM01] Frédérique Laurent and Marc Massot. Multi-fluid modeling of laminar poly-dispersed spray flames : origin, assumptions and comparison of the sectional and sampling methods. *Combust. Theory and Modelling*, 5 :537–572, 2001.
- [LMV01] F. Laurent, M. Massot, and P. Villedieu. Eulerian multi-fluid modeling for the numerical simulation of polydisperse dense liquid spray. prépublication, soumis, MAPLY, UMR 5585 Lyon, 2001. (<http://maply.univ-lyon1.fr/publis/publiv/2001/335/publi.ps.gz>).
- [LSN⁺02] F. Laurent, V. Santoro, M. Noskov, A. Gomez, M.D. Smooke, and M. Massot. Accurate treatment of size distribution effects in polydispersed spray diffusion flames : multi-fluid modeling, computations and experiments. prépublication, MAPLY, UMR 5585 Lyon, 2002. (<http://maply.univ-lyon1.fr/publis/publiv/2002/publis.html>).
- [MKGS98] M. Massot, M. Kumar, A. Gomez, and M. D. Smooke. Counterflow spray diffusion flames of heptane : computations and experiments. In *Proceedings of the 27th Symp. (International) on Combustion, The Comb. Institute*, pages 1975–1983, 1998.
- [MV01] Marc Massot and Philippe Villedieu. Modélisation multi-fluide eulérienne pour la simulation de brouillards denses polydispersés. *C. R. Acad. Sci. Paris Sér. I Math.*, 332(9) :869–874, 2001.
- [Wil58] F.A. Williams. Spray combustion and atomization. *Phys. Fluids*, 1 :541–545, 1958.

5.7 ANNEXE : Analyse numérique d'une méthode multi-fluide Eulérienne pour la description de sprays qui s'évaporent

Note aux Comptes Rendus de l'Académie des Sciences :

F. LAURENT, *Analyse numérique d'une méthode multi-fluide Eulérienne pour la description de sprays qui s'évaporent*, C. R. Acad. Sci. Paris, Ser. I 334 (2002) 417-422

Résumé. Cette Note concerne l'analyse numérique d'une méthode Multi-fluide Eulérienne pour la description de sprays polydispersés qui s'évaporent et ce, sur une configuration stationnaire 1D, sans effet dynamique ni thermique où seul l'aspect évaporation subsiste. L'espace des phases se réduit alors à la position et la taille des gouttes. On donne les conditions sous lesquelles la méthode est d'ordre 1 en le pas de discrétisation de la taille de goutte. D'autre part, la stabilité du θ -schéma pour la discrétisation en espace ainsi que la positivité des variables nécessitent des conditions CFL précisées ici. On donne ainsi le 'bon choix' de la variable taille de goutte et de la discrétisation en cette variable.

Numerical analysis of a Eulerian multi-fluid method for the description of evaporating sprays

Abstract. *In this Note, we investigate the numerical analysis of a Eulerian multi-fluid model for the description of vaporizing liquid sprays. The study is conducted in a stationary 1D-configuration without dynamical nor heating effects, where the vaporization process is isolated. The phase space is then reduced to the space and droplet size variables. The conditions under which the model provides a first order method in the size discretization step are provided. We then study the stability conditions of the θ -schemes for the space discretization, as well as the positivity condition and the associated CFL conditions. This yields a justification of the "right" choice for the droplet size variable and for the discretization in this variable.*

Abridged English version

In a lot of industrial combustion applications such as Diesel engines, fuel is stocked in condensed form and injected as a spray (spray is understood as a dispersed phase of liquid fuel droplets, i.e. where the liquid volume fraction is much smaller than one) carried by a gaseous flow. Two phase effects and more specifically the poly-disperse character of the droplet distribution in sizes can significantly influence the flame structures, even in the case of relatively thin sprays [7]. The key point is then to determine which amount of mass is transferred from the liquid phase into the gaseous one through the vaporization process.

In this context, Eulerian multi-fluid models have been recently studied [3], [6], [8], [5]. The kinetic equation (pdf equation [9]) is averaged over velocity and temperature and yields a semi-kinetic model: at each droplet size we obtain a set of conservation equations for the mean density, momentum and temperature. The continuous size phase space is then discretized using a finite volume formulation, the size intervals being called the sections in reference to [2]. The obtained set of conservation equations then describes the evolution of mass density, momentum and temperature in each section. The derivation from the kinetic level has been performed in [3] for dilute sprays and extended to dense sprays where coalescence is taking place in [5]. The model has been validated for dilute sprays using comparisons with experimental measurements in

the configuration of counterflow spray diffusion flames [7], [6] and with the classical Lagrangian approach [3].

This model, however, was used without any rigorous justification of the accuracy and of the choice of the droplet size variable and discretization. It is essential, for practical application, to understand and describe the droplet vaporization process and its effect on the gaseous fuel mass fraction. In order to isolate this vaporization process, we consider the framework introduced in [1], [3]: a stationary 1D-configuration without dynamical nor heating effects of a poly-disperse spray vaporizing in a hot gas. The numerical analysis of the Eulerian multi-fluid method is then conducted in this configuration for which an analytical solution is available.

We recall the kinetic formulation where the phase space is reduced to the space and droplet size variables. We also recall the semi-discretized finite volume scheme for the Eulerian multi-fluid model (5.3). The order of this scheme is given in Theorem 3.1; it is shown to be of order one under some compatibility conditions. In the case of θ -schemes for the space discretization, the corresponding CFL conditions for stability (Theorem 4.2) and positivity of the droplet mass densities (Theorem 4.3) are provided. These results yield a justification of the “right” choice for the droplet size variable: the surface, and for the discretization in this variable.

5.7.1 Introduction

La modélisation des sprays (par spray, nous entendons une phase liquide dispersée sous forme de gouttelettes, i.e. dont la fraction volumique est petite devant un) revêt une importance particulière dans le cadre de la propulsion par combustion où la plupart des fuels utilisés sont stockés sous forme condensée. La détermination précise de la quantité de masse de fuel fournie au gaz par les gouttelettes est essentielle et repose sur une bonne représentation de la polydispersion en taille du brouillard : en effet, ces facteurs influencent fortement la structure des flammes diphasiques considérées, même dans le cas de brouillards dilués [7].

C’est dans ce contexte que les modèles multi-fluides Eulériens ont été étudiés récemment [3, 6, 8, 5] : on considère une méthode de moments en vitesse et température, l’espace des phases en taille de goutte étant quant à lui discrétisé par volumes finis sur la masse, avec contrainte de moment, l’intervalle choisi étant dénommé section en référence à [2]. L’évolution de la densité massique de chaque section, ainsi que de la vitesse moyenne et de la température moyenne correspondantes sont alors calculées directement grâce à des équations de conservation, obtenues à partir d’un niveau cinétique de description [9, 2, 3, 8, 5]. Pour le cas des sprays dilués, où les collisions peuvent être négligées, la dérivation rigoureuse du modèle à partir du niveau cinétique a été obtenue dans [3] et le modèle validé sur des flammes de diffusion diphasique laminaires par comparaisons expérimentales [7, 6] et comparée numériquement à une approche classique d’échantillonnage [3].

Cependant, cette méthode a été utilisée jusqu’à maintenant sans aucune réelle justification quant à sa précision ou au choix de la discrétisation en taille. Un facteur essentiel est l’évaporation des gouttes : il est important de comprendre comment il agit sur la masse de fuel en phase vapeur. Pour mieux isoler ses effets, on considère donc la configuration, déjà introduite dans [1, 3], d’un écoulement 1D, stationnaire, sans effet dynamique ni thermique : l’évaporation d’un spray poly-dispersé dans un gaz chaud où les gouttelettes sont injectées à la température d’équilibre. On se propose ici de mener l’analyse numérique de la méthode multi-fluide Eulérienne dans ce cas qui a l’avantage de présenter une solution analytique.

Dans un premier temps, nous rappelons, dans la configuration étudiée, le modèle cinétique et le schéma de la méthode multi-fluide Eulérienne qui permet une approximation des densités massiques de goutte pour chaque section. Puis on détermine l'ordre de cette méthode multi-fluide. Dans le cas de θ -schémas pour la discrétisation en espace, on donne des conditions sur le pas d'espace et de taille de goutte qui permettent la stabilité du schéma et la positivité des variables. Ces résultats suggèrent et justifient la 'bonne' façon de discrétiser l'espace des phases correspondant à la taille de goutte et la 'bonne variable' de taille à considérer.

5.7.2 Modèle cinétique et méthode multi-fluide Eulérienne pour la configuration étudiée

On considère une configuration purement 1D où le spray poly-dispersé est injecté dans un gaz chaud, de manière stationnaire. Le gaz est à vitesse constante u , sa composition et sa température sont aussi constantes (on ne tient pas compte de l'influence du liquide sur le gaz dans la mesure où seule la description de l'évaporation des gouttes nous intéresse). Le spray, quant à lui, est injecté à la même vitesse que le gaz et reste donc en équilibre dynamique. De plus, on suppose que les gouttelettes sont initialement à la température d'équilibre et restent donc à cette température. Seule reste à considérer l'évaporation.

On veut donc comparer, sur cette configuration, le modèle cinétique pour lequel on a une solution analytique, et l'approche multi-fluide Eulérienne qui permet une approximation des densités massiques de goutte pour chaque section, variables importantes pour décrire l'évaporation.

Modèle cinétique

Les gouttes ont toutes la même vitesse et la même température et l'écoulement est stationnaire. On considère donc la densité $f^\phi(x, \phi)$ de gouttes au point x en fonction de leur taille ϕ , où ϕ représente le rayon R , la surface S ou le volume V ($f^R dR = f^S dS = f^V dV$). D'autre part, d'après la loi du d^2 , à vitesse, température et composition du gaz constantes, la surface de la goutte décroît linéairement (i.e. le taux R_S de variation de surface dû à l'évaporation est constant). Le paramètre $a = \frac{R_S}{u}$ est alors une constante et l'équation de Williams [9] se réduit alors à :

$$\partial_x f^S - a \partial_S f^S = 0. \quad (5.1)$$

On remarquera que la variable d'espace x joue le rôle attribué habituellement au temps.

On notera la condition 'initiale' $f^S(x=0, S) = f_0(S)$, où f_0 est une fonction qui sera supposée au moins C^2 et à support compact (toutefois cette étude se généralise au cas où f_0 est exponentiellement décroissante à l'infini, comme dans [6]). La solution de l'équation d'advection (5.1) à vitesse constante est alors $f^S(x, S) = f_0(S + ax)$.

Cependant, on ne s'intéresse pas directement à la distribution f^ϕ mais plutôt à la densité massique de gouttes m et aussi aux densités massiques m_i dans des sections $[\phi_{i-1}, \phi_i]$. Elles sont définies par :

$$m_i(x) = \rho_l \int_{\phi_{i-1}}^{\phi_i} V(\phi) f^\phi(x, \phi) d\phi, \quad m(x) = \sum_{i=1}^{N+1} m_i(x) = \rho_l \int_0^{+\infty} V(\phi) f^\phi(x, \phi) d\phi, \quad (5.2)$$

où $V(\phi)$ est le volume correspondant à ϕ (on notera de même $S(\phi)$ et $R(\phi)$ la surface et le rayon correspondant à ϕ) et ρ_l est la densité volumique du liquide. Dans la suite, on note Ψ la variable en laquelle les sections $[\Psi_{i-1}, \Psi_i]$ réalisent une partition uniforme de $[0, \Psi_N]$ avec pour tout $i \in \{0, \dots, N\}$, $\Psi_i = i\Delta\Psi$; Ψ_N est tel que $[0, S(\Psi_N)]$ contienne le support de f_0 . On supposera que $\Psi = R^\alpha$ avec $\alpha > 0$ (c'est par exemple, à un facteur multiplicatif près, le rayon, la surface ou le volume des gouttes).

L'approche multi-fluide Eulérienne

L'approche multi-fluide Eulérienne est une méthode de type volumes finis qui donne une approximation \tilde{m}_i des m_i par le schéma semi-discrétisé suivant :

$$\partial_x \tilde{m}_i(x) = F_{i+1} \tilde{m}_{i+1}(x) - (F_i + M_i) \tilde{m}_i(x), \quad \tilde{m}_i(0) = m_i(0). \quad (5.3)$$

Le terme en M_i représente le flux de masse entre la section i et le gaz. Le terme en F_i représente le flux de masse entre la section i et la section $i-1$. Ces coefficients M_i et F_i sont déterminés par un choix préliminaire de la forme κ_i^ϕ de la fonction de distribution dans chaque section : la fonction de distribution f^ϕ en x est approchée par $\kappa_i^\phi(\phi) \tilde{m}_i(x)$ pour $\phi \in [\phi_{i-1}, \phi_i]$. On a alors :

$$\forall i \in \{1, \dots, N\} \quad F_i = a\rho_l \frac{V(\phi_{i-1})}{S'(\phi_{i-1})} \kappa_i^\phi(\phi_{i-1}), \quad M_i = \frac{a\rho_l}{2} \int_{\phi_{i-1}}^{\phi_i} R(\phi) \kappa_i^\phi(\phi) d\phi \quad (5.4)$$

et $F_{N+1} = 0$; les fonctions κ_i^ϕ vérifient :

$$\rho_l \int_{\phi_{i-1}}^{\phi_i} V(\phi) \kappa_i^\phi(\phi) d\phi = 1. \quad (5.5)$$

La forme de la fonction f^ϕ pouvant varier, on choisit κ_i^ϕ constant dans la section. Reste à déterminer pour quelle variable ϕ ($\kappa_i^R dR = \kappa_i^S dS = \kappa_i^\phi d\phi$). On se place dans le cas général où $\phi = R^\beta$ avec $\beta > 0$.

5.7.3 Ordre du schéma semi-discrétisé

On commence par déterminer l'ordre du schéma semi-discrétisé (5.3). Il nous faut donc évaluer les erreurs locales γ_i :

$$\gamma_i(x) = \partial_x m_i(x) + (F_i + M_i) m_i(x) - F_{i+1} m_{i+1}(x), \quad (5.6)$$

où les m_i ont été définis au paragraphe 2.1. Pour calculer l'ordre global (c'est à dire l'ordre pour le calcul de la densité massique totale du spray), il faudra évaluer $\gamma(x) = \sum_i \gamma_i(x)$. On obtient le résultat suivant :

Théorème 5.11 *Supposons que $f^\phi(x, \cdot)$ est une fonction C^2 en ϕ sur \mathbb{R}^+ , quel que soit $x \geq 0$. Le schéma semi-discrétisé (5.3) est d'ordre 1 en $\Delta\Psi$ si $2\beta + 1 - \alpha > 0$. Sinon, pour $2\beta + 1 - \alpha < 0$, le schéma est d'ordre $\frac{2\beta + 1}{\alpha} < 1$ et pour $2\beta + 1 - \alpha = 0$, on a $\gamma(x) = O(\Delta\Psi \ln \Delta\Psi)$. Pour $\alpha = \beta$, on a un ordre local 2 en $\Delta\Psi$. Plus précisément :*

$$|\gamma_i(x)| \leq \frac{a\rho_l}{6} \Psi_N^{1/\alpha} \left((10 + \alpha) \left\| \frac{\partial f^\phi}{\partial \phi} \right\|_\infty + \frac{\alpha}{2} (\Psi_N + \frac{3}{\alpha} \Delta\Psi) \left\| \frac{\partial^2 f^\phi}{\partial \phi^2} \right\|_\infty \right) (\Delta\Psi)^2. \quad (5.7)$$

Démonstration. – On se limite ici au cas $\alpha = \beta$ (et donc $\Psi = \phi$). On introduit une fonction continue \bar{g} qui va coïncider en Ψ_{i-1} avec la différence $g_i(x, \Psi) = f^\Psi(x, \Psi) - m_i(x) \kappa_i^\Psi(\Psi)$ entre les distributions réelle et approchée :

$$\bar{g}(x, \Psi) = f^\Psi(x, \Psi) - \frac{\int_{\Psi}^{\Psi+\Delta\Psi} \sigma^{3/\beta} f^\Psi(x, \sigma) d\sigma}{\int_{\Psi}^{\Psi+\Delta\Psi} \sigma^{3/\beta} d\sigma}. \quad (5.8)$$

Après diverses manipulations, on obtient γ_i en fonction de \bar{g} :

$$\gamma_i(x) \frac{6}{\rho_l a} = \alpha \int_{\Psi_{i-1}}^{\Psi_i} \Psi^{1+1/\alpha} \partial_{\Psi} \bar{g}(x, \Psi) d\Psi + (1 + \alpha) \int_{\Psi_{i-1}}^{\Psi_i} \Psi^{1/\alpha} \bar{g}(x, \Psi) d\Psi - 3 \int_{\Psi_{i-1}}^{\Psi_i} \Psi^{1/\alpha} g_i(x, \Psi) d\Psi. \quad (5.9)$$

En utilisant des égalités de type Taylor-Lagrange, on peut majorer $|\Psi^{1+1/\alpha} \partial_{\Psi} \bar{g}(\Psi)|$, $|\bar{g}(x, \Psi)|$ et $|g_i(x, \Psi)|$ par des termes d'ordre 1 en $\Delta\Psi$. On obtient l'estimation de l'erreur local de troncature donnée dans le théorème. Et, on a donc une erreur globale d'ordre 1 : $\gamma(x) = \sum_{i=1}^N \gamma_i(x) = O(\Delta\Psi)$ \square

Remarque 3 On a la relation entre f^ϕ et f_0 : $f^\phi(x, \phi) = \frac{8\pi}{\beta} \phi^{\frac{2}{\beta}-1} f_0(4\pi\phi^{\frac{2}{\beta}} + ax)$. Ainsi, $f^\phi(x, \cdot)$ est à support compact et l'hypothèse sur sa régularité suffit pour que ses dérivées d'ordre 1 et 2 en ϕ soient bornées. D'autre part, cette hypothèse est automatiquement vérifiée pour $\beta = 1$, $\beta = 2$ ou $\beta \leq 2/3$. Sinon, sans hypothèse supplémentaire sur f_0 , la régularité de $f^\phi(x, \cdot)$ en $\phi = 0$ est remise en cause.

5.7.4 Théta-schéma : stabilité et positivité

On introduit la discrétisation en x : $x_k = k\Delta x$ avec $\Delta x > 0$ et $k \in \mathbb{N}$. Le θ -schéma correspondant à (5.3) permet d'obtenir une approximation \hat{m}_i^k des $m_i^k = m_i(x_k)$ par :

$$\frac{\hat{m}_i^{k+1} - \hat{m}_i^k}{\Delta x} = F_{i+1}[\theta \hat{m}_{i+1}^{k+1} + (1 - \theta) \hat{m}_{i+1}^k] - (F_i + M_i)[\theta \hat{m}_i^{k+1} + (1 - \theta) \hat{m}_i^k], \quad \hat{m}_i^0 = m_i^0, \quad (5.10)$$

où θ est fixé entre 0 et 1. Ce schéma se met sous la forme :

$$A_\theta \hat{m}^{k+1} = B_\theta \hat{m}^k, \quad (5.11)$$

où $m^k = (m_1^k, m_2^k, \dots, m_N^k)^t$ et où les matrices A_θ et B_θ sont bidiagonales, les coefficients diagonaux étant $1 + \theta\Delta x(F_i + M_i)$ pour A_θ et $1 - (1 - \theta)\Delta x(F_i + M_i)$ pour B_θ avec $i \in \{1, \dots, N\}$; les coefficients de la diagonale supérieure sont $-\theta\Delta x F_i$ pour A_θ et $(1 - \theta)\Delta x F_i$ pour B_θ avec $i \in \{2, \dots, N\}$.

On détermine une condition de type CFL pour la stabilité du schéma (5.11) ainsi qu'une condition pour que le schéma donne des valeurs toujours positives des densités massiques de goutte \hat{m}_i^k . Pour donner ces conditions, il faut tout d'abord donner une propriété sur les coefficients $M_i + F_i$ et plus précisément, sur $\mathcal{M} = \max \{M_i + F_i, \quad i \in \{1, \dots, N\}\}$.

Lemme 5.12 Coefficients – Si $\alpha < 2$ alors \mathcal{M} varie comme $(\Delta\Psi)^{-2/\alpha}$.

Si $\alpha = 2$ alors $\mathcal{M} = F_1 + M_1 = \frac{3a}{8\pi} \frac{3 + \beta}{1 + \beta} (\Delta\Psi)^{-1}$

Si $\alpha > 2$ alors, pour N 'assez grand', on a $\mathcal{M} = F_N + M_N$ et \mathcal{M} varie comme $(\Delta\Psi)^{-1}$.

Démonstration. – Cela se montre en écrivant les coefficients sous la forme :

$$M_i + F_i = \frac{a}{8\pi} \frac{3 + \beta}{1 + \beta} (\Delta\Psi)^{-2/\alpha} \lambda(i - 1), \quad \lambda(x) = \frac{3(x + 1)^{\frac{1+\beta}{\alpha}} + (\beta - 2)x^{\frac{1+\beta}{\alpha}}}{(x + 1)^{\frac{3+\beta}{\alpha}} - x^{\frac{3+\beta}{\alpha}}} \quad (5.12)$$

et en étudiant la fonction λ . \square

On a le résultat de stabilité suivant, pour le schéma (5.11) :

Théorème 5.13 Stabilité – Supposons que les $M_i + F_i$ sont positifs et 2 à 2 distincts. Si $\theta \geq 1/2$, alors le schéma (5.11) est inconditionnellement stable.

Si $\theta < 1/2$, alors le schéma (5.11) est stable si et seulement si $\mathcal{M} \leq \frac{2}{(1-2\theta)\Delta x}$.

Démonstration. – Pour montrer ce résultat, on considère la matrice $C = A_\theta^{-1}B_\theta$. Celle-ci est triangulaire supérieure et ses termes diagonaux s'écrivent :

$$c_{ii} = \varphi_\theta(F_i + M_i), \quad \varphi_\theta(y) = \frac{1 - y(1 - \theta)\Delta x}{1 + y\theta\Delta x}. \quad (5.13)$$

La fonction φ_θ est continue et strictement décroissante sur \mathbb{R}^+ . Les $M_i + F_i$ étant 2 à 2 distincts, les c_{ii} le sont aussi. Donc C est diagonalisable, ses valeurs propres étant les c_{ii} . Ainsi, le schéma est stable si et seulement si pour tout $i \in \{1, \dots, N\}$, on a $|c_{ii}| \leq 1$. D'où le théorème. \square

D'après la forme du schéma (5.11), on démontre directement le théorème suivant :

Théorème 5.14 Positivité – Le schéma (5.11) donne des valeurs positives des \hat{m}_i^k quelles que soient les conditions 'initiales' m_i^0 positives si et seulement si on a $\mathcal{M} \leq \frac{1}{(1-\theta)\Delta x}$.

On peut remarquer de plus que le schéma implicite ($\theta = 1$) donne toujours des valeurs positives des \hat{m}_i^k quelles que soient les conditions 'initiales' m_i^0 positives.

Le Lemme 4.1 et les Théorèmes 4.2 et 4.3 permettent donc de déterminer les conditions CFL pour la stabilité et la positivité pour les différentes valeurs de α et β . En particulier, dans le cas $\alpha < 2$, \mathcal{M} varie comme $\Delta\Psi^{-2/\alpha}$. On va donc avoir des conditions CFL du type $\frac{a\Delta x}{\Delta\Psi^{2/\alpha}}$ inférieur à une constante, c'est à dire une condition plus restrictive que dans le cas $\alpha \geq 2$. Prenons par exemple le cas $\alpha = \beta = 1$ ($\Delta\Psi = \Delta R$) couramment utilisé et comparons-le au cas $\alpha = 2, \beta = 1$ ($4\pi\Delta\Psi = \Delta S$). Les conditions du Théorème 4.2 sont réalisées dans les deux cas, car la fonction λ du Lemme 4.1 est strictement décroissante. Et quand $\theta < 1/2$, la condition de stabilité est, pour ces 2 cas :

$$a\frac{\Delta x}{\Delta S} \leq \frac{2}{3(1-2\theta)}, \quad \frac{a\Delta x}{4\pi(\Delta R)^2} \leq \frac{2}{3(1-2\theta)}. \quad (5.14)$$

Les conditions de positivité, quand $\theta < 1$, sont de la même forme que pour la stabilité. Ainsi, on a des conditions CFL plus restrictives dans le premier cas que dans le second.

Finalement, dans le cas général, on obtient des conditions CFL pour la stabilité et la positivité, peu restrictives pour $\alpha \geq 2$. D'autre part, parmi ces cas, on peut montrer que la précision la plus grande (c'est à dire avec un ordre 1 et la constante intervenant dans la majoration de γ minimale) est obtenue pour $\alpha = 2$ et $\beta = 1$ [4], cas qui, par ailleurs, ne nécessite pas de régularité supplémentaire sur f_0 . C'est le meilleur compromis entre précision, stabilité et positivité. Ainsi, le cas 'optimal' est une discrétisation uniforme en surface et une distribution choisie constante en rayon.

Remerciements. Je tiens à remercier Marc Massot pour m'avoir guidé tout au long de ce travail et Jean-François Maître pour ses conseils avisés.

Bibliographie

- [1] Domelevo K., The kinetic-sectional approach for evaporating sprays, prépublication no 9820, MIP UMR 5640, Toulouse (1998)
- [2] Greenberg J.B., Silverman I., Tambour Y., On the origin of spray sectional conservation equations, *Combustion and Flame*, 93 (1993) 90–96
- [3] Laurent F., Massot M., Multi-fluid modeling of laminar poly-disperse spray flames : origin, assumptions and comparison of the sectional and the sampling methods, prépublication MAPLY, UMR 5585 Lyon (2000), à paraître dans *Combustion Theory and Modelling*
- [4] Laurent F., Massot M., Numerical analysis of eulerian multi-fluid models in the context of kinetic formulations for dilute evaporating sprays, en préparation (2001)
- [5] Laurent F., Massot M., Villedieu P., Eulerian multi-fluid modeling for the numerical simulation of polydisperse dense liquid spray, prépublication MAPLY, UMR 5585 Lyon (2001)
- [6] Laurent F., Santoro V., Gomez A., Smooke M.D., Massot M., Improvement of multi-fluid modeling for laminar poly-disperse spray diffusion flames : treatment of the distribution tail, computations and experiments, en préparation (2001)
- [7] Massot M., Kumar M., Gomez A., Smooke M.D., Counterflow spray diffusion flames of heptane : computations and experiments, 27th Symp. on Combustion, The Comb. Institute (1998) 1975–1983
- [8] Massot M., Villedieu P., Modélisation multi-fluide eulérienne pour la simulation de brouillards denses polydispersés, *C.R.A.S. Paris Sér. I Math.* 332 (2001) 869-874
- [9] Williams F.A., Spray combustion and atomization, *Physics of Fluids*, 1 (1958) 541-545

Chapitre 6

Propagation de flammes gazeuses dans la limite d'une diffusion massique nulle.

Ce chapitre fait l'objet d'une note aux CRAS, donnée en annexe et d'un article en préparation avec M. Massot et V. Volpert.

6.1 Introduction

La propagation de flammes gazeuses sous forme d'ondes stationnaires monodimensionnelles pour le modèle thermo-diffusif du système de réaction-diffusion a fait l'objet de nombreuses études. En particulier, leur existence a été montrée, par exemple, dans [BNS83] pour une chimie simple et dans [VVV94] pour un système de réactions irréversibles, formant un graphe ouvert. Dans [Gio99] l'existence d'onde est montrée pour une chimie complexe formée de réactions réversibles et avec un transport détaillé.

Différents outils sont utilisés pour montrer ces résultats, comme le degré topologique de Leray-Schauder, utilisé dans [BNS83] et [Gio99] pour montrer l'existence d'onde sur des intervalles bornés, avec ensuite, une extension à la droite réelle tout entière. Cependant, le degré topologique pour des opérateurs elliptiques dans des domaines non bornés comme \mathbb{R} , peut être défini [Dan75], [Dan77], [VV94], [VV89], [VVV94], [VVC99]. Une de ces approches est basée sur la théorie des opérateurs de Fredholm [Fen76], [Isn74], [Skr73]. Ainsi, dans [VVC99], le degré est construit pour des opérateurs elliptiques, de Fredholm et propres dans des cylindres non bornés et des espaces de Hölder à poids. Une application aux opérateurs généraux de réaction-diffusion y est également donnée.

D'autre part, dans l'asymptotique des grandes énergies d'activation, la vitesse de l'onde est donnée dans les cas sans [Nov61] et avec [ZBLM85] diffusion de masse. Cependant, on constate que cette valeur asymptotique tend vers l'infini lorsque le nombre de Lewis, rapport du coefficient de diffusion thermique sur le coefficient de diffusion massique, tend vers l'infini. Mais, dans le cas d'une chimie simple, il est montré dans [LL96] que la vitesse de l'onde admet une limite finie quand le nombre de Lewis tend vers l'infini.

Ici, on s'intéresse à une chimie complexe du même type que dans [VVV94]. Ce type de système peut être ramené à un système sur des variables monotones par un changement de variables [VVV94]. On redémontre ici les résultats d'existence d'onde progressive pour un nombre de Lewis plus grand que 1, en utilisant une méthode plus directe que dans [VVV94], basée sur une modification des équations et utilisant un degré topologique défini pour des ouverts non bornés. Puis, on s'intéresse, au comportement des ondes progressives

quand le nombre de Lewis tend vers l'infini, généralisant ainsi une partie des résultats de [LL96].

Par soucis de clarté, et puisque la difficulté principale de ce type de système est l'éventuelle non linéarité du terme source en les concentrations, on détaille d'abord les résultats pour un système plus simple, correspondant à une seule réaction d'ordre n . Après avoir formulé plus précisément le problème, on donne, dans la section 6.3, les grandes lignes de la définition d'un degré topologique pour des opérateurs elliptiques dans des domaines non bornés, définition qui se réfère essentiellement à [VVC99]. Puis, remarquant que cette théorie ne s'applique pas directement à notre problème, on va introduire un système perturbé. On donne alors, dans une troisième section, des estimations a priori pour ce système, qui serviront à la fois pour l'utilisation du degré topologique et pour les passages à la limite. On montre, dans la section 6.5, l'existence de solutions pour le système secondaire en se ramenant à un système d'une équation pour lequel on a un résultat d'existence et d'unicité. Puis, un passage à la limite permet de montrer l'existence de solution pour le problème initial avec diffusion. Un second passage à la limite permet de montrer que des solutions du problème avec diffusion tendent vers des solutions du problème sans diffusion. Enfin, on montre comment ces résultats se généralisent à une chimie complexe où l'on considère encore des réactions exothermiques.

6.2 Formulation du problème : cas d'une réaction d'ordre n

On considère, dans un premier temps, le cas d'un mélange gazeux de 2 espèces A et B , respectivement réactif et produit d'une réaction exothermique d'ordre n : $nA \rightarrow B$. Le système de réaction-diffusion s'écrit alors :

$$\partial_t T - \kappa \partial_{xx} T = qk(T)(1 - B)^n \quad (6.1)$$

$$\partial_t B - d \partial_{xx} B = k(T)(1 - B)^n. \quad (6.2)$$

où T est la température du gaz, où on note encore B la fraction molaire du produit de la réaction B , où κ est le coefficient de diffusion thermique et d le coefficient de diffusion massique, où q est la chaleur de réaction et k le coefficient de vitesse de réaction. Le nombre de Lewis est alors : $Le = \kappa/d$.

On considère le problème monodimensionnel $x \in \mathbb{R}$ et on cherche des ondes progressives de vitesse c inconnue, c'est à dire des solutions du problème (6.1), (6.2) sous la forme de fonctions de $z = x - ct$ avec les limites données en $\pm\infty$: quand z tend vers $+\infty$, on a le gaz frais à la température T_0 , composé uniquement de combustible A ; quand z tend vers $-\infty$, on a le gaz brûlé à la température $T_* > T_0$, composé uniquement du produit de la réaction B . On veut donc que les fonctions T et B soient de la forme suivante :

$$T(t, x) = T_0 + (T_* - T_0) \theta(x - ct), \quad (6.3)$$

$$B(t, x) = \alpha(x - ct), \quad (6.4)$$

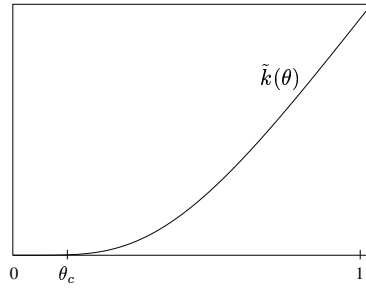
où θ et α sont de limite 1 en $-\infty$ et 0 en $+\infty$.

Ainsi, on cherche une vitesse c et des profils θ et α dans $C^{2+\delta}(\mathbb{R})$ solution du système :

$$(\mathcal{S}_d) \quad \begin{cases} \kappa \theta'' + c \theta' + \tilde{k}(\theta)(1 - \alpha)^n = 0, \\ d \alpha'' + c \alpha' + \tilde{k}(\theta)(1 - \alpha)^n = 0, \end{cases}$$

avec les conditions aux limites

$$(\mathcal{L}) \quad \begin{cases} \lim_{z \rightarrow -\infty} \theta(z) = 1, & \lim_{z \rightarrow -\infty} \alpha(z) = 1, \\ \lim_{z \rightarrow +\infty} \theta(z) = 0, & \lim_{z \rightarrow +\infty} \alpha(z) = 0, \end{cases}$$

FIG. 6.1 – Forme de la fonction \tilde{k} .

où la fonction \tilde{k} est telle que $\tilde{k}(\theta) = k(T)$. On remarque que, nécessairement, $q = T_* - T_0$. C'est pourquoi ce coefficient disparaît dans le système (\mathcal{S}_d) .

La fonction \tilde{k} est régulière (au moins C^2), croissante et proche du coefficient d'Arrhenius : afin d'éviter le problème de la frontière froide [ZBLM85] on a introduit une température d'allumage θ_c . La fonction \tilde{k} (voir la figure 6.2) est alors telle que :

$$\tilde{k}(\theta) = \begin{cases} k_0 \exp\left(-\frac{E}{R[T_0 + (T_* - T_0)\theta]}\right) & \text{si } \theta \geq \theta_c + \eta \\ 0 & \text{si } \theta \leq \theta_c \end{cases}$$

où E est l'énergie d'activation et R la constante universelle des gaz et $\eta > 0$ un réel 'petit'. On supposera que θ_c est tel que $0 < \theta_c < 1 - \eta$. Ainsi, la réaction ne se produit pas en $+\infty$ (et le terme non linéaire s'annule bien en $\pm\infty$). On peut remarquer que dans [Mar86] et [Bon97], la température d'allumage est la température des gaz frais $\theta_c = 0$, mais ce cas limite n'est pas abordé, ici.

On s'intéressera également au problème sans diffusion :

$$(\mathcal{S}_0) \quad \begin{cases} \kappa\theta'' + c\theta' + \tilde{k}(\theta)(1 - \alpha)^n = 0, \\ c\alpha' + \tilde{k}(\theta)(1 - \alpha)^n = 0, \end{cases}$$

avec les mêmes conditions aux limites (\mathcal{L}) . On va montrer l'existence de solution pour les systèmes (\mathcal{S}_d) et (\mathcal{S}_0) et surtout, on va faire le lien entre les solutions des deux systèmes.

Pour obtenir les résultats d'existence, on commence par se placer dans le cadre de systèmes de réaction-diffusion plus généraux, c'est à dire les systèmes du type :

$$(\mathcal{S}_{rd}) \quad aw'' + cw' + F(w) = 0, \quad (6.5)$$

avec les conditions aux limites :

$$\lim_{z \rightarrow \pm\infty} w(z) = w^\pm, \quad w^+ \neq w^-, \quad (6.6)$$

où $z \in \mathbb{R}$, $w = (w_1, \dots, w_N)^t$ où a est une matrice constante de taille $N \times N$, diagonale avec des termes positifs sur la diagonale et où w^+ et w^- sont des vecteurs de taille N tels que $F(w^\pm) = 0$. On donne, dans la section suivante, des conditions sous lesquelles on peut définir le degré topologique pour des opérateurs de réaction-diffusion généraux et pour notre cas particulier et on montre comment ce degré peut nous servir à obtenir l'existence de solutions.

6.3 Degré topologique

Le degré topologique est défini de la manière suivante : posons E_1 et E_2 deux espaces de Banach. Supposons qu'on ait une classe donnée ϕ d'opérateurs agissant de E_1 sur E_2 et une classe H d'homotopies. Supposons de plus que, pour tout ouvert borné $D \subset E_1$ et pour tout opérateur $A \in \phi$ tel que $A(u) \neq 0$ pour u appartenant à la frontière ∂D de D , il existe un entier $\gamma(A, D)$ satisfaisant les conditions suivantes :

1. Si $A_\tau(u) \in H$ avec $A_\tau(u) \neq 0$ pour $u \in \partial D$ et $\tau \in [0, 1]$, alors $\gamma(A_0, D) = \gamma(A_1, D)$.
2. Soit $D \subset E_1$ un ouvert quelconque de E_1 et D_1 et D_2 des ouverts de D tels que $D_1 \cap D_2 = \emptyset$. On suppose que A est un élément de ϕ qui ne s'annule pas pour $u \in \bar{D} \setminus (D_1 \cup D_2)$. Alors :

$$\gamma(A, D) = \gamma(A, D_1) + \gamma(A, D_2).$$

3. Il existe un opérateur linéaire borné $J : E_1 \rightarrow E_2$, d'inverse borné défini sur E_2 et tel que, pour tout ouvert borné $D \subset E_1$ contenant 0, on ait $\gamma(J, D) = 1$.

Alors $\gamma(A, D)$ est appelé degré topologique.

Ici, on redonne les grandes lignes de la théorie de la construction du degré topologique pour les opérateurs de Fredholm propres, développée dans [VVC99] sur le cas plus général des cylindres non bornés. Ainsi, après avoir défini les opérateurs et les espaces considérés, on identifie les conditions sous lesquelles l'opérateur linéarisé est un opérateur de Fredholm. Ensuite on donne une condition pour que A soit un opérateur propre. On obtient alors un résultat d'existence et d'unicité du degré topologique pour de tels opérateurs. Enfin, on montre comment appliquer cela aux systèmes de réaction-diffusion généraux et à notre problème particulier.

6.3.1 Opérateurs et espaces

On veut ici définir le degré topologique pour les opérateurs du type :

$$Au = a(z)u'' + b(z)u' + F(z, u) + K(u), \quad (6.7)$$

où $u = (u_1, \dots, u_N)$, $a(z)$ et $b(z)$ sont des matrices de taille $N \times N$, fonctions régulières de z , $F = (F_1, \dots, F_N)$ est une fonction vectorielle et K un opérateur de dimension finie. L'opérateur A agit de l'espace de Hölder à poids $E_1 = C_\mu^{2+\delta}(\mathbb{R})$ dans $E_2 = C_\mu^\delta(\mathbb{R})$ avec $0 < \delta < 1$. Si $\|\cdot\|^{(k+\delta)}$ est la norme de $C^{k+\delta}(\mathbb{R})$, la norme de $C_\mu^{k+\delta}(\mathbb{R})$ est définie par

$$\|u\|_\mu^{(k+\delta)} = \|\mu u\|^{(k+\delta)}.$$

Le poids μ est une fonction 'régulière', positive, qui tend vers $+\infty$ quand z tend vers $\pm\infty$ et telle que $\mu_1 = \mu'/\mu$ et $\mu_2 = \mu''/\mu$ sont bornées pour une norme de Hölder et qui tendent vers 0 quand z tend vers $\pm\infty$. On prendra par exemple $\mu(z) = 1 + z^2$.

6.3.2 Opérateurs linéaires

On considère dans cette section l'opérateur linéaire suivant :

$$Lu = a(z)u'' + b(z)u' + c(z)u \quad (6.8)$$

agissant de $C^{2+\delta}(\mathbb{R})$ dans $C^\delta(\mathbb{R})$. Les fonctions a , b et c sont des fonctions de $C^\delta(\mathbb{R})$ (à valeur dans l'ensemble des matrices de taille $N \times N$). On suppose de plus que la fonction a vérifie la condition d'ellipticité, c'est à dire qu'il existe $\sigma > 0$ tel que :

$$\forall z \in \mathbb{R} \quad \forall \xi \in \mathbb{R}^N \quad (a(z)\xi, \xi) \geq \sigma |\xi|^2,$$

où (\cdot, \cdot) désigne le produit scalaire de \mathbb{R}^N . Enfin, on suppose que les fonctions a , b et c ont des limites a^\pm , b^\pm et c^\pm en $\pm\infty$. On définit alors l'opérateur L^\pm agissant de $C^{2+\delta}(\mathbb{R})$ dans $C^\delta(\mathbb{R})$ par :

$$L^\pm u = a^\pm u'' + b^\pm u' + c^\pm u.$$

Pour ces opérateurs, on définit les conditions 1 et 1' qui sont équivalentes :

Condition 1 : Si $L^\pm u = 0$ avec $u \in C^{2+\delta}(\mathbb{R})$, alors $u = 0$.

Condition 1' : Quel que soit le réel ξ , la matrice $-\xi^2 a^\pm + i\xi b^\pm + c^\pm$ est de déterminant non nul.

On a le lemme suivant :

Lemme 6.1 *Le noyau de L est de dimension finie et son image est fermée (c'est à dire que L est résoluble normalement) si et seulement si la condition 1 est réalisée.*

La démonstration de ce lemme a été faite dans [VVC99]. Pour montrer que le noyau est de dimension finie, on montre que la boule unité fermée de cet ensemble est compacte, grâce à des suites. La condition 1 sert à montrer la convergence uniforme sur \mathbb{R} d'une sous-suite. C'est l'estimation de Schauder qui permet alors de montrer la convergence dans $C^{2+\delta}(\mathbb{R})$. Celle-ci est donnée par :

$$\forall u \in C^{2+\delta}(\mathbb{R}) \quad \|u\|^{(2+\delta)} \leq k_1 \|Lu\|^{(\delta)} + k_2 \max_z |u|,$$

où k_1 et k_2 sont des constantes. On utilise aussi les suites pour montrer que l'image est fermée.

On définit aussi les conditions 2 et 2' qui sont également équivalentes :

Condition 2 : Quel que soit le réel $\lambda \geq 0$, si $L^\pm u - \lambda u = 0$ avec $u \in C^{2+\delta}(\mathbb{R})$, alors $u = 0$.

Condition 2' : Quel que soit le réel ξ et le réel $\lambda \geq 0$, la matrice $-\xi^2 a^\pm + i\xi b^\pm + c^\pm - \lambda$ est de déterminant non nul.

Théorème 6.2 *Si la condition 2 est réalisée, alors L est un opérateur de Fredholm d'indice 0.*

La démonstration de ce théorème est dans [VVC99]. Il suffit de faire une homotopie entre $A - \lambda I$ et l'opérateur $\Delta - \lambda I$ dont on sait qu'il est Fredholm d'indice 0. Le λ choisi doit être suffisamment grand pour que tout au long de l'homotopie, la condition 1 soit réalisée (de sorte qu'on a affaire à des opérateurs de Fredholm ou à des ϕ^+ opérateurs). Une autre homotopie entre A et $A - \lambda I$ permet de conclure.

Remarque 1 Si la condition 2 est réalisée, alors l'opérateur L , en tant qu'opérateur de $C_\mu^{2+\delta}(\mathbb{R})$ dans $C_\mu^\delta(\mathbb{R})$ est encore un opérateur de Fredholm.

6.3.3 Opérateur propre

La propriété pour un opérateur $A : E_1 \rightarrow E_2$ d'être propre (c'est à dire que pour tout compact $D \subset E_2$ et pour toute boule B de E_1 , l'ensemble $A^{-1}(D) \cap B$ est compact) est utilisée pour la construction du degré topologique. De plus, on a besoin de cette propriété pour des opérateurs dépendant d'un paramètre. On considère donc l'opérateur semi-linéaire dépendant du paramètre $\tau \in [0, 1]$ défini par :

$$A(u, \tau) = a_\tau(z)u'' + b_\tau(z)u' + F_\tau(z, u). \quad (6.9)$$

L'opérateur A agit de $E_1' = C_\mu^{2+\delta}(\mathbb{R}) \times [0, 1]$ dans $C_\mu^\delta(\mathbb{R})$. On suppose que ses coefficients et la non-linéarité vérifient les conditions suivantes :

1. Les fonctions a_τ et b_τ sont dans $C^\delta(\mathbb{R})$, $D_u F_\tau(z, u) \in C^\delta(\mathbb{R}, |u| \leq R)$ pour tout τ et pour tout R .
2. Pour chaque τ , les fonctions a_τ et b_τ admettent des limites a_τ^\pm et b_τ^\pm en $\pm\infty$ et $D_u F_\tau(z, u) \rightarrow c^\pm(\tau)$ quand z tend vers $\pm\infty$ et u vers 0.
3. Les fonctions a_τ et b_τ tendent vers a_{τ_0} et b_{τ_0} dans $C^\delta(\mathbb{R})$, quand τ tend vers τ_0 . La fonction F_τ tend vers F_{τ_0} dans $C_\mu^\delta(\mathbb{R}, |u| \leq R)$, quand τ tend vers τ_0 et ce, quel que soit R .

On a le théorème suivant :

Théorème 6.3 *Si la condition 1 est réalisée, alors A est un opérateur propre.*

La démonstration de ce théorème est dans [VVC99].

Remarque 2 L'opérateur A , en tant qu'opérateur agissant de $C^{2+\delta}(\mathbb{R})$ dans $C^\delta(\mathbb{R})$ n'est pas un opérateur propre. En effet, pour chaque fonction $u \in C^{2+\delta}(\mathbb{R})$, la fonction $u_h : z \mapsto u(z+h)$ a la même image que u par A . Or la famille $(u_h)_{h \in \mathbb{R}}$ est bornée mais, en général, non compacte. C'est pourquoi on introduit les espaces de Hölder à poids. Cependant, il ne faut pas choisir un poids qui aurait un comportement exponentiel en l'infini : les solutions de l'équation risqueraient de ne pas appartenir à l'espace à poids considéré.

6.3.4 Existence du degré topologique

On définit les 2 classes suivantes :

Classe ϕ : ensemble des opérateurs $A(u)$ définis par (6.7), admettant deux dérivées de Fréchet et tel qu'en tout point u de E_1 , $A'(u)$ satisfait la condition 2.

Classe H : la classe des homotopies A_τ données par (6.9) et telle que pour tout $\tau \in [0, 1]$, on a $A_\tau \in \phi$. On introduit également un opérateur de normalisation J_τ agissant de E_1 dans E_2 tel que $J_\tau u = u'' - ru$.

On a alors le théorème suivant :

Théorème 6.4 *Il existe un et un seul degré topologique pour les classe ϕ et H et l'opérateur de normalisation J_τ .*

La démonstration de ce théorème est dans [VVC99]. A noter que pour un ouvert borné $D \subset E_1$, si 0 est une valeur régulière de A (c'est à dire si $D \cap A^{-1}(0)$ est un ensemble fini $\{u_1, \dots, u_k\}$ et que les opérateurs $A'(u_i)$ n'ont pas de valeur propre nulle) alors le degré topologique de A par rapport à D est donné par la formule :

$$\gamma(A, D) = \sum_{i=1}^k (-1)^{\nu_i} \quad (6.10)$$

où ν_i est la somme des multiplicités des valeurs propres positives de $A'(u_i)$.

Le degré topologique permet de montrer l'existence de solution grâce à la propriété suivante :

Proposition 6.5 *Soit A un opérateur de ϕ et D un ouvert borné de E_1 . Si A ne s'annule pas sur la frontière de D et si $\gamma(A, D) \neq 0$, alors il existe $u \in D$ tel que $Au = 0$.*

Ainsi, lorsque l'on cherche à montrer qu'il existe une solution $u \in E_1$ de $Au = 0$, avec $A \in \phi$, il est intéressant de se ramener, par une homotopie, à un système plus simple $A_1u = 0$, pour lequel on sait qu'il existe une unique solution u_1 . On sait ainsi que, si l'opérateur $A'_1(u_1)$ n'admet pas de valeur propre nulle, alors son degré topologique par rapport à un ouvert borné contenant u_1 est 1 ou -1, c'est à dire qu'il est non nul.

Supposons qu'on ait identifié une homotopie $A_\tau \in H$ entre $A_0 = A$ et A_1 . Il nous suffit alors de trouver un ouvert borné B contenant tous les zéros de A_τ pour $\tau \in [0, 1]$. C'est possible si on a des estimations a priori dans E_1 indépendantes de τ . Le degré topologique de A par rapport à B est le même que celui de A_1 , c'est à dire 1 ou -1. L'opérateur A ne s'annulant pas sur le bord de B , le problème $Au = 0$ admet donc au moins une solution dans cette boule.

6.3.5 Système de réaction-diffusion

Soit A l'opérateur défini par le membre de gauche de (\mathcal{S}_{rd}) . La définition du degré topologique pose problème pour cet opérateur. En effet, si w est une solution de $Aw = 0$, alors $w_h : z \mapsto w(z + h)$ est aussi solution. Or, la famille $(w_h)_{h \in \mathbb{R}}$ est bornée dans $C^{2+\delta}(\mathbb{R})$ mais pas dans $C_\mu^{2+\delta}(\mathbb{R})$. Mais, d'après le paragraphe précédent, il faut considérer les espaces à poids pour définir le degré topologique (afin que A soit propre). Ainsi, dans tout domaine borné D , A est soit nul en des points du bord de D et on ne peut pas définir le degré topologique de (A, D) , soit non nul dans tout le domaine D et on perd l'utilité du degré topologique. Un autre problème vient du fait que 0 est valeur propre de l'opérateur linéarisé, (en effet, si $w \in C^{3+\delta}(\mathbb{R})$ est solution de $Aw = 0$, alors w' est tel que $A'(w)w' = 0$). Ainsi, il est impossible d'utiliser une formule du type (6.10) pour évaluer le degré topologique d'un opérateur de cette forme.

Pour éviter ces difficultés, on peut introduire une fonctionnalisation de c [VV89], [VVV94], [VVC99] : à la place de la constante c , on considère une fonctionnelle $c(w)$ qui satisfait les conditions de Lipschitz sur tout ensemble borné de $C^{2+\delta}(\mathbb{R})$, qui a une dérivé de Fréchet $c'(w)$ telle que, pour toute solution w de $Aw = 0$, on a $c'(w), w' > \neq 0$ et telle que $\tilde{c}(h) = c(w_h(z))$ est une fonction décroissante de h avec $\tilde{c}(-\infty) = \infty$ et $\tilde{c}(\infty) = -\infty$. Comme dans [VV89], on utilise la fonctionnalisation suivante :

$$c(w) = \ln \int_{\mathbb{R}} |w(z) - w^+|^2 \sigma(z) dz, \quad (6.11)$$

où σ est une fonction croissante sur \mathbb{R} , de limite 0 en $-\infty$ et 1 en $+\infty$ et telle que $\int_{-\infty}^0 \sigma(z) dz < \infty$. Ainsi, la valeur propre nulle du problème linéarisé est ramenée dans le demi-plan gauche. D'autre part, on a particularisé un élément de la famille de solutions et la vitesse c n'est plus une inconnue.

Pour se ramener à des limites nulles en l'infini, on introduit une fonction Φ de \mathbb{R} dans \mathbb{R} , C^∞ , telle que $\Phi(z)$ vaut 0 si $z \geq 1$ et vaut 1 si $z \leq 0$. On introduit aussi la fonction ψ définie pour $z \in \mathbb{R}$ par $\psi(z) = [1 - \Phi(z)]w^+ + \Phi(z)w^-$. On pose alors $u = w - \psi$ et le système (\mathcal{S}_{rd}) se ramène à :

$$(\mathcal{S}_f) \quad au'' + \tilde{c}(u)u' + \tilde{F}(u) + K(u) = 0, \quad (6.12)$$

avec les conditions aux limites :

$$\lim_{z \rightarrow \pm\infty} u(z) = 0, \quad (6.13)$$

où :

$$\tilde{F}(u) = a\psi'' + F(u + \psi) = a\Phi''(z)(w^- - w^+) + F(u + \psi)$$

$$\tilde{c}(u) = c(u + \psi) \quad K(u) = \tilde{c}(u)\psi'.$$

On pose alors \tilde{A} l'opérateur de E_1' dans E_2 défini par :

$$\tilde{A}(u, \tau) = a_\tau u'' + \tilde{c}(u)u' + \tilde{F}_\tau(u) + K(u)$$

avec

$$\tilde{F}_\tau(u) = a_\tau \Phi''(z)(w_\tau^- - w_\tau^+) + F_\tau(u + \psi_\tau)$$

$$\tilde{c}(u) = c(u + \psi_\tau) \quad K(u) = \tilde{c}(u)\psi'_\tau \quad \psi_\tau(z) = [1 - \Phi(z)]w_\tau^+ + \Phi(z)w_\tau^-.$$

L'opérateur linéarisé est $\tilde{A}'(u, \tau)v = Lv + K'(u)v + Mv$ avec :

$$Lv = a_\tau v'' + \tilde{c}(u)v' + c_\tau v \quad c_\tau = \tilde{F}'_\tau(u) \quad Mv = u' < \tilde{c}'(u), v > .$$

Ici $< \tilde{c}'(u), v >$ représente l'action de la fonctionnelle linéaire $\tilde{c}'(u)$ sur l'élément $v \in C_\mu^{2+\delta}(\mathbb{R})$. Supposons que l'opérateur L satisfait la condition 2. Étant donné que la somme d'un opérateur de Fredholm et d'un opérateur de dimension finie est encore un opérateur de Fredholm, l'opérateur $\tilde{A}'(u, \tau)v - \lambda v$ est Fredholm pour tout $\lambda \geq 0$. L'opérateur L^\pm de la condition 2 apparaît comme une linéarisation du membre de gauche de (\mathcal{S}_f) autour de w^\pm :

$$L^\pm v = a_\tau v'' + \tilde{c}(u)v' + F'_\tau(w^\pm)v.$$

La condition 2' s'écrit alors comme la condition (C) :

$$(C) \quad \forall \lambda \geq 0 \quad \forall \xi \in \mathbb{R} \quad \det(-a_\tau \xi^2 + \tilde{c}(u)i\xi + F'_\tau(w^\pm) - \lambda I) \neq 0.$$

6.3.6 Introduction du système perturbé

Dans notre cas, on a :

$$w = \begin{pmatrix} \theta \\ \alpha \end{pmatrix} \quad a = \begin{pmatrix} \kappa & 0 \\ 0 & d \end{pmatrix} \quad F(w) = \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix} \tilde{k}(\theta)(1 - \alpha)^n \quad w^+ = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix} \quad w^- = \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix}.$$

On s'aperçoit alors que $F'(w^+)$ est nulle, tout comme $F'(w^-)$ si $n > 1$, et si $n = 1$, on a :

$$F'(w^-) = \begin{pmatrix} 0 & -\tilde{k}(1) \\ 0 & -\tilde{k}(1) \end{pmatrix}.$$

Ainsi, la condition (C) n'est pas réalisée (le déterminant est nul pour $\lambda = \xi = 0$). La théorie précédente ne s'applique donc pas directement à ce système.

Pour supprimer la valeur propre nulle du système linéarisé en $-\infty$, on va ajouter un petit paramètre ϵ que, par la suite, on fera tendre vers 0. On considère donc le système perturbé :

$$(\mathcal{S}_{d,\epsilon}) \quad \begin{cases} \kappa\theta'' + c\theta' + (1-\epsilon)\tilde{k}(\theta)(1-\alpha)^n + \epsilon\tilde{k}(\theta)(1-\alpha) + \epsilon^2\tilde{k}(\theta)(\alpha-\theta) = 0, \\ d\alpha'' + c\alpha' + (1-\epsilon)\tilde{k}(\theta)(1-\alpha)^n + \epsilon\tilde{k}(\theta)(1-\alpha) = 0, \end{cases}$$

avec les conditions aux limites (\mathcal{L}) . On vérifie aisément que cet ajout à l'équation permet de vérifier la condition (\mathcal{C}) en $-\infty$. Pour ce qui est de condition (\mathcal{C}) en $+\infty$, un changement de variables $t = \zeta\theta$ et $a = \zeta\alpha$ permettra de conclure, avec, pour $z \geq 1$, $\zeta(z) = e^{\lambda z}$ et, $z \leq 0$, $\zeta(z) = 1$. Mais avant de réaliser ce changement de variables (ce sera fait dans la section 6.5) et pour bien choisir le λ , on a besoin d'en savoir plus sur le comportement des solutions en $+\infty$, qui sera étudié dans la section 6.4. Le schéma de la démarche avec les différents systèmes considérés est présenté sur la figure 6.3.6.

Ainsi, on va montrer, par une méthode de degré topologique, que le système $(\mathcal{S}_{d,\epsilon})$ admet une solution, et on passera ensuite à la limite quand ϵ tend vers 0 pour retrouver (\mathcal{S}_d) .

6.4 Estimations a priori

Dans cette section, on va donner des estimations a priori indépendantes de ϵ et d avec $\epsilon \geq 0$ assez petit et $0 < d \leq \kappa$. Celles-ci sont suffisamment générales pour permettre à la fois de servir pour montrer l'existence de solution du système secondaire dans la section 6.5 et pour réaliser les passages à la limite qui permettent de passer du système secondaire au système initial avec diffusion puis du système avec diffusion au système sans diffusion (section 6.6).

6.4.1 Résultats préliminaires

Commençons par montrer un lemme qui sera utile pour déterminer des estimations :

Lemme 6.6 *Soit I l'intervalle $] - \infty, b]$ ou $] - \infty, b[$. Soit u une fonction de $C^{1+\delta}(\mathbb{R})$ et a une constante positive. Si $u' + au \geq 0$ sur I alors $u \geq 0$ sur I . Si de plus, $u' + au > 0$ sur $] - \infty, z_0[$ pour un certain réel $z_0 \in I$, alors $u > 0$ sur I .*

Démonstration. – Pour montrer ce lemme, on introduit la fonction Γ définie sur I par $\Gamma(z) = u(z) \exp(az)$. Cette fonction est C^1 et de dérivée $\Gamma'(z) = [u'(z) + au(z)] \exp(az)$. Si $u' + au \geq 0$ sur I , alors la fonction Γ est croissante sur I . De plus elle est de limite nulle en $-\infty$ puisque u est bornée. Ainsi Γ est non négative sur I et le premier point du lemme est démontré.

Si de plus, $u' + au > 0$ sur $] - \infty, z_0[$ alors Γ est strictement croissante sur $] - \infty, z_0[$ et ainsi, Γ est positive sur I , ce qui montre le deuxième point du lemme. \square

Lemme 6.7 *Soit a un réel positif, f et g deux fonctions continues et non négative définie sur \mathbb{R} . Soit u une fonction dans $C^{2+\delta}(\mathbb{R})$ de limites non négatives u^\pm en $\pm\infty$ avec u^+ ou u^- non nul.*

Si u est telle que $u''(z) + a u'(z) - f(z)u(z) + g(z) = 0$ pour tout $z \in \mathbb{R}$, alors u est positive.

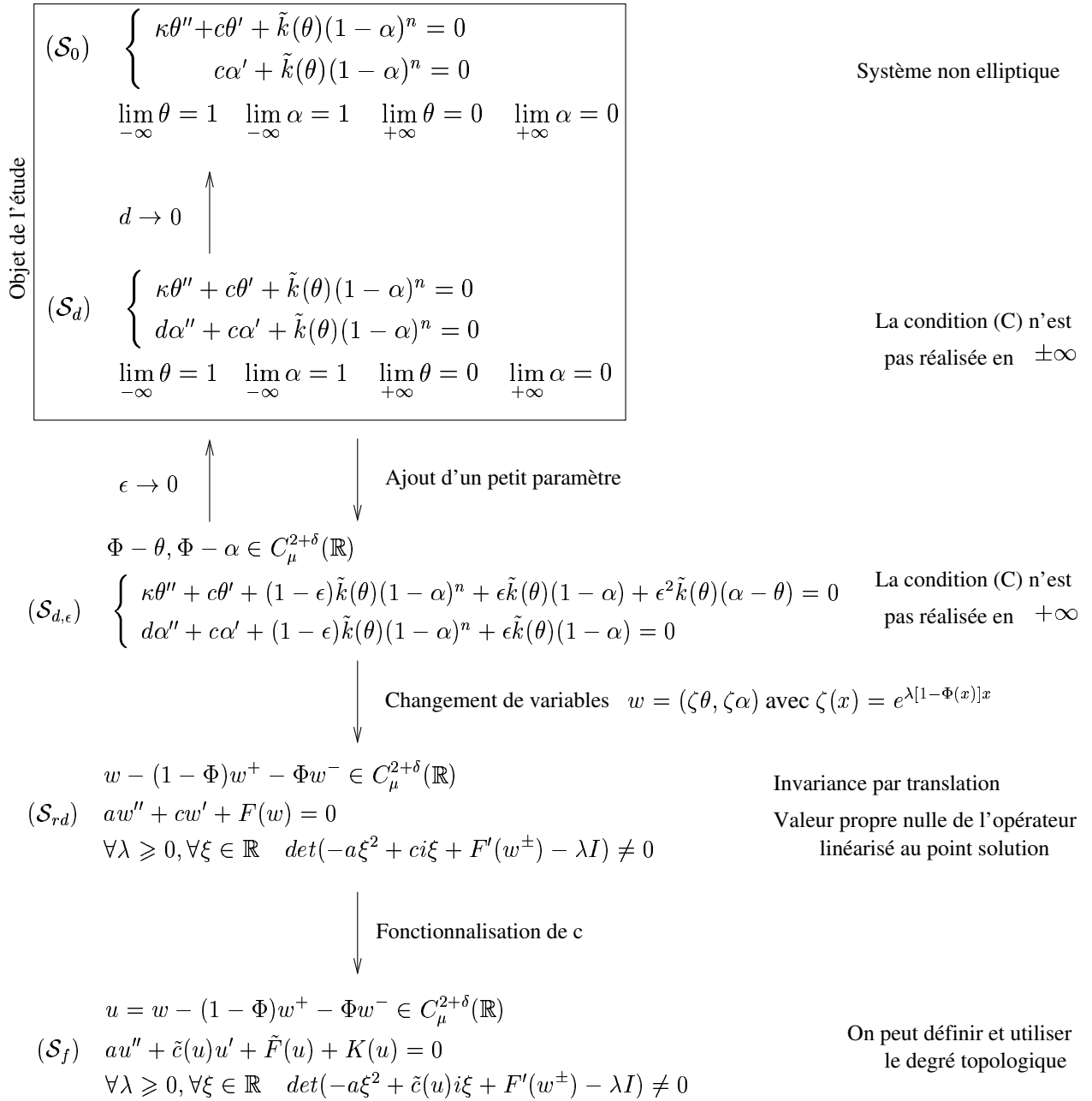


FIG. 6.2 – Schéma de la démarche.

Démonstration. – D’abord on montre que u est non négative. Si ce n’est pas le cas, alors u atteint son minimum négatif en un point z_m . Ainsi, en ce point : $u''(z_m) = f(z_m)u(z_m) - g(z_m)$, avec $u''(z_m) \geq 0$ et $u(z_m) < 0$. Donc $u''(z_m) = 0$. Si z_m est le plus grand réel pour lequel u atteint son minimum, alors, pour un petit réel positif b , on a $u(z) < 0$, $u'(z) > 0$ pour $z \in]z_m, z_m + b]$. Donc, $u''(z) < 0$ et u' est une fonction décroissante sur $]z_m, z_m + b]$. Mais, c’est incompatible avec $u'(z_m) = 0 < u'(z_m + b)$ et u est nécessairement non négative.

On peut appliquer le principe du maximum à u : si u s’annule en un point, alors u est la constante 0 et g est la fonction nulle. C’est incompatible avec les hypothèses et le lemme est démontré. \square

6.4.2 Monotonie

Remarquons qu’une onde solution du système $(\mathcal{S}_{d,\epsilon})$ est nécessairement de profil monotone et de vitesse positive.

Proposition 6.8 *Si, pour $0 < d \leq \kappa$ et $\epsilon \geq 0$, il existe un scalaire c et des solutions θ et α dans $C^{2+\delta}(\mathbb{R})$ de $(\mathcal{S}_{d,\epsilon})$ alors c est positif et les fonctions θ et α sont strictement décroissantes.*

Démonstration. – Montrons tout d’abord que $c > 0$. La fonction θ tend vers 0 en $+\infty$ et $\theta_c > 0$. Donc il existe un réel z_c à partir duquel la fonction θ est plus petite que θ_c . Ainsi, sur $[z_c, +\infty[$, l’équation sur θ se réduit à $\kappa\theta'' + c\theta' = 0$. Or, la fonction θ' tend vers 0 en $+\infty$ et est non nulle (sinon θ serait constamment égale à θ_c sur $[z_c, +\infty[$). Donc, nécessairement, $c > 0$.

Ensuite, on peut remarquer que la fonction α reste inférieure à 1 et est décroissante. Considérons d’abord le cas n impair. En appliquant le lemme 6.7 à $1 - \alpha$, on montre que cette fonction est positive. De plus, grâce au lemme 6.6 appliqué à $-\alpha'$, on démontre immédiatement que α est décroissante. Dans le cas où n est pair, on montre que dès que α est inférieure à 1, elle est décroissante. En effet, si il existe un réel z tel que $\alpha(z) \leq 1$ et $\alpha'(z) > 0$ alors on a nécessairement $\alpha''(z) < 0$. Ainsi α' est strictement décroissante et α strictement croissante autour de z . Sur $] - \infty, z]$, α' est donc positive et strictement décroissante et α strictement croissante et majorée par 1. Ceci est impossible car α tend vers 1 en $-\infty$. Ainsi, si on n’a pas $\alpha \leq 1$ sur \mathbb{R} , nécessairement, $\alpha > 1$ sur un intervalle du type $] - \infty, z_0[$ et α est décroissante et majorée par 1 sur $[z_0, +\infty[$. D’autre part, on sait qu’il existe un réel $z_1 \leq z_0$ tel que, pour $z \leq z_1$, on a $|1 - \alpha(z)| \leq \sqrt[n-1]{\frac{\epsilon}{1-\epsilon}}$. Ainsi, sur $] - \infty, z_1[$, on a $d\alpha'' + c\alpha' = -\tilde{k}(\theta)(1-\alpha)[(1-\epsilon)(1-\alpha)^{n-1} + \epsilon] \leq 0$. D’après le lemme 6.6, α est décroissante sur $] - \infty, z_1[$, ce qui contredit l’hypothèse $\alpha > 1$ sur $] - \infty, z_0[$. Donc, on a forcément $\alpha \leq 1$ et α décroissante sur \mathbb{R} .

De même que pour α dans le cas n pair, la fonction θ est décroissante dès qu’elle est plus petite que 1 et ce, parce qu’elle vérifie :

$$\kappa\theta'' + c\theta' + (1-\epsilon)\tilde{k}(\theta)(1-\alpha)^n + \epsilon(1-\epsilon)\tilde{k}(\theta)(1-\alpha) + \epsilon^2\tilde{k}(\theta)(1-\theta) = 0.$$

Montrons alors que α est strictement décroissante. Si la fonction non positive α' s’annule en un réel z , alors nécessairement $\alpha''(z) = 0$. On a alors, à cause de l’équation sur α : $\alpha(z) = 1$ ou $\theta(z) \leq \theta_c$. Si $\alpha(z) = 1$, comme $\alpha'(z) = 0$, alors α est une fonction constante égale à 1 sur \mathbb{R} (unicité du problème de Cauchy, à θ fixé). C’est impossible. De même, si $\theta(z) \leq \theta_c$, alors θ est décroissante et majorée par θ_c sur $[z, +\infty[$ et sur cet intervalle, on aurait $d\alpha'' + c\alpha' = 0$ avec $\alpha'(z) = 0$. Ainsi α serait constante, égale à 0, sur $[z, +\infty[$. Le principe du maximum entraîne que α est nulle sur \mathbb{R} , ce qui est impossible. Ainsi, $\alpha' < 0$.

Montrons enfin que θ est majorée par 1. Supposons que ce n'est pas le cas. Puisque θ est décroissante dès qu'elle est inférieure ou égale à 1, on a alors $\theta > 1$ sur un intervalle $] -\infty, z_o[$ et θ décroissante et majorée par 1 sur $[z_o, +\infty[$. Posons alors $\varphi = \theta - \alpha$. On a $\int_{-\infty}^{+\infty} \tilde{k}(\theta(z))\varphi(z)dz = 0$ (on le voit en intégrant les deux équations sur \mathbb{R}). Donc φ n'est pas de signe constant sur \mathbb{R} . D'autre part, $\varphi > 0$ sur $] -\infty, z_o[$ car sur cet intervalle, on a $\alpha < 1 \leq \theta$. Notons a le premier point pour lequel φ s'annule. Ainsi $\varphi > 0$ sur $] -\infty, a[$. Or, en intégrant la différence des équations de $(\mathcal{S}_{d,\epsilon})$ entre $-\infty$ et z , pour $z \leq a$, on obtient :

$$\kappa\varphi'(z) + c\varphi(z) = -(\kappa - d)\alpha'(z) + \epsilon^2 \int_{-\infty}^z \tilde{k}(\theta(y))\varphi(y)dy \geq 0.$$

De plus l'inégalité est stricte sur $] -\infty, z_o[$. Le lemme 6.6 nous dit alors que $\varphi > 0$ sur $] -\infty, a[$. Cela contredit le fait que $\varphi(a) = 0$. Donc la fonction θ est majorée par 1 et décroissante sur \mathbb{R} et même strictement décroissante à cause du lemme 6.6 appliqué à $-\theta'$ (on a $-\kappa\theta'' - c\theta' \geq 0$, l'inégalité étant stricte sur $] -\infty, z_c[$ car $\theta'(z_c) < 0$). \square

6.4.3 Estimations

Donnons alors des estimations, indépendantes de d et ϵ , des solutions du problème $(\mathcal{S}_{d,\epsilon})$.

Théorème 6.9 *Il existe des constantes $\epsilon_0 \in]0, 1[$, $M > 0$, $c^- > 0$ et c^+ telles que pour chaque $d \in]0, \kappa]$ et pour chaque $\epsilon \in [0, \epsilon_0]$, s'il existe un scalaire c et des solutions θ et α dans $C^{2+\delta}(\mathbb{R})$ de $(\mathcal{S}_{d,\epsilon})$, alors on a :*

$$\|\theta\|_{C^{2+\delta}(\mathbb{R})} \leq M, \quad \|\alpha\|_{C^{2+\delta}(\mathbb{R})} \leq M \quad c^- \leq c \leq c^+. \quad (6.14)$$

De plus, on a $\theta > (1 - \epsilon)\alpha$.

Démonstration. – On sait déjà, grâce à la proposition 6.8, que θ et α sont décroissantes et donc bornées par 0 et 1.

Donnons ensuite une estimation de θ' indépendante de c , d et ϵ . Pour cela, on distingue 2 cas, suivant que c est plus petit ou plus grand que 1. Considérons le cas où $c \geq 1$. Comme θ' est non positive et tend vers 0 en $\pm\infty$, elle admet un minimum en z_m et on a :

$$|\theta'(z_m)| = \frac{1}{c}\tilde{k}(\theta(z_m))|(1 - \epsilon)[1 - \alpha(z_m)]^n + \epsilon(1 - \epsilon)[1 - \alpha(z_m)] + \epsilon^2[1 - \theta(z_m)]| \leq \tilde{k}(1).$$

Donc $|\theta'|$ est majorée par $\tilde{k}(1)$.

Dans le cas où $c < 1$, prenons $z \in \mathbb{R}$. Si $|\theta'(z)| > \tilde{k}(1)$, alors on définit z_0 comme le plus grand réel inférieur à z tel que $|\theta'(z_0)| = \tilde{k}(1)$. On intègre alors l'équation sur θ entre z_0 et z et on majore :

$$\begin{aligned} |\theta'(z)| &= -\theta'(z_0) + \frac{c}{\kappa}[\theta(z) - \theta(z_0)] + \frac{1 - \epsilon}{\kappa} \int_{z_0}^z \tilde{k}(\theta(y))(1 - \alpha(y))^n dy \\ &\quad + \frac{\epsilon(1 - \epsilon)}{\kappa} \int_{z_0}^z \tilde{k}(\theta(y))(1 - \alpha(y)) dy + \frac{\epsilon^2}{\kappa} \int_{z_0}^z \tilde{k}(\theta(y))(1 - \theta(y)) dy \\ &\leq \tilde{k}(1) + \frac{1 - \epsilon}{\kappa} \tilde{k}(1) \int_{z_0}^z |\theta'(y)| dy + \frac{\epsilon(1 - \epsilon)}{\kappa} \tilde{k}(1) \int_{z_0}^z |\theta'(y)| dy + \frac{\epsilon^2}{\kappa} \tilde{k}(1) \int_{z_0}^z |\theta'(y)| dy \\ &\leq \tilde{k}(1) \left(1 + \frac{1}{\kappa}\right). \end{aligned}$$

Ainsi, dans tous les cas, $|\theta'|$ est majorée par $\mathcal{K} = \tilde{k}(1) \left(1 + \frac{1}{\kappa}\right)$.

On va alors démontrer que c est encadrée entre deux valeurs indépendantes de d et ϵ . On peut tout d'abord remarquer l'invariance par translation dans le problème considéré. Donc, on peut choisir une solution θ telle que $\theta(0) = \theta_c$. Ainsi, on peut résoudre les équations de $(\mathcal{S}_{d,\epsilon})$ sur \mathbb{R}^+ :

$$\forall z \geq 0 \quad \theta(z) = \theta_c \exp\left(-\frac{c}{\kappa}z\right) \quad \alpha(z) = \alpha(0) \exp\left(-\frac{c}{d}z\right).$$

Donc $c = \frac{\kappa(-\theta'(0))}{\theta_c}$ qui, d'après ce qui précède, est majorée par $c^+ = \frac{\kappa\mathcal{K}}{\theta_c} = \frac{\tilde{k}(1)(1+\kappa)}{\theta_c}$.

Posons $\psi = \theta - (1-\epsilon)\alpha$. En intégrant entre z et $+\infty$ la différence entre l'équation sur θ et l'équation sur α multipliée par $1-\epsilon$, on obtient :

$$\begin{aligned} \kappa\psi'(z) + c\psi(z) &= -(1-\epsilon)(\kappa-d)\alpha'(z) + \epsilon(1-\epsilon) \int_z^{+\infty} \tilde{k}(\theta(y))(1-\alpha(y))^n dy \\ &\quad + \epsilon^2 \int_z^{+\infty} \tilde{k}(\theta(y))(1-\theta(y)) dy \\ &\geq 0. \end{aligned}$$

De plus, l'inégalité est stricte sur l'intervalle $] -\infty, 0[$ où $\theta_c < \theta < 1$. On applique alors le lemme 6.6 et on obtient $\psi > 0$ sur \mathbb{R} . Ainsi, on a : $\alpha - \theta < \epsilon\alpha < \epsilon$.

On va alors pouvoir donner une minoration de c . En effet, on a :

$$\begin{aligned} \kappa\theta'' + c\theta' + (1-\epsilon)\tilde{k}(\theta)(1-\theta)^n + \epsilon\tilde{k}(\theta)(1-\theta) \\ = \epsilon(1-\epsilon)\tilde{k}(\theta)(\alpha-\theta) + (1-\epsilon)\tilde{k}(\theta)[(1-\theta)^n - (1-\alpha)^n] \\ \leq \tilde{k}(\theta)[\epsilon^2(1-\epsilon) + n\epsilon(1-\epsilon)] \leq \tilde{k}(\theta)n\epsilon. \end{aligned}$$

On multiplie cette inégalité par θ' et on intègre sur \mathbb{R} :

$$\begin{aligned} c \int_{\mathbb{R}} (\theta'(z))^2 dz + (1-\epsilon) \int_{\mathbb{R}} \tilde{k}(\theta(z))(1-\theta(z))^n \theta'(z) dz + \epsilon \int_{\mathbb{R}} \tilde{k}(\theta(z))(1-\theta(z)) \theta'(z) dz \\ \geq n\epsilon \int_{\mathbb{R}} \tilde{k}(\theta(z)) \theta'(z) dz, \end{aligned}$$

ce qui nous donne :

$$\begin{aligned} \mathcal{K}c \geq c \int_{\mathbb{R}} (\theta'(z))^2 dz \geq (1-\epsilon) \int_0^1 \tilde{k}(\theta)(1-\theta)^n d\theta + \epsilon \int_0^1 \tilde{k}(\theta)(1-\theta) d\theta - n\epsilon \int_0^1 \tilde{k}(\theta) d\theta, \\ \geq \int_0^1 \tilde{k}(\theta)(1-\theta)^n d\theta - n\epsilon \int_0^1 \tilde{k}(\theta) d\theta. \end{aligned}$$

Si ϵ est tel que $0 \leq \epsilon \leq \epsilon_0$ avec :

$$\epsilon_0 = \frac{\int_0^1 \tilde{k}(\theta)(1-\theta)^n d\theta}{2n \int_0^1 \tilde{k}(\theta) d\theta},$$

alors, on a la minoration de c par $c^- = \frac{1}{2\mathcal{K}} \int_0^1 \tilde{k}(\theta)(1-\theta)^n d\theta > 0$.

Il est alors facile d'obtenir une estimation dans $C^{2+\delta}(\mathbb{R})$ des fonctions θ et α . En fait, on donne une estimation dans $C^3(\mathbb{R})$. La fonction $\alpha' < 0$ tend vers 0 en $\pm\infty$. Elle atteint donc son maximum en un point z tel que :

$$c\alpha'(z) + (1 - \epsilon)\tilde{k}(\theta(z))(1 - \alpha(z))^n + \epsilon\tilde{k}(\theta(z))(1 - \alpha(z)) = 0.$$

Ainsi, $|\alpha'(z)|$ et donc $|\alpha'|$ est majorée par $\tilde{k}(1)/c^-$.

Pour obtenir une estimation de α'' , on va commencer par dériver l'équation sur α de $(\mathcal{S}_{d,\epsilon})$:

$$d\alpha''' + c\alpha'' + \tilde{k}'(\theta)\theta'[(1 - \epsilon)(1 - \alpha)^n + \epsilon(1 - \alpha)] - \tilde{k}(\theta)\alpha'[\epsilon + n(1 - \epsilon)(1 - \alpha)^{n-1}] = 0. \quad (6.15)$$

La fonction α'' tend vers 0 en $\pm\infty$. Elle atteint donc son maximum ou son minimum en un point où α''' s'annule et on obtient ainsi une majoration de $|\alpha''|$ par $K_1 = \frac{1}{c^-} \left[\mathcal{K}\|\tilde{k}'\|_{L^\infty[0,1]} + n\frac{\tilde{k}(1)^2}{c^-} \right]$.

Pour θ'' , on reprend directement l'équation sur θ et on obtient immédiatement la majoration de $|\theta''|$ par

$$K_2 = \frac{1}{\kappa} \left[\mathcal{K}c^+ + \tilde{k}(1) \right].$$

En dérivant l'équation sur θ , on obtient immédiatement la majoration de $|\theta'''|$ par :

$$\frac{1}{\kappa} \left[c^+ K_2 + \mathcal{K}\|\tilde{k}'\|_{L^\infty[0,1]} + (n+1)\frac{\tilde{k}(1)^2}{c^-} + \mathcal{K}\tilde{k}(1) \right].$$

A cause de (6.15), on sait que α''' tend vers 0 en $\pm\infty$ et atteint donc son maximum sur \mathbb{R} en un point z . En dérivant cette équation, on voit que $|\alpha''''|$ est majorée par :

$$\frac{1}{c^-} \left[\mathcal{K}^2\|\tilde{k}''\|_{L^\infty[0,1]} + \left(K_2 + n\frac{2\tilde{k}(1)\mathcal{K}}{c^-} \right) \|\tilde{k}'\|_{L^\infty[0,1]} + n\tilde{k}(1) \left(K_1 + (n-1)\frac{\tilde{k}(1)^2}{(c^-)^2} \right) \right].$$

On a ainsi des estimations indépendantes de d et ϵ de α et θ dans $C^3(\mathbb{R})$ et donc dans $C^{2+\delta}(\mathbb{R})$ et le théorème est démontré. \square

6.5 Existence de solution pour le système perturbé

Pour montrer l'existence de solutions du système secondaire, on introduit une transformation entre celui-ci et un problème plus simple : un cas se ramenant à une seule équation. Pour cela, on considère l'opérateur A_τ défini par :

$$A_\tau \begin{pmatrix} \theta \\ \alpha \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \kappa\theta'' \\ d_\tau\alpha'' \end{pmatrix} + c \begin{pmatrix} \theta' \\ \alpha' \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} (1 - \epsilon)\tilde{k}(\theta)(1 - \alpha)^n + \epsilon\tilde{k}(\theta)(1 - \alpha) + \epsilon^2\tilde{k}(\theta)(\alpha - \theta) \\ (1 - \epsilon)\tilde{k}(\theta)(1 - \alpha)^n + \epsilon\tilde{k}(\theta)(1 - \alpha) \end{pmatrix}, \quad (6.16)$$

avec $d_\tau = d(1 - \tau) + \kappa\tau$ et $\tau \in [0, 1]$. Soit Φ une fonction C^∞ sur \mathbb{R} telle que $\Phi(z)$ vaut 0 si $z \geq 1$ et vaut 1 si $z \leq 0$. Notons E l'espace suivant :

$$E = \{u \in C^{2+\delta}(\mathbb{R}), \quad \Phi - u \in C_\mu^{2+\delta}(\mathbb{R})\}$$

de sorte qu'une fonction u de E tend vers 1 en $-\infty$ et 0 en $+\infty$. L'opérateur A_τ est défini pour les éléments θ et α de E . De plus, pour $\tau = 0$, on retrouve l'opérateur défini par les membres de gauche des équations du système $(\mathcal{S}_{d,\epsilon})$. Pour $\tau = 1$, le problème $A_1 w = 0$ se réduit en fait à un problème plus simple pour lequel on a des résultats d'existence et d'unicité.

6.5.1 Réduction du système transformé

Commençons par réduire le système $A_1 w = 0$:

Proposition 6.10 *Des fonctions θ et α de E vérifient le système :*

$$\kappa \theta'' + c \theta' + (1 - \epsilon) \tilde{k}(\theta)(1 - \alpha)^n + \epsilon \tilde{k}(\theta)(1 - \alpha) + \epsilon^2 \tilde{k}(\theta)(\alpha - \theta) = 0, \quad (6.17)$$

$$\kappa \alpha'' + c \alpha' + (1 - \epsilon) \tilde{k}(\theta)(1 - \alpha)^n + \epsilon \tilde{k}(\theta)(1 - \alpha) = 0, \quad (6.18)$$

si et seulement si $\theta = \alpha \in E$ vérifie :

$$\kappa \theta'' + c \theta' + (1 - \epsilon) \tilde{k}(\theta)(1 - \theta)^n + \epsilon \tilde{k}(\theta)(1 - \theta) = 0. \quad (6.19)$$

Démonstration. – Supposons que les fonctions θ et α de E vérifient (6.17), (6.18), avec $\theta(0) = \theta_c$. Ainsi, la fonction $\tilde{k}(\theta)$ est nulle sur \mathbb{R}^+ et positive sur $] -\infty, 0[$. Posons $\varphi = \theta - \alpha$. Cette fonction tend vers 0 en $\pm\infty$ et vérifie :

$$\kappa \varphi'' + c \varphi' - \epsilon \tilde{k}(\theta) \varphi = 0. \quad (6.20)$$

Supposons que φ admet un minimum négatif sur $] -\infty, 0[$ en un point $z < 0$. Alors $\varphi(z) < 0$, $\varphi'(z) = 0$ et $\varphi''(z) \geq 0$, ce qui est en contradiction avec l'équation (6.20). De même, φ n'admet pas de maximum positif sur $] -\infty, 0[$ et ainsi, elle est nécessairement de signe constant sur $] -\infty, 0[$. Or, on a $\int_{\mathbb{R}} \tilde{k}(\theta(z)) \varphi(z) dz = 0$. Donc φ est nulle sur $] -\infty, 0[$, et même sur \mathbb{R} entier à cause de (6.20), puisque $\tilde{k}(\theta) = 0$ sur \mathbb{R}^+ . Ainsi $\theta = \alpha$ vérifie (6.19).

La réciproque est évidente. □

On se ramène donc au problème d'existence d'onde pour un cas scalaire. Or on sait que ce problème admet une unique solution c et θ , à une translation près (voir par exemple [VVV94]).

6.5.2 Définition du degré topologique

On montre ici que l'on peut définir le degré topologique, moyennant un changement de variables. Posons λ un réel tel que

$$0 < \lambda < \frac{c^-}{\kappa},$$

où $c^- > 0$ est le minorant de la vitesse obtenu dans le théorème 6.9. On note alors ζ la fonction définie pour $z \in \mathbb{R}$ par $\zeta(z) = \exp(\lambda[1 - \Phi(z)]z)$ (où Φ est la fonction définie au début de la section) et on fait le changement de variables suivant : $t = \zeta\theta$, $a = \zeta\alpha$. On a alors :

$$\forall z \leq 0 \quad t(z) = \theta(z) \quad a(z) = \alpha(z) \quad (6.21)$$

$$\forall z \geq 1 \quad t(z) = \theta(z)e^{\lambda z} \quad a(z) = \alpha(z)e^{\lambda z}. \quad (6.22)$$

Pour des solutions θ et α dans E de $A_\tau(\theta, \alpha) = 0$, posons z_c le réel pour lequel on a $\theta(z_c) = \theta_c$. On a alors, pour tout réel z plus grand que z_c et que 1 :

$$t(z) = \theta_c e^{cz_c/\kappa} e^{(\lambda - c/\kappa)z} \quad a(z) = \alpha(z_c) e^{cz_c/d} e^{(\lambda - c/d)z} \quad (6.23)$$

Le système obtenu par ce changement de variables dans l'équation $A_\tau(\theta, \alpha) = 0$ est le suivant :

$$\kappa t'' + (c - 2\kappa l_1)t' + [(2l_1^2 - l_2)\kappa - l_1 c]t + F_1(t, a) = 0 \quad (6.24)$$

$$d_\tau a'' + (c - 2d_\tau l_1)a' + [(2l_1^2 - l_2)d_\tau - l_1 c]a + F_2(t, a) = 0 \quad (6.25)$$

avec $l_1 = \zeta'/\zeta$, $l_2 = \zeta''/\zeta$ et

$$F_1(t, a) = \zeta \left[(1 - \epsilon)\tilde{k} \left(\frac{t}{\zeta} \right) \left(1 - \frac{a}{\zeta} \right) + \epsilon\tilde{k} \left(\frac{t}{\zeta} \right) \left(1 - \frac{t}{\zeta} \right) \right]$$

$$F_2(t, a) = \zeta\tilde{k} \left(\frac{t}{\zeta} \right) \left(1 - \frac{a}{\zeta} \right).$$

On notera \tilde{A}_τ l'opérateur correspondant au membre de gauche du système (6.24), (6.25) avec, à la place de c , la fonctionnelle $c(t, a)$ donnée par (6.11). On a alors l'équivalence des deux problèmes $A_\tau(\theta, \alpha) = 0$ et $\tilde{A}_\tau(t, a) = 0$. En effet, si $(\theta, \alpha) \in E^2$ est solution de $A_\tau(\theta, \alpha) = 0$, alors, à cause des relations (6.21) et (6.23), $t = \zeta\theta$ et $a = \zeta\alpha$ sont dans E et ils sont solutions de $\tilde{A}_\tau(t, a) = 0$. Réciproquement, si $(t, a) \in E^2$ est solution de $\tilde{A}_\tau(t, a) = 0$, puisque $\zeta \geq 1$, alors $\theta = t/\zeta$ et $\alpha = a/\zeta$ sont dans E et ils sont solutions de $A_\tau(\theta, \alpha) = 0$.

Pour $z \geq 1$, $l_1(z) = \lambda$ et $l_2(z) = \lambda^2$, et à cause du choix de λ , on sait que $\lambda(\kappa\lambda - c) < 0$ et $\lambda(d\lambda - c) < 0$. Donc, pour l'opérateur \tilde{A}_τ , la condition (C) est vérifiée et on peut définir le degré topologique. De plus, cet opérateur est une homotopie.

6.5.3 Estimations dans l'espace à poids et conclusion

Pour conclure, il nous faut des estimations a priori, dans l'espace à poids $C_\mu^{2+\delta}(\mathbb{R})$, des solutions du système après changement de variables $\tilde{A}_\tau(t, a) = 0$. Remarquons tout d'abord qu'à cause de la relation (6.23), pour retrouver des estimations dans $C^{2+\delta}(\mathbb{R})$ pour les nouvelles variables, il va falloir montrer que le réel z_c est majoré, indépendamment de τ . Quitte à translater la fonction σ , on peut supposer que $2 \int_{-\infty}^0 \sigma(z) dz \leq 1$ et on a alors le lemme :

Lemme 6.11 *Alors, pour toute solution $\theta \in E$ et $\alpha \in E$ de $A_\tau(\theta, \alpha) = 0$, le réel $z_c = \theta^{-1}(\theta_c)$ est borné indépendamment de τ .*

Démonstration. – La fonctionnelle c est définie par :

$$c(t, a) = \ln \left(\int_{\mathbb{R}} [t^2(z) + a^2(z)] \sigma(z) dz \right).$$

Dans les variables θ et α , elle s'écrit :

$$\tilde{c}(\theta, \alpha) = c(\xi\theta, \xi\alpha) = \ln \left(\int_{\mathbb{R}} [\theta^2(z) + \alpha^2(z)] \zeta^2(z) \sigma(z) dz \right).$$

Supposons dans un premier temps que $z_c > 0$ et donnons en un majorant indépendant de τ . La fonction θ étant décroissante d'après la proposition 6.8, la fonction σ croissante et la fonction ζ plus grande que 1, on a la minoration suivante de la fonctionnelle c :

$$\tilde{c}(\theta, \alpha) \geq \ln \int_0^{z_c} \theta^2(z) \zeta^2(z) \sigma(z) dz \geq \ln(\theta_c^2 z_c \sigma(0)).$$

D'autre part, le théorème 6.9 nous dit en particulier que $\tilde{c}(\theta, \alpha) \leq c^+$. On a donc la majoration de z_c indépendante de τ :

$$z_c \leq \frac{e^{c^+}}{\theta_c^2 \sigma(0)}. \quad (6.26)$$

Supposons maintenant que $z_c < 0$ et montrons que z_c est minoré indépendamment de τ . A cause de la forme exponentiellement décroissante des fonctions sur $[z_c, +\infty[$, on a la majoration suivante de c :

$$\tilde{c}(\theta, \alpha) \leq \ln \left(2 \int_{-\infty}^0 \sigma(z) dz + \int_0^{+\infty} (e^{-2c(z-z_c)/d_\tau} + \theta_c^2 e^{-2c(z-z_c)/\kappa}) \sigma(z) dz \right).$$

D'autre part, le théorème 6.9 nous dit en particulier que $\tilde{c}(\theta, \alpha) \geq c^-$. De plus, à cause de l'hypothèse faite sur σ et du fait que $d_\tau \leq \kappa$, on obtient, en passant à l'exponentielle :

$$e^{c^-} \leq 1 + (1 + \theta_c^2) e^{2z_c c^- / \kappa} \int_0^{+\infty} e^{2(\lambda - c^- / \kappa)z} dz \leq 1 + (1 + \theta_c^2) e^{2z_c c^- / \kappa} \frac{\kappa}{2(c^- - \lambda \kappa)}. \quad (6.27)$$

On a ainsi une minoration de z_c indépendante de τ :

$$z_c \geq \frac{\kappa}{2c^-} \ln \left(\frac{2(c^- - \lambda \kappa)(e^{c^-} - 1)}{\kappa(1 + \theta_c^2)} \right). \quad (6.28)$$

□

Avant de donner les estimations, démontrons un lemme utile :

Lemme 6.12 Soit I l'intervalle $] -\infty, z_0]$, a et b deux réels positifs et y une fonction dans $C^{2+\delta}(I)$ telle que :

- y est non négative,
- $y(z)$ tend vers 0 quand z tend vers $-\infty$,
- pour tout $z \in I$, $y''(z) + a y'(z) - b y(z) \geq 0$.

Alors, pour $z \in I$:

$$y(z) \leq y(z_0) \exp \left(\frac{\sqrt{a^2 + 4b} - a}{2} (z - z_0) \right) \quad (6.29)$$

$$0 \leq y'(z) \leq \left[y'(z_0) + \frac{a + \sqrt{a^2 + 4b}}{2} y(z_0) \right] \exp \left(\frac{\sqrt{a^2 + 4b} - a}{2} (z - z_0) \right) \quad (6.30)$$

Démonstration. – Introduisons la fonction Λ_1 définie pour $z \in I$ par :

$$\Lambda_1(z) = \left(y'(z) + \frac{a - \sqrt{a^2 + 4b}}{2} y(z) \right) \exp \left(\frac{a + \sqrt{a^2 + 4b}}{2} z \right).$$

Un calcul de dérivé montre que cette fonction est croissante. De plus, elle tend vers 0 en $-\infty$. Donc, elle est non négative et $y'(z) + (a - \sqrt{a^2 + 4b})/2 y(z) \geq 0$. Introduisons alors la fonction Γ définie pour $z \in I$ par :

$$\Gamma(z) = y(z) \exp \left(\frac{a - \sqrt{a^2 + 4b}}{2} z \right).$$

Cette fonction est également croissante à cause du résultat précédent, et en écrivant simplement $\Gamma(z) \leq \Gamma(z_0)$, on montre la première inégalité (6.29).

Introduisons maintenant la fonction Λ_2 définie pour $z \in I$ par :

$$\Lambda_2(z) = \left(y'(z) + \frac{a + \sqrt{a^2 + 4b}}{2} y(z) \right) \exp \left(\frac{a - \sqrt{a^2 + 4b}}{2} z \right).$$

Cette fonction est croissante et donc $\Lambda_2(z) \leq \Lambda_2(z_0)$ pour $z \leq z_0$. Comme y est non négative, on obtient la seconde inégalité (6.30) et le lemme est démontré. \square

Les estimations dans l'espace à poids sont alors données par le théorème suivant :

Théorème 6.13 *Soit $d \in]0, \kappa]$ et $\epsilon \in]0, \epsilon_0]$. Il existe une constante $M > 0$ indépendante de $\tau \in [0, 1]$ telle que, s'il existe des solutions t et a dans E de $\hat{A}_\tau(t, a) = 0$, alors on a :*

$$\|\Phi - t\|_{C_\mu^{2+\delta}(\mathbb{R})} \leq M, \quad \|\Phi - a\|_{C_\mu^{2+\delta}(\mathbb{R})} \leq M. \quad (6.31)$$

Démonstration. – Tout d'abord, notons $\theta = t/\zeta \in E$ et $\alpha = a/\zeta \in E$ qui sont solutions de $A_\tau(\theta, \alpha) = 0$.

Le théorème 6.9, les relations (6.21) et (6.23) et la majoration de $z_c = \theta^{-1}(\theta_c)$ du lemme 6.11 donnent un majorant indépendant de τ des normes de t et a dans l'espace de Hölder $C^{2+\delta}(\mathbb{R})$. De même pour les normes à poids sur \mathbb{R}^+ : à cause de la majoration indépendante de τ de z_c (lemme 6.11), de la relation (6.23) et sachant que $c^- \leq c \leq c^+$, les quantités $\|t\|_{C_\mu^{2+\delta}(\mathbb{R}^+)}$ et $\|a\|_{C_\mu^{2+\delta}(\mathbb{R}^+)}$ sont bornées indépendamment de τ . Il reste alors à trouver des estimations indépendantes de τ dans l'espace $C_\mu^{2+\delta}(\mathbb{R}^-)$ pour les fonctions $1 - \theta$ et $1 - \alpha$ qui sont égales à $1 - t$ et $1 - a$ sur \mathbb{R}^- .

On a $\theta(z_c) = \theta_c$ et ainsi $\theta'(z_c) = -c\theta_c/\kappa$ et $\theta''(z_c) = c^2\theta_c/\kappa^2 > 0$. Notons alors z_d le plus grand réel de $] -\infty, z_c]$ en lequel θ'' s'annule (θ'' s'annule nécessairement sur $] -\infty, z_c]$ car sinon, θ' serait croissante et majorée par $\theta'(z_c) = -c\theta_c/\kappa$ sur $] -\infty, z_c]$, ce qui contredit le fait que θ' tend vers 0 en $-\infty$). La fonction θ' est croissante sur $[z_d, z_c]$ donc

$$\forall z \in [z_d, z_c] \quad \theta'(z) \leq -\frac{c\theta_c}{\kappa}. \quad (6.32)$$

On intègre cette équation entre z_d et z_c , ce qui montre que z_d est minoré indépendamment de $\tau \in [0, 1]$:

$$z_d \geq z_c - \frac{\kappa}{c^- \theta_c}. \quad (6.33)$$

D'autre part, en z_d , l'équation sur θ s'écrit :

$$\begin{aligned} -c\theta'(z_d) &= (1 - \epsilon)\tilde{k}(\theta(z_d))(1 - \alpha(z_d))^n + \epsilon(1 - \epsilon)\tilde{k}(\theta(z_d))(1 - \alpha(z_d)) + \epsilon^2\tilde{k}(\theta(z_d))(1 - \theta(z_d)) \\ &\leq \tilde{k}(\theta(z_d)). \end{aligned}$$

En appliquant (6.32) à $z = z_d$ et parce que $\tilde{k}(\theta(z))$ est une fonction décroissante de z , on obtient, pour $z \leq z_d$:

$$\tilde{k}(\theta(z_d)) \geq \frac{c^2\theta_c}{\kappa}. \quad (6.34)$$

A cause de (6.34), les variables croissantes $1 - \theta$ et $1 - \alpha$ sont telles que, pour $z \leq z_d$:

$$- \kappa \theta''(z) - c \theta'(z) \geq \epsilon^2 \frac{c^2 \theta_c}{\kappa} (1 - \theta(z)), \quad (6.35)$$

$$- d_\tau \alpha''(z) - c \alpha'(z) \geq \epsilon \frac{c^2 \theta_c}{\kappa} (1 - \alpha(z)). \quad (6.36)$$

On applique le lemme 6.12 à ces variables et on obtient, en remarquant que d'après le théorème 6.9, $|\theta'|$ et $|\alpha'|$ sont majorés respectivement par $\mathcal{K} = \tilde{k}(1)(1 - 1/\kappa)$ et $\tilde{k}(1)/c^-$:

$$\begin{aligned} 0 &\leq 1 - \theta(z) \leq \exp\left(\frac{c^-}{2\kappa}[\sqrt{1 + 4\epsilon^2 \theta_c} - 1](z - z_d)\right), \\ 0 &\leq -\theta'(z) \leq \left[\mathcal{K} + \frac{c^+}{2\kappa}(1 + \sqrt{1 + 4\epsilon^2 \theta_c})\right] \exp\left(\frac{c^-}{2\kappa}[\sqrt{1 + 4\epsilon^2 \theta_c} - 1](z - z_d)\right), \\ 0 &\leq 1 - \alpha(z) \leq \exp\left(\frac{c^-}{2\kappa}[\sqrt{1 + 4\epsilon \theta_c} - 1](z - z_d)\right), \\ 0 &\leq -\alpha'(z) \leq \left[\frac{\tilde{k}(1)}{c^-} + \frac{c^+}{2d}(1 + \sqrt{1 + 4\epsilon \theta_c})\right] \exp\left(\frac{c^-}{2\kappa}[\sqrt{1 + 4\epsilon \theta_c} - 1](z - z_d)\right). \end{aligned}$$

D'autre part, on peut exprimer θ'' , θ''' , α'' et α''' en fonction des quantités précédemment majorées. On montre ainsi que ces quantités sont aussi exponentiellement décroissantes en $-\infty$, la forme de cette décroissance étant indépendante de τ . On a alors un majorant, indépendant de τ , des normes de $1 - \theta$ et $1 - \alpha$ dans l'espace $C_\mu^{2+\delta}(\mathbb{R}^-)$ et le théorème est démontré. \square

Remarque 3 Ces estimations dans l'espace à poids sont possibles car on ne peut pas tendre vers un point critique 'intermédiaire' : on a vu avec le lemme 6.11 que $z_c = \theta^{-1}(\theta_c)$ est borné ; de plus, les points critiques du type $\theta = \text{cste} \leq \theta_c$ sont localisés sur $[z_c, +\infty[$ où on a une solution explicite, et le seule autre point critique est $\theta = \alpha = 1$.

On a alors le théorème d'existence pour le système secondaire :

Théorème 6.14 Pour chaque $d \in]0, \kappa]$ et $\epsilon \in]0, \epsilon_0]$, il existe un scalaire c et des fonctions θ et α dans E solution du système $(\mathcal{S}_{d,\epsilon})$.

Démonstration. – On démontre en fait qu'il existe des solution t et a dans E du système $\tilde{A}_0(t, a) = 0$. On a vu que l'opérateur \tilde{A}_τ est une homotopie. D'après le théorème 6.13, on sait que l'on peut choisir une boule ouverte \mathcal{B} de E^2 contenant tous les zéros de \tilde{A}_τ et donc sur les bords de laquelle \tilde{A}_τ ne s'annule pas. D'autre part, le degré topologique de \tilde{A}_1 par rapport à \mathcal{B} est non nul. En effet, d'après la proposition 6.10, le problème $\tilde{A}_1 w = 0$ se ramène à un problème à une équation (6.19) qui admet une unique solution w_0 . D'autre part, grâce à la fonctionnalisation de c (6.11), il n'y a pas de valeur propre nulle pour l'opérateur linéarisé en w_0 . Le degré topologique de \tilde{A}_1 et donc celui de \tilde{A}_0 par rapport à \mathcal{B} est donc 1 ou -1. Ainsi on obtient, grâce à la proposition 6.5, le résultat du théorème. \square

Il s'agit maintenant de se ramener au problème initial (\mathcal{S}_d) .

6.6 Passages à la limite

On a montré dans la section précédente que le système (\mathcal{S}_{sec}) admet des solutions régulières pour $\epsilon > 0$ petit et $0 < d \leq \kappa$. Dans cette section, on se ramène au problème (\mathcal{S}_d) par un passage à la limite quand ϵ tend vers 0. Puis, on montre l'existence de solutions régulières du système (\mathcal{S}_0) par un autre passage à la limite quand d tend vers 0. De plus, ce deuxième passage à la limite nous donne un lien entre les solutions des systèmes (\mathcal{S}_d) et (\mathcal{S}_0) .

6.6.1 Résultat préliminaire

Avant tout, rappelons un lemme très utile :

Lemme 6.15 *Soit $(u_n)_{n \in \mathbb{N}}$ une suite bornée de fonctions de $C^{2+\delta}(\mathbb{R})$. Alors, cette suite admet une suite extraite qui converge point par point vers une fonction u de $C^{2+\delta}(\mathbb{R})$, la convergence étant C^2 sur tout borné.*

Démonstration. – Posons $\Omega_N = [-N, N]$ pour chaque $N \geq 1$. La suite $(u_n)_{n \in \mathbb{N}}$ est bornée dans $C^{2+\delta}(\mathbb{R})$, donc il existe une sous-suite que l'on notera $(u_i^{(N)})_{i \in \mathbb{N}}$ qui converge vers une fonction u dans $C^2(\Omega_N)$ (à cause du théorème d'Arzela Ascoli, voir par exemple [Bre83]). On peut étendre la limite u à \mathbb{R} entier et choisir une sous-suite $(u_{i_k})_{k \in \mathbb{N}}$ telle que les fonctions $u_{i_k} - u$ convergent vers 0 dans C^2 sur chaque sous-ensemble borné de \mathbb{R} . De plus, u est une fonction de $C^{2+\delta}(\mathbb{R})$. En effet, si M est une borne dans $C^{2+\delta}(\mathbb{R})$ de la suite $(u_n)_{n \in \mathbb{N}}$, alors, pour chaque z et $y \neq z$ dans \mathbb{R} et $N \geq \sup\{|z|, |y|\}$, on a :

$$\frac{|(u_{i_k}^{(N)})''(z) - (u_{i_k}^{(N)})''(y)|}{|z - y|^\delta} \leq M.$$

Et en faisant tendre N vers $+\infty$, on obtient :

$$\frac{|u''(z) - u''(y)|}{|z - y|^\delta} \leq M$$

et le lemme est démontré. □

6.6.2 Existence de solution pour le problème avec diffusion

Grâce aux estimations a priori du théorème 6.9 et au lemme précédent, on va pouvoir montrer le théorème d'existence pour le problème limite. Commençons par faire tendre ϵ vers 0 :

Théorème 6.16 *Il existe un scalaire c_d et des fonctions α_d et θ_d dans $C^{2+\delta}(\mathbb{R})$ solutions du problème (\mathcal{S}_d) . De plus, on a $\theta_d \geq \alpha_d$.*

Démonstration. – On considère la suite des $\epsilon_n = \epsilon_0/n$ pour $n \geq 1$ ainsi que les suites $(\theta_n)_{n \geq 1}$, $(\alpha_n)_{n \geq 1}$ et $(c_n)_{n \geq 1}$ de solutions de $(\mathcal{S}_{d,\epsilon})$ pour $\epsilon = \epsilon_n$.

D'après le lemme 6.15, on peut extraire de la suite $(\theta_n)_{n \in \mathbb{N}}$ une sous-suite $(\theta_{n_k})_{k \in \mathbb{N}}$ qui converge point par point vers $\theta_d \in C^{2+\delta}(\mathbb{R})$, la convergence étant C^2 sur tout borné. On peut alors extraire de la suite $(\alpha_{n_k})_{k \in \mathbb{N}}$ une sous-suite que l'on notera encore $(\alpha_{n_k})_{k \in \mathbb{N}}$ et qui converge point par point vers $\alpha_d \in C^{2+\delta}(\mathbb{R})$, la convergence étant C^2 sur tout borné. Sans perte de généralité, on suppose également que la suite $(c_{n_k})_{k \in \mathbb{N}}$ (bornée par c^- et c^+) converge vers $c_d \in [c^-, c^+]$.

Les fonctions α_d et θ_d vérifient le système (\mathcal{S}_d) , et on a, à cause de la proposition 6.8 et des estimations du théorème 6.9 :

$$c_d \geq c^- > 0, \quad 0 \leq \alpha_d \leq 1, \quad 0 \leq \theta_d \leq 1, \quad \theta'_d \leq 0, \quad \alpha'_d \leq 0 \quad \theta_d \geq \alpha_d.$$

Les fonctions décroissantes et bornées θ_d et α_d admettent donc des limites en $\pm\infty$.

D'autre part, on suppose que les fonctions α_n et θ_n sont choisies de telle sorte que pour tout $n \in \mathbb{N}^*$, $\theta_n(0) = \theta_c$ et donc $\theta'_n(0) = -c_n\theta_c/\kappa$. On a alors $\theta_d(0) = \theta_c$ et $\theta'_d(0) = -c\theta_c/\kappa < 0$. La fonction θ_d vaut donc $\theta_d(z) = \theta_c e^{-cz/\kappa}$ pour $z \in \mathbb{R}^+$. Elle tend donc vers 0 en $+\infty$. Sur \mathbb{R}_*^- , $\theta_d > \theta_c$. Ainsi, α_d tend vers 1 en $-\infty$ (pour que $\tilde{k}(\theta_d)(1 - \alpha_d)$ tende vers 0). Et comme $\alpha_d \leq \theta_d \leq 1$, la fonction θ_d aussi tend vers 1 en $-\infty$. Enfin, on a, en intégrant les équations de (\mathcal{S}_d) sur \mathbb{R} :

$$c_d = \int_{+\infty}^{-\infty} \tilde{k}(\theta_d(z))(1 - \alpha_d(z)) dz = c_d(1 - \lim_{+\infty} \alpha_d).$$

Ainsi, α_d tend vers 0 en $+\infty$ et le théorème est démontré. \square

6.6.3 Passage à la diffusion nulle

Les estimations du théorème 6.9 sont encore valables pour $\epsilon = 0$. On va s'en servir pour faire tendre d vers 0 :

Théorème 6.17 *Soient, pour chaque $d \in]0, \kappa]$, c_d le scalaire et θ_d et α_d les fonctions de $C^{2+\delta}(\mathbb{R})$ solutions de (\mathcal{S}_d) . Il existe un scalaire c et des fonctions α et θ dans $C^{2+\delta}(\mathbb{R})$ solutions du problème sans diffusion (\mathcal{S}_0) . De plus, il existe des sous-suites $(c_{d_n})_n$, $(\theta_{d_n})_n$ et $(\alpha_{d_n})_n$ de $(c_d)_d$, $(\theta_d)_d$ et $(\alpha_d)_d$ telles que : $(c_{d_n})_n$ converge vers c , $(\theta_{d_n})_n$ et $(\alpha_{d_n})_n$ convergent vers θ et α , la convergence étant C^2 sur tout borné. Enfin, on a $\theta \geq \alpha$.*

Démonstration. – De même que pour le théorème 6.16, il existe une suite $(d_n)_{n \in \mathbb{N}^*}$ qui converge vers 0 qui vérifie, pour tout $n \in \mathbb{N}^*$, l'inégalité $0 < d_n \leq \kappa$ et telle que les solutions correspondantes c_{d_n} , θ_{d_n} et α_{d_n} tendent vers $c \geq c^- > 0$, $\theta \in C^{2+\delta}(\mathbb{R})$ et $\alpha \in C^{2+\delta}(\mathbb{R})$, la convergence étant C^2 sur tout borné.

D'autre part, on retrouve les limites de la même manière que pour le théorème 6.16 (et on a encore $\theta \geq \alpha$) ce qui termine la démonstration. \square

Ainsi, on a non seulement l'existence de solution pour chacun des systèmes (\mathcal{S}_d) (avec $0 < d \leq \kappa$) et (\mathcal{S}_0) mais en plus, le théorème 6.17 nous dit qu'une solution (vitesse de l'onde et profils de température et de concentration) de (\mathcal{S}_0) est limite d'une suite de solution de systèmes du type (\mathcal{S}_d) avec des diffusions qui tendent vers 0.

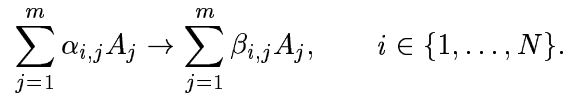
Remarque 4 *On peut remarquer que, si on a un résultat d'unicité pour le problème (\mathcal{S}_0) , comme dans le cas $n = 1$, alors on a la convergence de c_d , θ_d et α_d vers c , θ et α quand d tend vers 0.*

6.7 Généralisation à une chimie complexe

Dans cette section, on montre comment la méthode et les résultats précédents se généralisent à un réseau de réactions irréversibles exothermiques, linéairement indépendantes.

6.7.1 Formulation du problème

On s'intéresse à un réseau de N réactions irréversibles exothermiques entre m espèces chimiques A_j :



Notons Γ la matrice des coefficients $\gamma_{i,j} = \beta_{i,j} - \alpha_{i,j}$ où i est l'indice des lignes et j celui des colonnes. Le modèle thermo-diffusif pour le système de réaction-diffusion correspondant à une onde progressive 1D de vitesse c est alors [VVV94] :

$$\kappa T'' + cT' + \sum_{i=1}^N q_i \phi_i(T, A) = 0, \quad (6.37)$$

$$dA'' + cA' + \Gamma \phi(T, A) = 0, \quad (6.38)$$

où T est la température du gaz, $A = (A_1, \dots, A_m)^t$ le vecteur des concentrations des espèces A_j (afin d'éviter la multiplication des notations, on note les concentrations et les espèces de la même manière), $q = (q_1, \dots, q_N)^t$ le vecteur des chaleurs de réactions, avec $q > 0$ puisque les réactions sont toutes exothermiques, κ le coefficient de diffusion thermique, d le coefficient de diffusion massique supposé être le même pour toutes les espèces. Les limites des variables A et T sont :

$$\lim_{\pm\infty} A = A^\pm \quad \lim_{\pm\infty} T = T^\pm, \quad (6.39)$$

avec $T^- > T^+$. Enfin, le vecteur $\phi(T, A) \in \mathbb{R}^N$ a ses composantes de la forme :

$$\phi_i(T, A) = k_i(T) f_i(A), \quad f_i(A) = g_i(A) \prod_{j=1}^m A_j^{\nu_{i,j}},$$

où $g_i(A) > 0$ si $A \geq 0$ et où $\nu_{i,j} \geq 1$ si $\alpha_{i,j} \neq 0$ et $\nu_{i,j} = 0$ si $\alpha_{i,j} = 0$. De même que pour le cas précédent, les k_i représentent les fonction d'Arrhenius en $\exp\left(\frac{E_i}{RT}\right)$ avec encore l'introduction de températures d'allumage et avec des énergies d'activations E_i différentes. La température d'allumage est supposée être la même pour toutes les réactions, elle est notée T_c et on suppose de plus que : $T^- < T_c < T^+$. Ainsi, les k_i sont au moins C^2 , croissantes et nulles sur $] -\infty, T_c]$. Enfin, on suppose qu'il existe une fonction k au moins C^2 , nulle sur $] -\infty, T_c]$, strictement croissante sur $[T_c, +\infty[$ et bornée telle que :

$$\forall i \in \{1, \dots, N\} \quad \forall x \in \mathbb{R} \quad k(x) \leq k_i(x). \quad (6.40)$$

On suppose que les réactions sont linéairement indépendantes, de sorte que la matrice Γ est de rang N . Il existe donc une famille libre $(s_1, s_2, \dots, s_{m-N})$ de vecteurs de \mathbb{R}^m tels que :

$$\forall k \in \{1, \dots, m-n\} \quad s_k^t \Gamma = 0.$$

On numérote les espèces de telle manière que la matrice $\hat{\Gamma}$ composée des N premières lignes de Γ soit inversible. Le reste de la matrice est notée $\tilde{\Gamma}$. De plus, on note p un vecteur de \mathbb{R}^m tel que $\Gamma^t p = q$. On peut remarquer que si toutes les réactions sont exothermiques, alors le graphe est ouvert, c'est à dire qu'il existe un vecteur $\sigma \in \mathbb{R}^m$ tel que $\sigma^t \Gamma < 0$. On a alors des relations nécessaires suivantes pour qu'il existe une onde progressive :

$$s_k^t A = s_k^t A^+, \quad p^t (A^- - A^+) = T^- - T^+. \quad (6.41)$$

On peut remarquer que la fonction $V(A) = (\sigma, A)$ est décroissante le long des trajectoires. On choisit A^+ tel que V réalise son minimum en A^+ . On montre alors que l'on peut prendre [VVV94] les limites de A telles que $A^+ > 0$ et :

$$\forall k \in \{1, \dots, N\} \quad A_k^- = 0, \quad \forall k \in \{N+1, \dots, m\} \quad A_k^- > 0.$$

De plus, les équations et les espèces sont numérotés de telle sorte que les ν_{ii} soient plus grands que 1. D'autre part, les coefficients de la matrice $\hat{\Gamma}^{-1}$ sont non positifs.

6.7.2 Changement de variables

Ce type de système peut être ramené [VVV94] à un système sur des variables monotones u_i par le changement de variables : $A = \Gamma u + A^+$. On introduit également la température réduite : $\theta = \frac{T - T^+}{T^- - T^+}$. Le système sur θ et u s'écrit alors :

$$(\mathfrak{S}_d) \quad \begin{cases} \kappa \theta'' + c \theta' + (\tilde{q}, F(\theta, u)) = 0, \\ du'' + cu' + F(\theta, u) = 0, \end{cases}$$

où $\tilde{q} = q/(T^- - T^+)$, $F(\theta, u) = \phi(T, A)$ et $(,)$ désigne le produit scalaire canonique de \mathbb{R}^N . On notera également :

$$\tilde{f}_i(u) = f_i(A), \quad \tilde{k}_i(\theta) = k_i(T), \quad \tilde{k}(\theta) = k(T), \quad \theta_c = \frac{T_c - T^+}{T^- - T^+} \in]0, 1[.$$

Les conditions aux limites sont alors :

$$(\mathfrak{L}) \quad \lim_{-\infty} \theta = 1, \quad \lim_{+\infty} \theta = 0, \quad \lim_{-\infty} u = u^-, \quad \lim_{+\infty} u = 0.$$

La limite u^- est donnée par $u^- = -\hat{\Gamma}^{-1} A^+ > 0$ et la deuxième condition de (6.41) s'écrit alors :

$$\sum_{i=1}^N \tilde{q}_i u_i^- = 1. \quad (6.42)$$

On va pouvoir appliquer au système (\mathfrak{S}_d) la théorie développée dans les sections précédentes.

6.7.3 Estimations a priori

De même que pour le système à une réaction, on introduit un problème secondaire afin de pouvoir définir le degré topologique :

$$(\mathfrak{S}_{d,\epsilon}) \quad \begin{cases} \kappa\theta'' + c\theta' + (1-\epsilon) \sum_{i=1}^N \tilde{q}_i \tilde{k}_i(\theta) \tilde{f}_i(u) + \epsilon(1-\epsilon) \tilde{k}(\theta) \sum_{i=1}^N \tilde{q}_i (u_i^- - u_i) \\ \quad + \epsilon^2 \tilde{k}(\theta)(1-\theta) = 0 \\ d_i u_i'' + c u_i' + (1-\epsilon) \tilde{k}_i(\theta) \tilde{f}_i(u) + \epsilon \tilde{k}(\theta) (u_i^- - u_i) = 0. \end{cases}$$

Les fonctions \tilde{f}_i sont supposées vérifier l'hypothèse suivante : il existe une fonction \mathfrak{F} non négative, non nulle et décroissante, définie sur $[0, 1]$ telle que, pour chaque $u \in \prod_{i=1}^N [0, u_i^-] \cap_{i=1}^N f_i^{-1}(\mathbb{R}^+)$ on a :

$$\mathfrak{F} \left(\sum_{i=1}^N \tilde{q}_i u_i \right) \leq \sum_{i=1}^N \tilde{q}_i \tilde{f}_i(u).$$

On obtient alors les estimations a priori indépendantes des d_i , des \tilde{k}_i et de ϵ pour les solutions de $(\mathfrak{S}_{d,\epsilon})$:

Théorème 6.18 *Pour $\epsilon \in [0, \epsilon_0]$ et pour chaque $d_i \in]0, \kappa]$, s'il existe un scalaire c et des fonctions θ et α_i dans $C^{2+\delta}(\mathbb{R})$ solution de $(\mathfrak{S}_{d,\epsilon})$ avec les conditions aux limites (\mathfrak{L}) , alors on a les estimations :*

$$\|\theta\|_{C^{2+\delta}(\mathbb{R})} \leq M, \quad \|u_i\|_{C^{2+\delta}(\mathbb{R})} \leq M \quad c^- \leq c \leq c^+$$

où $\epsilon_0 > 0$, $M > 0$, $c^- > 0$ et c^+ sont des constantes indépendantes des \tilde{k}_i , de d et de ϵ .

De plus, on a $\theta > (1-\epsilon) \sum_i \tilde{q}_i u_i$.

Démonstration. – Comme pour la proposition 6.8, on montre d'abord que $c > 0$. Ensuite, on peut remarquer que chaque u_i est toujours plus petit que u_i^- en repassant au système en A :

$$dA'' + cA' + (1-\epsilon)\Gamma\phi(T, A) + \epsilon\tilde{k}(\theta)(A^- - A) = 0.$$

En effet, en utilisant les techniques de [VH85] et le lemme 6.7, on montre que les A_k sont tous non négatifs. Ainsi, $u^- - u = -\hat{\Gamma}^{-1}\hat{A}$ est non négatif. Le lemme 6.6 montre alors que chaque fonction u_i est strictement décroissante. De plus, la fonction θ est encore décroissante dès qu'elle est plus petite que 1.

Pour montrer que θ est majorée par 1, on suppose le contraire. Alors $\theta > 1$ sur un intervalle $] -\infty, x_1[$ et θ est décroissante et majorée par 1 sur $[x_1, +\infty[$. Posons alors $\varphi = \theta - \sum_{i=1}^N \tilde{q}_i u_i = \theta - 1 + \sum_{i=1}^N \tilde{q}_i (u_i^- - u_i)$. On a immédiatement $\int_{-\infty}^{+\infty} \tilde{k}(\theta(x))\varphi(x)dx = 0$ (on le voit en intégrant les équations sur \mathbb{R}). Donc φ n'est pas de signe constant sur \mathbb{R} . D'autre part, $\varphi > 0$ sur $] -\infty, x_1]$. Notons a le premier point pour lequel φ s'annule. Il est facile de voir que la fonction φ vérifie :

$$\kappa\varphi'' + c\varphi' - \epsilon^2 \tilde{k}(\theta)\varphi = -(\kappa - d) \sum_{i=1}^N \tilde{q}_i u_i''. \quad (6.43)$$

On intègre cette égalité sur $] -\infty, x]$, pour $x \leq a$:

$$\kappa\varphi'(x) + c\varphi(x) = \epsilon^2 \int_{-\infty}^x \tilde{k}(\theta(y))\varphi(y)dy - (\kappa - d) \sum_{i=1}^N \tilde{q}_i u_i'(x) \geq 0. \quad (6.44)$$

De plus l'inégalité est stricte sur $] - \infty, x_1]$. Le lemme 6.6 nous dit alors que $\varphi > 0$ sur $] - \infty, a]$. Cela contredit le fait que $\varphi(a) = 0$. Donc la fonction θ est majorée par 1 et décroissante sur \mathbb{R} et même strictement décroissante à cause du lemme 6.6 appliqué à $-\theta'$.

Comme pour démontrer 6.9, on choisit θ telle que $\theta(0) = \theta_c$ et on montre que $|\theta'|$ est majorée par $\mathcal{K} = \tilde{k}(1) \left(1 + \frac{1}{\kappa}\right)$ et c par $c^+ = \frac{\kappa \mathcal{K}}{\theta_c}$.

Posons alors $\psi = \theta - (1 - \epsilon) \sum \tilde{q}_i u_i$. En multipliant les équations de $(\mathfrak{S}_{d,\epsilon})$ sur les u_i par $(1 - \epsilon)\tilde{q}_i$, en intégrant ces équations ainsi que celle sur θ entre z et $+\infty$ et en les ajoutant, on obtient l'équation sur ψ :

$$\begin{aligned} d\psi'(z) + c\psi(z) &= -(\kappa - d)\theta'(z) + \epsilon(1 - \epsilon) \int_z^{+\infty} \sum_i \tilde{q}_i \tilde{k}_i(\theta(y)) \tilde{f}_i(u(y)) dy \\ &\quad + \epsilon^2 \int_z^{+\infty} \tilde{k}(\theta(y))(1 - \theta(y)) dy \\ &\geq 0 \end{aligned}$$

l'inégalité étant stricte sur $] - \infty, 0[$. On a alors $\psi > 0$ et donc $\sum \tilde{q}_i u_i - \theta < \epsilon$. Or :

$$\begin{aligned} \kappa\theta'' + c\theta' + (1 - \epsilon)\tilde{k}(\theta)\mathfrak{F}(\theta) + \epsilon\tilde{k}(\theta)(1 - \theta) &= (1 - \epsilon) \sum_{i=1}^N \tilde{q}_i \left[\tilde{k}(\theta) - \tilde{k}_i(\theta) \right] \tilde{f}_i(u) \\ &\quad + (1 - \epsilon)\tilde{k}(\theta) \left[\mathfrak{F}(\theta) - \mathfrak{F}\left(\sum_{i=1}^N \tilde{q}_i u_i\right) \right] + \mathfrak{F}\left(\sum_{i=1}^N \tilde{q}_i u_i\right) - \sum_{i=1}^N \tilde{q}_i \tilde{f}_i(u) + \epsilon(1 - \epsilon)\tilde{k}(\theta) \left[\sum_{i=1}^N \tilde{q}_i u_i - \theta \right] \end{aligned}$$

En prenant en compte l'hypothèse faite sur les fonctions f_i , et en utilisant la formule de Taylor-Lagrange à l'ordre 1 pour \mathfrak{F} , on obtient :

$$\kappa\theta'' + c\theta' + (1 - \epsilon)\tilde{k}(\theta)\mathfrak{F}(\theta) + \epsilon\tilde{k}(\theta)(1 - \theta) \leq \tilde{k}(\theta) (\|\mathfrak{F}'\|_{L^\infty([0,1])} + \epsilon) \left(\sum_{i=1}^N \tilde{q}_i u_i - \theta \right).$$

En utilisant l'inégalité montrée précédemment, on obtient :

$$\kappa\theta'' + c\theta' + (1 - \epsilon)\tilde{k}(\theta)\mathfrak{F}(\theta) + \epsilon\tilde{k}(\theta)(1 - \theta) \leq \epsilon\tilde{k}(\theta) (\|\mathfrak{F}'\|_{L^\infty([0,1])} + \epsilon).$$

Ainsi, comme pour le théorème 6.9, on montre la minoration suivante de c :

$$c \geq \frac{1}{\mathcal{K}} \left[(1 - \epsilon) \int_0^1 \tilde{k}(\theta)\mathfrak{F}(\theta) d\theta + \epsilon \int_0^1 \tilde{k}(\theta)(1 - \theta) d\theta - \epsilon(\|\mathfrak{F}'\|_{L^\infty([0,1])} + \epsilon) \int_0^1 \tilde{k}(\theta) d\theta \right]$$

Avec ϵ suffisamment petit, on obtient une minoration de c par $c^- > 0$ indépendant des \tilde{k}_i , de d et de ϵ .

On finit alors la démonstration comme pour le théorème 6.9. \square

6.7.4 Existence de solutions pour le système secondaire

Une première transformation réalisée ici est donnée par l'opérateur A défini pour $\tau \in [0, 1]$ et $\theta \in E$ et pour des $u_i \in E$ par :

$$\begin{aligned} A_1(\tau, \theta, u) &= \kappa\theta'' + c\theta' + (1 - \epsilon) \sum_{i=1}^N \tilde{q}_i \tilde{k}_{i,\tau}(\theta) \tilde{f}_i(u) + \epsilon\tilde{k}(\theta) \sum_{i=1}^N \tilde{q}_i (u_i^- - u_i) + \epsilon^2 \tilde{k}(\theta)(1 - \theta), \\ A_{i+1}(\tau, \theta, u) &= d_i u_i'' + c u_i' + (1 - \epsilon) \tilde{k}_{i,\tau}(\theta) \tilde{f}_i(u) + \epsilon\tilde{k}(\theta)(u_i^- - u_i), \end{aligned}$$

avec $\tilde{k}_{i,\tau} = (1 - \tau)\tilde{k}_i + \tau\tilde{k}$. Un changement de variable permet là encore de définir le degré topologique.

Ensuite, on réalise le même type d'homotopie que dans le cas de la chimie à une réaction en posant $d_{i,\tau} = (1 - \tau)d_i + \kappa$:

$$B_1(\tau, \theta, u) = \kappa\theta'' + c\theta' + (1 - \epsilon)\tilde{k}(\theta) \sum_{i=1}^N \tilde{q}_i \tilde{f}_i(u) + \epsilon\tilde{k}(\theta) \sum_{i=1}^N \tilde{q}_i (u_i^- - u_i) + \epsilon^2 \tilde{k}(\theta)(1 - \theta)$$

$$B_{i+1}(\tau, \theta, u) = d_{i,\tau}u_i'' + cu_i' + (1 - \epsilon)\tilde{k}(\theta)\tilde{f}_i(u) + \epsilon\tilde{k}(\theta)(u_i^- - u_i).$$

Le système obtenu $B(1, \theta, u) = 0$ se ramène à la même équation que dans le cas de la chimie à une réaction. En effet, les u_i sont alors tous égaux (ils sont solution d'une même équation différentielle), ce qui nous ramène exactement au même cas que dans la section 6.5.

6.7.5 Passages à la limite

Ces estimations permettent, exactement comme dans la section 6.6, de passer à la limite quand ϵ tend vers 0, puis d tend vers 0. On obtient alors, successivement, les deux théorèmes :

Théorème 6.19 *Il existe un scalaire c_d et des fonctions $u_{i,d}$ et θ_d dans $C^{2+\delta}(\mathbb{R})$ solutions du problème (\mathfrak{S}_d) . De plus, on a $\theta_d \geq \sum \tilde{q}_i u_{i,d}$.*

Théorème 6.20 *Soient, pour chaque $d \in]0, \kappa]$, c_d le scalaire et θ_d et $u_{i,d}$ les fonctions de $C^{2+\delta}(\mathbb{R})$ solutions de (\mathfrak{S}_d) . Il existe un scalaire c et des fonctions u_i et θ dans $C^{2+\delta}(\mathbb{R})$ solutions du problème sans diffusion (\mathfrak{S}_0) . De plus, il existe des sous-suites $(c_{d_n})_n$, $(\theta_{d_n})_n$ et $(u_{i,d_n})_n$ de $(c_d)_d$, $(\theta_d)_d$ et $(u_{i,d})_d$ telles que : $(c_{d_n})_n$ converge vers c , $(\theta_{d_n})_n$ et $(u_{i,d_n})_n$ convergent vers θ et u_i , la convergence étant C^2 sur tout borné. Enfin, on a $\theta \geq \sum \tilde{q}_i u_i$.*

6.8 Conclusion

On a donc généralisé le résultat de passage à la limite de la vitesse de l'onde quand L tend vers l'infini de [LL96] à une chimie d'ordre n et, de manière immédiate, à une chimie complexe de réactions irréversibles exothermiques formant un graphe ouvert, grâce à un changement de variable [VVV94]. D'autre part, ce type de méthode peut aussi être utilisé pour montrer l'existence d'ondes planes 1D dans des configurations où le réactant est présent sous forme d'une phase liquide dispersée : un brouillard de gouttes polydispersé [LM02]. En effet, pour la phase liquide, du fait de l'absence de diffusion, on obtient des équations hyperboliques. L'idée est alors de rajouter une diffusion pour montrer l'existence de solutions et de faire tendre ensuite cette diffusion vers zéro.

Bibliographie

- [BNS83] Henri Berestycki, Basil Nicolaenko, and Bruno Scheurer. Traveling wave solutions to reaction-diffusion systems modeling combustion. In *Nonlinear partial differential equations (Durham, N.H., 1982)*, pages 189–208. Amer. Math. Soc., Providence, R.I., 1983.
- [Bon97] Alexis Bonnet. Propagation of flames in the limit of zero ignition temperature. *Arch. Rational Mech. Anal.*, 138(3) :205–238, 1997.
- [Bre83] Haïm Brezis. *Analyse fonctionnelle*. Masson, Paris, 1983. Théorie et applications. [Theory and applications].
- [Dan75] E. N. Dancer. Boundary-value problems for ordinary differential equations on infinite intervals. *Proc. London Math. Soc. (3)*, 30 :76–94, 1975.
- [Dan77] E. N. Dancer. Boundary-value problems for ordinary differential equations of infinite intervals. II. *Quart. J. Math. Oxford Ser. (2)*, 28(109) :101–115, 1977.
- [Fen76] Christiano Clemente Fenske. Extensio gradus ad quasdam applicationes Fredholmii. *Mitt. Math. Sem. Giessen*, (Heft 121) :65–70, 1976.
- [Gio99] Vincent Giovangigli. Plane laminar flames with multicomponent transport and complex chemistry. *Math. Models Methods Appl. Sci.*, 9(3) :337–378, 1999.
- [Isn74] C. A. S. Isnard. The topological degree on Banach manifolds. In *Global analysis and its applications (Lectures, Internat. Sem. Course, Internat. Centre Theoret. Phys., Trieste, 1972)*, Vol. II, pages 291–313. Internat. Atomic Energy Agency, Vienna, 1974.
- [LL96] Elisabeth Logak and Vincent Loubeau. Travelling wave solutions to a condensed phase combustion model. *Asymptotic Anal.*, 12(4) :259–294, 1996.
- [LM02] F. Laurent and M. Massot. Propagation of plane polydispersed spray flames. prépublication, MAPLY, UMR 5585 Lyon, 2002. (<http://maply.univ-lyon1.fr/publis/publiv/2002/publis.html>).
- [Mar86] Martine Marion. Mathematical study of a model with no ignition temperature for laminar plane flames. In *Reacting flows : combustion and chemical reactors, Part 2 (Ithaca, N.Y., 1985)*, pages 239–252. Amer. Math. Soc., Providence, RI, 1986.
- [Nov61] B. V. Novozhilov. The rate of propagation of the front of an exothermic reaction in a condensed phase. *Dokl. Phys. Chem.*, 141 :836–838, 1961.
- [Skr73] I. V. Skrypnik. Nonlinear elliptic equations of higher order. *Gamoqeneb. Math. Inst. Sem. Mohsen. Anotacie.*, (7) :51–52, 1973.
- [VH85] A. I. Vol'pert and S. I. Hudjaev. *Analysis in classes of discontinuous functions and equations of mathematical physics*. Martinus Nijhoff Publishers, Dordrecht, 1985.

- [VV89] A. I. Vol'pert and V. A. Vol'pert. Application of the theory of the rotation of vector fields to the investigation of wave solutions of parabolic equations. *Trudy Moskov. Mat. Obshch.*, 52 :58–109, 247, 1989.
- [VV94] A. I. Vol'pert and V. A. Volpert. Construction of the Leray-Schauder degree for elliptic operators in unbounded domains. *Ann. Inst. H. Poincaré Anal. Non Linéaire*, 11(3) :245–273, 1994.
- [VVC99] V. A. Volpert, A. I. Volpert, and J. F. Collet. Topological degree for elliptic operators in unbounded cylinders. *Adv. Differential Equations*, 4(6) :777–812, 1999.
- [VVV94] Aizik I. Volpert, Vitaly A. Volpert, and Vladimir A. Volpert. *Traveling wave solutions of parabolic systems*. American Mathematical Society, Providence, RI, 1994. Translated from the Russian manuscript by James F. Heyda.
- [ZBLM85] Ya. B. Zel'dovich, G. I. Barenblatt, V. B. Librovich, and G. M. Makhviladze. *The mathematical theory of combustion and explosions*. Consultants Bureau [Plenum], New York, 1985. Translated from the Russian by Donald H. McNeill.

6.9 ANNEXE : Propagation de flammes gazeuses dans la limite d'une diffusion massique nulle

Note aux Comptes Rendus de l'Académie des Sciences :

F. LAURENT, M. MASSOT, V. VOLPERT, *Propagation de flammes gazeuses dans la limite d'une diffusion massique nulle*, C. R. Acad. Sci. Paris, Ser. I 335 (2002), 405-410

Résumé. Dans cette Note, on considère un modèle de type thermo-diffusif pour décrire la propagation d'une flamme 1D dans un milieu gazeux avec une chimie complexe de type graphe ouvert. On redémontre l'existence d'ondes progressives pour ce type de système en utilisant une nouvelle approche et l'on étudie l'effet du passage à la limite d'une diffusion massique nulle : on montre la continuité de la vitesse de l'onde ainsi que des profils de température et de fraction massique.

Propagation of gaseous flames in the limit of small mass diffusion coefficients

Abstract. *In this Note, we study a thermo-diffusive model for the propagation of 1D gaseous flames for complex chemistry with open graph. We use a new approach in order to prove the existence of a traveling wave and we study the behavior of the solution in the limit of zero mass diffusion coefficients: we show the continuity of the wave velocity and of the temperature and mass fraction profiles.*

Abridged English version

The existence of 1D traveling wave has been widely studied, for example for one step chemistry in [1] and for a complex chemistry network of irreversible exothermic reactions as in [10]. In [3], the existence of a traveling wave is shown for a complex chemistry network of reversible reactions and with detailed transport. Various tools have been used such as the Leray-Schauder degree in [1] and [3] in order to prove the existence in bounded domain, the solution being then extended to the whole real line, or such as the topological degree directly defined for unbounded domains [10]. In the high activation energy asymptotics, the wave velocity was found in both cases, without [8] and with mass diffusion [11]. This asymptotical value tends to infinity when the mass diffusion coefficient tends to zero. It is shown however in [5] that, for a one-step finite rate chemistry, the wave velocity admits a finite limit.

In this Note, a new method is introduced in order to prove the existence of 1D traveling waves with a network of irreversible exothermic reactions which satisfies the open graph assumption [10], using a topological degree defined for unbounded domains as in [10]. The equations for the thermo-diffusive model are given by (1), (2). We study the behavior of the wave velocity and of the temperature and mass fraction profiles when the mass diffusion coefficient tends to zero, then extending the results of [5]. For clarity of the presentation, results are presented for a simpler system which preserves the main difficulty. It corresponds to a n^{th} order reaction, with $n \geq 1$:

$$(\mathcal{S}_d) \quad \begin{cases} \kappa\theta'' + c\theta' + \tilde{k}(\theta)(1-\alpha)^n = 0, \\ d\alpha'' + c\alpha' + \tilde{k}(\theta)(1-\alpha)^n = 0, \\ \lim_{x \rightarrow -\infty} \theta(x) = 1, \quad \lim_{x \rightarrow -\infty} \alpha(x) = 1, \quad \lim_{x \rightarrow +\infty} \theta(x) = 0, \quad \lim_{x \rightarrow +\infty} \alpha(x) = 0, \end{cases}$$

where θ is the reduced temperature (it is 0 for the cold mixture and 1 for the burned gases) and α is the mass fraction of the reaction product. The Lewis number $Le = \kappa/d$ is assumed bigger than 1. The function \tilde{k} is regular and close to the Arrhenius coefficient; in order to avoid the cold boundary problem [11], we introduce an ignition temperature $\theta_c > 0$.

In order to prove the existence of solution for the system (\mathcal{S}_d) , we use the topological degree defined in [9] for elliptic, Fredholm and proper operators in unbounded domain and weighted Hölder spaces, where the weight is polynomial. Here, the spaces are $C_\mu^{2+\delta}(\mathbb{R})$ and $C_\mu^\delta(\mathbb{R})$, with $\mu(x) = 1 + x^2$. In order to use this theory, we add a small positive parameter ϵ and introduce the secondary system:

$$(\mathcal{S}_{sec}) \quad \begin{cases} \kappa\theta'' + c\theta' + (1 - \epsilon)\tilde{k}(\theta)(1 - \alpha)^n + \epsilon\tilde{k}(\theta)(1 - \alpha) + \epsilon^2\tilde{k}(\theta)(\alpha - \theta) = 0, \\ d\alpha'' + c\alpha' + (1 - \epsilon)\tilde{k}(\theta)(1 - \alpha)^n + \epsilon\tilde{k}(\theta)(1 - \alpha) = 0, \\ \lim_{x \rightarrow -\infty} \theta(x) = 1, \quad \lim_{x \rightarrow -\infty} \alpha(x) = 1, \quad \lim_{x \rightarrow +\infty} \theta(x) = 0, \quad \lim_{x \rightarrow +\infty} \alpha(x) = 0. \end{cases}$$

After a change of variable $(t, a) = (\zeta\theta, \zeta\alpha)$, where $\zeta(x)$ is a regular function equal to 1 for $x \leq 0$ and to $e^{\lambda x}$ for $x \geq 1$, and a fonctionnalization of c [9], we can define and use the topological degree for the corresponding operator. In order to determine λ , to prove the existence of solution for system (\mathcal{S}_{sec}) and to pass to the limit as ϵ and then d tend to zero, we need a priori estimates in the Hölder space for the functions θ and α , independent of ϵ and d . They are given, for $d \in]0, \kappa]$ and for small $\epsilon \geq 0$, in Proposition 6.21 and Theorem 6.22. We then introduce an homotopy changing d to κ ; this yields an operator of known topological degree: for $d = \kappa$, the system actually reduces to a one equation system; we know that it admits a unique solution and its topological degree is easy to evaluate: it is 1 or -1. Using estimates in the weighted Hölder space of Theorem 6.24 and the property of the topological degree, we prove the existence of solution for (\mathcal{S}_{sec}) in Theorem 6.25.

Because of the a priori estimates, we can pass to the limit in (\mathcal{S}_{sec}) when ϵ and then d tends to zero, and we obtain the main result of this Note in Theorem 6.26: the existence of solution c_d, θ_d and α_d of (\mathcal{S}_d) , the existence of solution c, θ and α of (\mathcal{S}_0) and the convergence of c_d, θ_d and α_d to c, θ and α when d tends to 0, if we have the unicity of (\mathcal{S}_0) (otherwise, there is only convergence of subsequence). The technique developed here allow us to tackle more complex problem such as the existence of plane polydispersed spray flames [6].

6.9.1 Introduction

On s'intéresse à la propagation de flamme dans un gaz, sous forme d'onde progressive 1D en présence de N réactions irréversibles exothermiques entre m espèces chimiques $A_j : \sum_{j=1}^m \alpha_{i,j} A_j \rightarrow \sum_{j=1}^m \beta_{i,j} A_j$, pour $i \in \{1, \dots, N\}$. Notons Γ la matrice des coefficients $\gamma_{i,j} = \beta_{i,j} - \alpha_{i,j}$ où i est l'indice des lignes et j celui des colonnes. Le modèle thermo-diffusif pour le système de réaction-diffusion correspondant à une onde progressive 1D de vitesse c est alors [10] :

$$\kappa T'' + cT' + \sum_{i=1}^N q_i \phi_i(A, T) = 0, \quad (6.1)$$

$$dA'' + cA' + \Gamma\phi(A, T) = 0, \quad (6.2)$$

où T est la température du gaz, $A = (A_1, \dots, A_m)^t$ le vecteur des concentrations des espèces A_j , $q = (q_1, \dots, q_N)^t > 0$ le vecteur des chaleurs de réactions, κ le coefficient de diffusion thermique, d le coefficient de diffusion massique supposé être le même pour toutes les espèces. Les limites des variables A et T sont A^\pm et T^\pm en $\pm\infty$, avec $T^- > T^+$. Enfin, le vecteur $\phi(A, T)$ a ses composantes de la forme : $\phi_i(A, T) = k_i(T)g_i(A) \prod_{j=1}^m A_j^{\nu_{i,j}}$ où $g_i(A) > 0$ si $A \geq 0$ et où $\nu_{i,j} \geq 1$ si $\alpha_{i,j} \neq 0$ et $\nu_{i,j} = 0$ si $\alpha_{i,j} = 0$.

L'existence de solution c , T et A de ce type de système a fait l'objet de plusieurs études. Elle a, par exemple, été montrée dans [1] pour une chimie simple et dans [10] pour un système de réactions irréversibles, formant un graphe ouvert, c'est à dire tel qu'il existe un vecteur ligne $\sigma \in \mathbb{R}^m$ tel que $\sigma\Gamma < 0$. Dans [3] l'existence d'onde est montrée pour une chimie complexe formée de réactions réversibles et avec un transport détaillé. Dans [1] et [3], c'est le degré topologique de Leray-Schauder qui est utilisé pour montrer l'existence d'onde sur des intervalles bornés, avec ensuite, une extension à la droite réelle tout entière. Dans [10], le degré topologique est défini et utilisé directement pour l'espace non borné \mathbb{R} . D'autre part, une estimation de la vitesse de l'onde dans l'asymptotique des grandes énergies d'activation est donnée dans [8] et [11]. Cependant, on constate que cette estimation tend vers l'infini lorsque le nombre de Lewis, rapport du coefficient de diffusion thermique sur le coefficient de diffusion massique, tend vers l'infini. Mais, dans le cas d'une chimie simple, il est montré dans [5], en utilisant le degré de Leray Schauder, que la vitesse de l'onde admet une limite finie quand le nombre de Lewis tend vers l'infini.

Dans cette Note, on s'intéresse à une chimie complexe du même type que dans [10], avec une matrice Γ de rang N , c'est à dire que l'on suppose que les réactions sont linéairement indépendantes. Ce type de système peut être ramené [10] à un système sur des variables monotones u_i par le changement de variables : $A = \Gamma u + A^+$. On redémontre ici les résultats d'existence d'onde progressive, en utilisant une méthode plus directe que dans [10], basée sur une modification des équations et utilisant un degré topologique défini pour des ouverts non bornés. Puis, on s'intéresse, au comportement des ondes progressives quand le nombre de Lewis tend vers l'infini, généralisant ainsi une partie des résultats de [5].

Par soucis de clareté, et puisque la difficulté principale de ce type de système est l'éventuelle non linéarité du terme source en les concentrations (après avoir fait le changement de variables $A = \Gamma u + A^+$), on détaille les résultats pour un système plus simple, correspondant à une seule réaction d'ordre n . Cependant, les résultats sont valables pour le système décrit ci-dessus. On étudie donc le système suivant :

$$(\mathcal{S}_d) \quad \begin{cases} \kappa\theta'' + c\theta' + \tilde{k}(\theta)(1 - \alpha)^n = 0, \\ d\alpha'' + c\alpha' + \tilde{k}(\theta)(1 - \alpha)^n = 0, \\ \lim_{x \rightarrow -\infty} \theta(x) = 1, \quad \lim_{x \rightarrow -\infty} \alpha(x) = 1, \quad \lim_{x \rightarrow +\infty} \theta(x) = 0, \quad \lim_{x \rightarrow +\infty} \alpha(x) = 0, \end{cases} \quad (6.3)$$

où θ est la température réduite du gaz (elle vaut 0 pour les gaz frais et 1 pour les gaz brûlés) et α la fraction massique du produit de la réaction. Ici, le nombre de Lewis $Le = \kappa/d$ est supposé supérieur à 1. Notons (\mathcal{S}_0) ce même système mais sans diffusion : $d = 0$.

La fonction \tilde{k} est régulière et proche du coefficient d'Arrhenius : afin d'éviter le problème de la frontière froide [11] on a introduit une température d'allumage $\theta_c > 0$ (dans [7] et [2], cette température est la température des gaz frais $\theta_c = 0$, mais ce n'est pas l'objet de cette Note) et $\tilde{k}(\theta)$ s'annule pour $\theta \leq \theta_c$.

La démonstration du résultat d'existence d'onde est réalisée en utilisant le degré topologique pour des opérateurs elliptiques, de Fredholm et propres, dans des domaines non bornés. Ce degré est défini dans [9] pour le cas plus général des cylindres non bornés et pour des espaces de Hölder à poids où le poids est polynômial (pour des espaces de Sobolev à poids, le degré est défini dans [10]). Ici, ces espaces sont :

$E_1 = C_{\mu}^{2+\delta}(\mathbb{R})$ et $E_2 = C_{\mu}^{\delta}(\mathbb{R})$, avec $\mu(x) = 1 + x^2$. Dans [9], la construction du degré est appliquée à des opérateurs généraux de réaction-diffusion du type $Aw = aw'' + c(w)w' + F(w)$, où a est une matrice constante, diagonale avec des termes strictement positifs sur la diagonale et où F s'annule en w^+ et w^- avec $w^+ \neq w^-$. La fonction w est telle que $w - (1 - \Phi)w^+ - \Phi w^- \in E_1$, où Φ est une fonction C^{∞} valant 1 sur $]-\infty, 0]$ et 0 sur $[1, +\infty[$. La fonctionnelle $c(w)$ introduite à la place de la vitesse de l'onde est définie par :

$$c(w) = \ln \int_{\mathbb{R}} |w(x) - w^+|^2 \sigma(x) dx, \quad (6.4)$$

où σ est une fonction croissante sur \mathbb{R} , de limite 0 en $-\infty$ et 1 en $+\infty$ et telle que $\int_{-\infty}^0 \sigma(x) dx < \infty$. Cette fonctionnelle est telle que, si on note $w_h(x) = w(x + h)$, alors $c(w_h)$ en tant que fonction de h est une bijection décroissante de \mathbb{R} sur \mathbb{R} . Elle est aussi telle que, pour toute solution w de $Aw = 0$, on a : $\langle c'(w), w' \rangle \neq 0$. Elle permet ainsi de résoudre les problèmes liés à l'invariance par translation et le problème de valeur propre nulle [9]. Alors, si la condition

$$\forall \lambda \geq 0, \quad \forall \xi \in \mathbb{R}, \quad \det(-a\xi^2 + c(w)i\xi + F'(w^{\pm}) - \lambda I) \neq 0 \quad (6.5)$$

est réalisée, on peut définir le degré topologique pour l'opérateur A . Cependant, on ne peut pas appliquer directement ces résultats pour notre problème (\mathcal{S}_d) : la condition (6.5) n'est pas vérifiée, ni en $+\infty$, ni en $-\infty$. Afin de vérifier la condition en $-\infty$, on introduit un petit paramètre ϵ et le système secondaire :

$$(\mathcal{S}_{sec}) \quad \begin{cases} \kappa\theta'' + c\theta' + (1 - \epsilon)\tilde{k}(\theta)(1 - \alpha)^n + \epsilon\tilde{k}(\theta)(1 - \alpha) + \epsilon^2\tilde{k}(\theta)(\alpha - \theta) = 0, \\ d\alpha'' + c\alpha' + (1 - \epsilon)\tilde{k}(\theta)(1 - \alpha)^n + \epsilon\tilde{k}(\theta)(1 - \alpha) = 0, \\ \lim_{x \rightarrow -\infty} \theta(x) = 1, \quad \lim_{x \rightarrow -\infty} \alpha(x) = 1, \quad \lim_{x \rightarrow +\infty} \theta(x) = 0, \quad \lim_{x \rightarrow +\infty} \alpha(x) = 0. \end{cases} \quad (6.6)$$

On verra qu'un changement de variables permet de vérifier la condition en $+\infty$ et ainsi, de pouvoir définir le degré topologique pour l'opérateur correspondant. Dans [10], des termes petits sont également ajoutés aux équations, mais leurs formes ne sont pas explicitement reliées aux variables, et les homotopies sont alors plus complexes.

Dans la section 2, on donne des estimations a priori nécessaires pour montrer l'existence de solution de (\mathcal{S}_{sec}) ainsi que pour les passages à la limite. L'existence de solution de (\mathcal{S}_{sec}) est alors montrée, dans la section 3, en se ramenant, par une homotopie, à un système avec une seule équation. Enfin, dans la section 4, on réalise les deux passages à la limite : un sur ϵ pour retrouver (\mathcal{S}_d) et un deuxième quand d tend vers 0.

6.9.2 Estimations a priori

On donne ici des estimations a priori valables pour $\epsilon \geq 0$ assez petit et $d \leq \kappa$. Celles-ci sont suffisamment générales pour servir à la fois pour montrer l'existence de solution du système secondaire dans la section 3 et pour réaliser les passages à la limite qui permettent de passer du système secondaire au système initial avec diffusion puis du système avec diffusion au système sans diffusion (section 4).

Commençons par remarquer qu'une onde solution du système (\mathcal{S}_{sec}) est nécessairement de profil monotone et de vitesse positive.

Proposition 6.21 *Si, pour $0 < d \leq \kappa$ et $\epsilon \geq 0$, il existe un scalaire c et des solutions θ et α dans $C^{2+\delta}(\mathbb{R})$ de (\mathcal{S}_{sec}) alors c est strictement positif et les fonctions θ et α sont strictement décroissantes.*

Donnons alors des estimations, indépendantes de d et ϵ , des solutions du problème (\mathcal{S}_{sec}) .

Théorème 6.22 *Il existe des constantes $M > 0$, $c^- > 0$ et c^+ telles que pour chaque $d \in]0, \kappa]$ et pour chaque $\epsilon \in [0, \epsilon_0]$, avec $\epsilon_0 = \frac{1}{2} \int_0^1 \tilde{k}(y)(1-y)^n dy / (n \int_0^1 \tilde{k}(y) dy + \int_0^1 \tilde{k}(y)(1-y)^n dy) \in]0, 1[$, s'il existe un scalaire c et des solutions θ et α dans $C^{2+\delta}(\mathbb{R})$ de (\mathcal{S}_{sec}) , alors on a : $\|\theta\|_{C^{2+\delta}(\mathbb{R})} \leq M$, $\|\alpha\|_{C^{2+\delta}(\mathbb{R})} \leq M$, $c^- \leq c \leq c^+$ et aussi $\theta > (1 - \epsilon)\alpha$.*

Les démonstrations de ces résultats seront détaillées dans [4].

6.9.3 Existence de solution du système (\mathcal{S}_{sec})

Pour montrer l'existence de solution du système (\mathcal{S}_{sec}) , on réalise une homotopie entre l'opérateur correspondant et un opérateur 'plus simple' dont on peut calculer le degré.

Notons E l'espace des fonctions u telles que $u - \Phi \in E_1$ où Φ a été définie dans l'introduction. Considérons l'opérateur suivant, dépendant du paramètre $\tau \in [0, 1]$, défini pour $\theta, \alpha \in E$ par :

$$A_\tau \begin{pmatrix} \theta \\ \alpha \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \kappa\theta'' + \tilde{c}(\theta, \alpha)\theta' + (1 - \epsilon)\tilde{k}(\theta)(1 - \alpha)^n + \epsilon\tilde{k}(\theta)(1 - \alpha) + \epsilon^2\tilde{k}(\theta)(\alpha - \theta) \\ d_\tau\alpha'' + \tilde{c}(\theta, \alpha)\alpha' + (1 - \epsilon)\tilde{k}(\theta)(1 - \alpha)^n + \epsilon\tilde{k}(\theta)(1 - \alpha) \end{pmatrix}, \quad (6.7)$$

avec $d_\tau = d(1 - \tau) + \kappa\tau$ et $\tau \in [0, 1]$. Grâce aux estimations précédentes, on peut introduire un changement de variable qui permet de vérifier la condition (6.5) en $+\infty$. Posons λ un réel tel que $0 < \lambda < c^-/\kappa$, où $c^- > 0$ est le minorant de la vitesse obtenu dans le Théorème 6.22. On note alors ζ la fonction définie pour $x \in \mathbb{R}$ par $\zeta(x) = \exp(\lambda[1 - \Phi(x)]x)$ et on fait le changement de variables suivant : $t = \zeta\theta$, $a = \zeta\alpha$. Les fonctions t et a d'un côté et θ et α de l'autre, sont identiques sur $] - \infty, 0]$. De plus, si $A_\tau(\theta, \alpha) = 0$ et si on note $x_c = \theta^{-1}(\theta_c)$, alors, pour $x \geq 1$ et $x \geq x_c$, on a : $t(x) = \theta_c e^{cx_c/\kappa} e^{(\lambda - c/\kappa)x}$ et $a(x) = \alpha(x_c) e^{cx_c/d} e^{(\lambda - c/d)x}$. On montre alors facilement que les systèmes avant et après changement de variable sont équivalents, si dans les deux cas, on cherche les solutions dans l'espace E . On note \tilde{A}_τ l'opérateur obtenu après changement de variable : $\tilde{A}_\tau(t, a) = \zeta A_\tau(t/\zeta, a/\zeta)$. La fonctionnelle \tilde{c} est alors donnée par $\tilde{c}(\theta, \alpha) = c(t, a)$, où c est définie par (6.4), avec $w^+ = (0, 0)$.

Cependant, pour retrouver des estimations a priori dans les espaces de Hölder, indépendantes de τ , on a besoin d'une majoration de x_c , qui provient essentiellement de la forme de la fonctionnelle choisie. On peut se ramener, par translation sur la fonction σ de (6.4), à $2 \int_{-\infty}^0 \sigma(x) dx \leq 1$. On a alors :

Lemme 6.23 *Pour toute solution $(\theta, \alpha) \in E^2$ de $A_\tau(\theta, \alpha) = 0$, le réel $x_c = \theta^{-1}(\theta_c)$ est borné indépendamment de τ .*

Il est facile de vérifier que l'opérateur \tilde{A}_τ satisfait la condition (6.5). Montrons alors que ses zéros sont nécessairement contenus dans une boule de l'espace E :

Théorème 6.24 *Soit $d \in]0, \kappa]$ et $\epsilon \in]0, \epsilon_0]$. Il existe une constante $R > 0$ telle que, pour chaque $\tau \in [0, 1]$, s'il existe des solutions t_τ et a_τ dans E de $\tilde{A}_\tau(t_\tau, a_\tau) = 0$, alors on a : $\|\Phi - t_\tau\|_{C_\mu^{2+\delta}(\mathbb{R})} < R$ et $\|\Phi - a_\tau\|_{C_\mu^{2+\delta}(\mathbb{R})} < R$.*

Les estimations dans les espaces de Hölder sont obtenues grâce au Théorème 6.22 et au Lemme 6.23. Les estimations dans l'espace à poids sont possibles car on ne peut pas tendre vers un point critique 'intermédiaire'. En effet, $x_c = \theta_\tau^{-1}(\theta_c)$ est borné indépendamment de τ et les points critiques du type $\theta = cste \leq \theta_c$

sont localisés sur $[x_c, +\infty[$, où les fonctions θ et α sont chacune comprises entre deux exponentielles décroissantes, et le seul autre point critique est $\theta = \alpha = 1$.

Ainsi, si on note $\mathcal{B} \subset E^2$ la boule ouverte centrée en Φ et de rayon R , où R est la constante du Théorème 6.24, alors \tilde{A}_7 ne s'annule jamais sur le bord de \mathcal{B} et les opérateurs \tilde{A}_0 et \tilde{A}_1 ont le même degré topologique [9]. On a alors le théorème d'existence pour le système secondaire :

Théorème 6.25 *Pour chaque $d \in]0, \kappa]$ et $\epsilon \in]0, \epsilon_0]$, il existe un scalaire c et des fonctions θ et α dans E solution du système (\mathcal{S}_{sec}) .*

Démonstration. – En effet, on montre que le système $A_1(\theta, \alpha) = 0$ avec θ et α dans E se réduit à : $\theta = \alpha \in E$ solution de : $\kappa\theta'' + c(\theta)\theta' + \tilde{k}(\theta)[(1 - \epsilon)(1 - \theta)^n + \epsilon(1 - \theta)] = 0$. Ce problème admet une unique solution. Ainsi, \tilde{A}_1 s'annule en un unique point (t, a) . De plus, grâce à la fonctionnalisation de c , l'opérateur $A'_1(t, a)$ n'admet pas de valeur propre nulle. On sait alors [9], que son degré topologique par rapport à \mathcal{B} , qui contient (t, a) , est 1 ou -1. En particulier, il n'est pas nul et donc, le degré de \tilde{A}_0 par rapport à \mathcal{B} non plus. Par conséquent, il existe une solution $u \in B$ de $\tilde{A}_0 u = 0$. \square

6.9.4 Passages à la limite

Dans la section précédente, on a vu que le système secondaire (\mathcal{S}_{sec}) admet une solution pour chaque $\epsilon > 0$ suffisamment petit. Grâce à ce résultat et aux estimations de la section 2, on peut maintenant montrer l'existence de solution de notre problème initial (\mathcal{S}_d) en faisant tendre ϵ vers 0. On fait ensuite le lien avec le système sans diffusion en faisant tendre d vers zéro :

Théorème 6.26 *Pour chaque $d \in]0, \kappa]$, il existe un scalaire c_d et des fonctions α_d et θ_d dans $C^{2+\delta}(\mathbb{R})$ solutions du problème (\mathcal{S}_d) . De plus, on a $\theta_d \geq \alpha_d$.*

Il existe un scalaire c et des fonctions α et θ dans $C^{2+\delta}(\mathbb{R})$ solutions du problème sans diffusion (\mathcal{S}_0) . De plus, il existe une suite (d_n) qui converge vers 0, telle que (c_{d_n}) converge vers c , (θ_{d_n}) et (α_{d_n}) convergent en norme C^2 sur tout borné vers θ et α . Enfin, on a $\theta \geq \alpha$.

Démonstration. – Détaillons seulement le deuxième passage à la limite (le premier se fait de la même manière). Grâce aux estimations (valable aussi pour $\epsilon = 0$) et par un théorème classique d'analyse fonctionnelle, on a directement la convergence, en norme C^2 sur tout borné, de sous-suites (θ_{d_n}) et (α_{d_n}) vers des fonctions θ et α de $C^{2+\delta}(\mathbb{R})$. Sans perte de généralité, on suppose que la suite bornée (c_{d_n}) converge vers un réel c . Le passage à la limite des inégalités indique que $0 < c^- \leq c \leq c^+$, que θ et α sont décroissantes et comprises entre 0 et 1 et que $\theta \geq \alpha$. On retrouve alors les limites de θ et α en $\pm\infty$. \square

On peut remarquer que, si on a un résultat d'unicité pour le problème (\mathcal{S}_0) , comme dans le cas $n = 1$, alors on a la convergence de c_d , θ_d et α_d vers c , θ et α quand d tend vers 0. On a donc généralisé le résultat de passage à la limite de la vitesse de l'onde quand L tend vers l'infini de [5] à une chimie d'ordre n et, de manière immédiate, à une chimie complexe de réactions irréversibles exothermiques formant un graphe ouvert, grâce à un changement de variable [10]. D'autre part, ce type de méthode peut aussi être utilisé pour montrer l'existence d'ondes planes 1D dans des configurations où le réactant est présent sous forme d'une phase liquide dispersée : un brouillard de gouttes polydispersé [6].

Bibliographie

- [1] Berestycki H., Nicolaenko B., Scheurer B., Traveling wave solutions to reaction-diffusion systems modeling combustion, *Nonlinear partial differential equations* (1982), 189-208
- [2] Bonnet A., Propagation of Flames in the Limit of Zero Ignition Temperature, *Arch. Rational. Mech. Anal.* 138, No. 3 (1997) 205-238
- [3] Giovangigli V., Plane laminar flames with multicomponent transport and complex chemistry, *Mathematical Models and Methods in Applied Sciences*, Vol. 9, No. 3 (1999) 337-378
- [4] Laurent F., Massot M., Volpert V., Propagation of gaseous flames in the limit of small diffusion coefficients, en préparation (2002)
- [5] Logak E., Loubeau V., Travelling wave solutions to a condensed phase combustion model, *Asymptotic. Anal.* 12, No. 4 (1996) 259-294
- [6] Laurent F., Massot M., Propagation of plane polydispersed spray flames, prépublication MAPLY, UMR 5585 Lyon (2002) (<http://maply.univ-lyon1.fr/publis/publiv/2002/publis.html>)
- [7] Marion M., Mathematical study of a model with no ignition temperature for laminar plane flames, *Lectures in Appl. Math.* 24 (1985) 239-252
- [8] Novozhilov B.V., The rate of propagation of the front of an exothermic reaction in a condensed phase, *Dokl. Phys. Chem.* 141 (1961) 836-838
- [9] Volpert V.A., Volpert A.I., Collet J.F., Topological degree for elliptic operators in unbounded cylinders, *Adv. Diff. Eq.*, Vol. 4 (1999) 777-812
- [10] Volpert A.I., Volpert V.A., Volpert V.A., Travelling Wave Solutions of Parabolic Systems, *Translations of Mathematical Monographs*, vol. 140, American Mathematical Society (1994)
- [11] Zel'dovich Ya.B., Barenblatt G.I., Librovich V.B., Makhviladze G.M., *Mathematical Theory of Combustion and Explosions*, Plenum Press, New York, 1985 (English translation)

Chapter 7

Propagation of plane polydispersed Spray Flames.

Prépublication MAPLY no 350:

F. LAURENT, M. MASSOT, *Propagation of plane polydispersed Spray Flames*, soumis, prépublication MAPLY, UMR 5585 Lyon (2002) (<http://maply.univ-lyon1.fr/publis/publiv/2002/publis.html>)

Abstract. *In this paper, we investigate the existence of mono-dimensional traveling wave of a coupled thermo-diffusive–kinetic model describing the propagation of a plane flame in a polydisperse spray. We first present the model which bridges the gap between the models used for realistic numerical simulations and the ones used for mathematical studies; it couples a thermo-diffusive model for the gaseous phase with a one-step finite rate chemistry with a kinetic equation describing the vaporization of a polydisperse spray, the vaporization rate of which depends on the local gas temperature and fuel mass fraction. Such a mixed hyperbolic-parabolic system of equations offers two difficulties as compared to previous works: first there is no spatial diffusion on the spray variables and second, if we look for a traveling wave solution, the resulting system of equation is not a system of ODE's but a system of ODE's coupled to a partial differential equation. In order to tackle these difficulties, we introduce some spatial diffusion, which can be interpreted as the gas turbulent agitation, and discretize the PDE in the size phase space using a multi-fluid model. We can then use the topological degree for elliptic systems in unbounded domains, and deduce the existence of the wave for the modified and discretized system. We finally pass to the limit in zero spatial mass diffusion, subsequently, in the droplet size discretization step, and conclude with the existence of a traveling wave for the initial system. It is a first step in the study of the qualitative properties of polydispersed spray flames.*

7.1 Introduction

The propagation of plane premixed gaseous flames has been the subject of a very wide literature in the past 50 years since the early works of Zeldovich and Frank-Kamenetskii [ZBLM85], [ZFK38] who introduced the principles of high activation energy asymptotics. The problem has been tackled using a great variety of tools ranging from direct numerical simulations, asymptotics, to topological degree theory in order to prove the existence of traveling waves for reaction diffusion partial differential equations. Having physics, chemistry and mathematics as various breeding grounds, the theory of flame propagation has provided fundamental studies in order to capture the qualitative behavior of homogeneous flames and can be considered to have reached maturity.

Such a conclusion can not be drawn at all for two-phase flames. One can find articles published mainly in the physics literature for both laminar and turbulent flames [RV00], [RMV01], [GST98], [KG97], [SGT91], [MKGS98], [LSN⁺02]. The main purposes of these papers is either to develop new models of turbulent spray combustion or to characterize the spray flame essential features (flame velocity, structure...). It is then difficult to precisely extract from the complexity of the parameter space the relevant ones. On the mathematical side however, few studies have been devoted to the subject since the structure of the system of partial differential equations is essentially more difficult to tackle. A very recent study has been devoted to the subject [BD02] for monodisperse sprays with a simplified model for the vaporization thus leading to an interesting flame stability investigation. It was written at the same time as the present work and can be considered as complementary. In the present paper, we aim at bridging the gap between the models used in order to simulate realistic flames [AS89], [MKGS98], [LM01] and simplified vaporization models from which too much physics has been extracted, and at conducting a mathematical analysis of the existence of traveling waves for the obtained fluid-kinetic model. This model is obtained using the usual thermo-diffusive model with a one-step finite rate chemistry where the fuel mass fraction equation admits a source term coming from the mass exchange between the phases. Since it can have a strong effect on flame structures [MKGS98], [SGT91], the polydispersion in size of the spray is considered in the model. The spray satisfies either an advection equation in the size phase space, the velocity of which depends nonlinearly on the local gas temperature and mass fraction and is related to the rate of vaporization, or a generalized Fokker-Planck equation which is associated to a local turbulent agitation of zero mean value.

Numerous studies have been devoted to the propagation of plane gaseous flames, as mono-dimensional traveling wave for the thermo-diffusive model. More specifically, the existence of such waves is proved, for example in [BNS83] for a one-step chemistry, in [VVV94] for a complex chemistry network of irreversible exothermic reactions and in [Gio99] for a complex chemistry network of reversible exothermic reactions and for detailed transport. As far as the existence proofs are concerned, various tools have been used such as the Leray-Schauder degree in [BNS83], [Gio99] in order to prove the existence in bounded domain, the solution being then extended to the whole real line, or such as the topological degree directly defined for unbounded domains [VVV94]. These tools are defined for elliptic operators, all variables experiencing diffusion. For condensed phase reaction fronts, a mass diffusion can then be first added, in order to still use these tools, the mass diffusion coefficient then approaching zero, as it was proposed in [LL96] for a one-step chemistry and in [LMV02] for a complex chemistry network of irreversible exothermic reactions. We here make use of the technique developed in [LMV02]: the existence proof is conducted for an elliptic system of equation where mass diffusion can be related to a gaseous turbulent agitation. The topological degree defined in [VVC99] for elliptic operators in unbounded domains can be used and we pass to the limit when the mass diffusion

coefficient tends to zero which is equivalent to let the turbulent kinetic energy decrease to zero.

The key point of the paper is the ability to treat the coupled fluid-kinetic system. The model for the liquid phase is a kinetic model: the spray is described by its distribution function, satisfying the Williams equation, which is either of Boltzmann type [Wil58], [Wil85] or of Fokker-Planck type if we consider an averaged distribution function with an underlying gaseous turbulent agitation [DS97]. The corresponding phase space is thus two dimensional and the second order ODE deduced from the thermo-diffusive model in order to describe a traveling wave is coupled to a PDE, which makes the problem essentially more difficult.

In order to tackle this difficulty, we use a Eulerian discretization of the distribution function in the size phase space: the multi-fluid model derived from the kinetic model in [LM01]. For problems without dynamic effect (the droplet are assumed to be motionless or thermalized by the gas velocity fluctuations around a zero mean velocity) this model can be considered to be an upwind finite volume discretization in the droplet size of the distribution function. The corresponding numerical analysis is performed in [Lau02], [LM02], showing that the method is first order under some compatibility conditions. This numerical analysis allows us to get back to the kinetic model, passing to the limit when the number of sections tends to infinity, as long as we are able to prove the existence of traveling wave for the finite dimensional spray elliptic system coupled to the elliptic thermo-diffusive model for the gas. We finally conclude with the existence of plane flames propagating in two-phase medium, for a Lewis number Le , which is the rate between the heat diffusion coefficient and the mass diffusion coefficient of the gaseous fuel, greater than 1.

The paper is organized as follow: the fluid-kinetic model and the discretization by the multi-fluid method are presented in Section 7.2. Some fundamentals on the topological degree are recalled in Section 7.3. It shows that, in order to use this tool, we have to add a diffusion term and some other terms controlled by a small added parameter. For a Lewis number such that $Le \geq 1 + p$, where $p \geq 0$ only depends of the fuel vapor saturated mass fraction function and of the temperature of the fresh gas, some estimates on this system are presented in Section 7.4, which will be useful in order to prove existence of solutions in Section 7.5 and to pass to the limit when the small parameter and the diffusion coefficient tend to zero in Section 7.6. Finally, the numerical analysis conducted in [Lau02] allows us to conclude on the existence of a traveling wave for the original system.

7.2 Polydispersed spray flame model

In this section, we introduce a reaction-diffusion-source model for the gaseous phase coupled to a kinetic description of the polydisperse spray. We first consider a global model and then concentrate on traveling waves.

7.2.1 Polydispersed spray flame

We investigate a polydispersed spray flame at constant pressure and density. The spray of fuel droplets is evaporating in the gaseous phase, with no dynamical effect: the gas is at rest and droplets are motionless. In order to describe such a problem, we use a simplified model which takes into account the main physical characteristics of the configuration: a thermo-diffusive model, with a one step chemistry, coupled with a kinetic model of the liquid phase, describing the polydispersion of the spray. More precisely, in the gaseous phase, only one exothermic reaction $F \rightarrow P$ takes place between the fuel F and a product P , in the presence of an inert gas I , with constant mass fraction. The spray is supposed to be dilute (the liquid volume fraction

is much smaller than one) in such a way that the coupling of the spray with the gaseous phase only occurs through added source terms in conservation equations.

The mass conservation implies that $\rho = \rho_{gas} + \rho_{liq}$ is a constant, where ρ_{gas} is the gas mass density and ρ_{liq} is the liquid mass density per unit of total volume. We note $Y_{gas} = \rho_{gas}/\rho$ and $Y_{liq} = \rho_{liq}/\rho$.

The gas is multi-component and $Y_{gas} = Y_F + Y_P + Y_I$ where Y_F/Y_{gas} (respectively Y_P/Y_{gas} or Y_I/Y_{gas}) is the mass fraction of fuel (respectively of product P or of inert gas I) in the gaseous phase. We then have $Y_{liq} + Y_F + Y_P = 1 - \omega$ if we set $Y_I = \omega$.

The thermo-diffusive model for this reaction-diffusion problem can then be written:

$$\frac{\partial T}{\partial t} - \kappa \Delta T = q k(T) Y_F, \quad (7.1)$$

$$\frac{\partial Y_F}{\partial t} - D \Delta Y_F = -k(T) Y_F + S^m, \quad (7.2)$$

where t is the time, x the space variable, $x \in \mathbb{R}^d$, T the gas temperature, κ the thermal diffusivity, D the diffusivity of the fuel. The function k is close to the Arrhenius coefficient: in order to avoid the cold boundary problem [ZBLM85] [GM98], we introduce an ignition temperature T_c . So $k(T)$ is a regular function of T ; it is zero for $T \in]-\infty, T_c]$, increasing for $T \in [T_c, T_c + \eta]$ and equal to the Arrhenius coefficient for $T \in [T_c + \eta, +\infty[$, with η a small positive real number. We assume that the vaporization has a negligible influence on the gas temperature, so that a source term S^m only appears in the fuel conservation equation. The expression of the source term S^m relies on a kinetic description of the spray.

Remark 1 Here, we use the equation on Y_F and not the equation on Y_P :

$$\frac{\partial}{\partial t} Y_P - D \Delta Y_P = k(T) Y_F + D \Delta Y_{liq}$$

because the variable Y_F is better adapted to our problem, even if it is not necessarily monotone along trajectories.

The dispersed phase is described by its distribution function $f(t, x, S)$ where S is the surface of the droplets. Because the droplets are motionless, the Williams' equation describing the evolution of f [Wil58] reduces to the transport equation:

$$\frac{\partial}{\partial t} f + R_S \frac{\partial}{\partial S} f = 0, \quad (7.3)$$

where $R_S(T, Y_F)$ is the rate of change of droplet surface, due to evaporation. We assume that the d^2 law holds so that R_S is independent of the size of the droplets.

A model for the vaporization rate is given in [AS89]. In our case of zero Reynolds number, and if we preclude condensation, it reads:

$$R_S(T, Y_F) = \varphi \ln(1 + B_M(T, Y_F))^+, \quad B_M(T, Y_F) = \frac{Y_{F_s}(T) - Y_F}{1 - Y_{F_s}(T)}, \quad (7.4)$$

where φ is a positive constant and, for a real u , u^+ is equal to u if u is positive and to zero otherwise. The function Y_{F_s} represents the fuel vapor saturated mass fraction. It is supposed to be equal to the fuel vapor saturated molar fraction x_{F_s} and then only depends on the temperature, the pressure being constant. It is

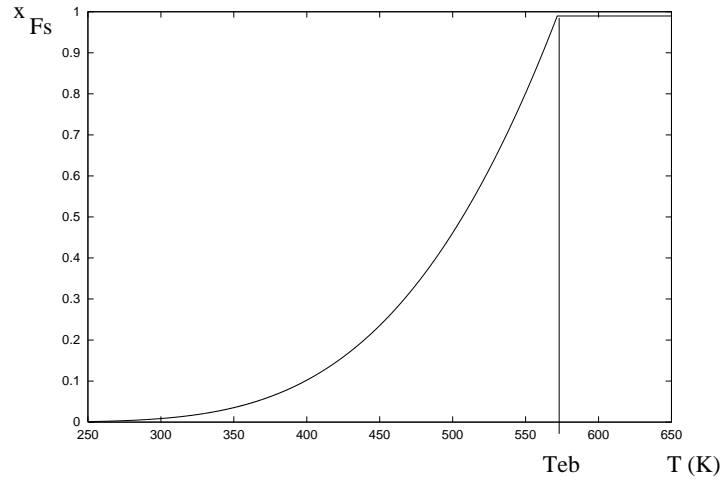


Figure 7.1: Fuel vapor saturated molar fraction for heptane, as a function of the temperature, at the atmospheric pressure.

coherent with the system (7.1), (7.2), where the various molar masses of the species have been taken equal and the details of the chemical mechanism and composition have been neglected. The function $x_{F_s}(T)$ is drawn, for heptane, in Fig. 7.1.

The function $Y_{F_s}(T)$ is then assumed regular (at least C^2) and such that:

$$\begin{array}{ll} \text{if } 0 \leq T < T_{eb} - \nu & \text{then } Y'_{F_s}(T) > 0, \quad Y''_{F_s}(T) > 0, \\ \text{if } T_{eb} - \nu \leq T < T_{eb} & \text{then } Y'_{F_s}(T) > 0, \quad Y''_{F_s}(T) \leq 0, \\ \text{if } T \geq T_{eb} & \text{then } Y_{F_s}(T) = 1 - \delta, \end{array}$$

where T_{eb} is the boiling temperature, ν is a small positive real number and δ is a number such that $0 < \delta \leq \omega < 1$. Those assumptions correspond, for example, to the shape of function x_{F_s} for heptane which is drawn in Fig. 7.1 and used for practical applications [LSN⁺02], [MKGS98].

Remark 2 The vaporization rate is bounded because the upper bound of $Y_{F_s}(T)$ is assumed to be strictly smaller than one. It is coherent with physics of droplet vaporization: the vaporization can not be instantaneous for large temperatures because of the presence of a diffusion layer.

The source term of fuel for the gaseous phase is then given by:

$$S^m(t, x, T, Y_F) = \frac{\rho_l}{4\sqrt{\pi}} R_S(T, Y_F) \int_0^{+\infty} S^{1/2} f(t, x, S) dS. \quad (7.5)$$

System (7.1), (7.2) and equation (7.3) are then coupled together through both $S^m(t, x)$ which is a non local term and through $R_S(T, Y_F)$ which depends on the local gas state.

The complete system of partial differential equations is then:

$$(\mathcal{PDE}) \quad \begin{cases} \frac{\partial T}{\partial t} - \kappa \Delta T = q k(T) Y_F, \\ \frac{\partial Y_F}{\partial t} - D \Delta Y_F = -k(T) Y_F + S^m(t, x, T, Y_F), \\ \frac{\partial f}{\partial t} + R_S(T, Y_F) \frac{\partial f}{\partial S} = 0, \end{cases}$$

with the source term:

$$S^m(t, x, T, Y_F) = \frac{\rho_l}{4\sqrt{\pi}} R_S(T, Y_F) \int_0^{+\infty} S^{1/2} f(t, x, S) dS.$$

The purpose of the present paper is then to investigate the existence of traveling wave solutions for the system (\mathcal{PDE}) . The originality of this study is to use mathematical tools such as the topological degree for elliptic operator in unbounded domains in order to study a system of mixed type hyperbolic-parabolic which, even if simplified, still preserves the details of the vaporization process and its coupling with the propagation of a flame.

7.2.2 Solutions as mono-dimensional traveling waves

We investigate mono-dimensional plane polydispersed spray flames as traveling waves for the system (\mathcal{PDE}) . We then consider $T(t, x)$, $Y_F(t, x)$ and $f(t, x, \cdot)$ as functions of $z = x - ct$, with given boundary conditions at infinity. More precisely, we assume that at $+\infty$, a cold gas at temperature T_0 and a polydisperse spray coexist. The gas is only composed of fuel and inert gas, with mass fractions: $Y_F^{+\infty} = Y_{Fs}(T_0)$ and $Y_I = \omega$, respectively. The distribution function of the spray is given by a function f_0 , assumed regular (at least C^2 on \mathbb{R}^+) and of compact support: $f_0(S) = 0$ for $S \geq S_{max}$. It is consistent with distribution which can be experimentally obtained [MKGS98] [LSN⁺02]. An example of such a function is given on Fig. 7.2. We also note $Y_{liq}^{+\infty}$ the total liquid mass density at $+\infty$ and we have:

$$Y_{liq}^{+\infty} = \frac{\rho_l}{6\sqrt{\pi}} \int_0^{\infty} S^{3/2} f_0(S) dS, \quad Y_F^{+\infty} + Y_{liq}^{+\infty} = 1 - \omega.$$

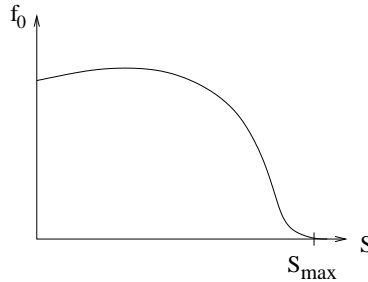


Figure 7.2: Distribution function of droplets at $+\infty$.

At $-\infty$, the liquid phase is completely vaporized and all the fuel is consumed. So, there is only a gaseous phase, at hot temperature $T_* > T_0$, composed of the product and the inert gas: $Y_F(-\infty) = 0$ and $Y_I = \omega$. A sketch of the configuration is given on Fig. 7.3.

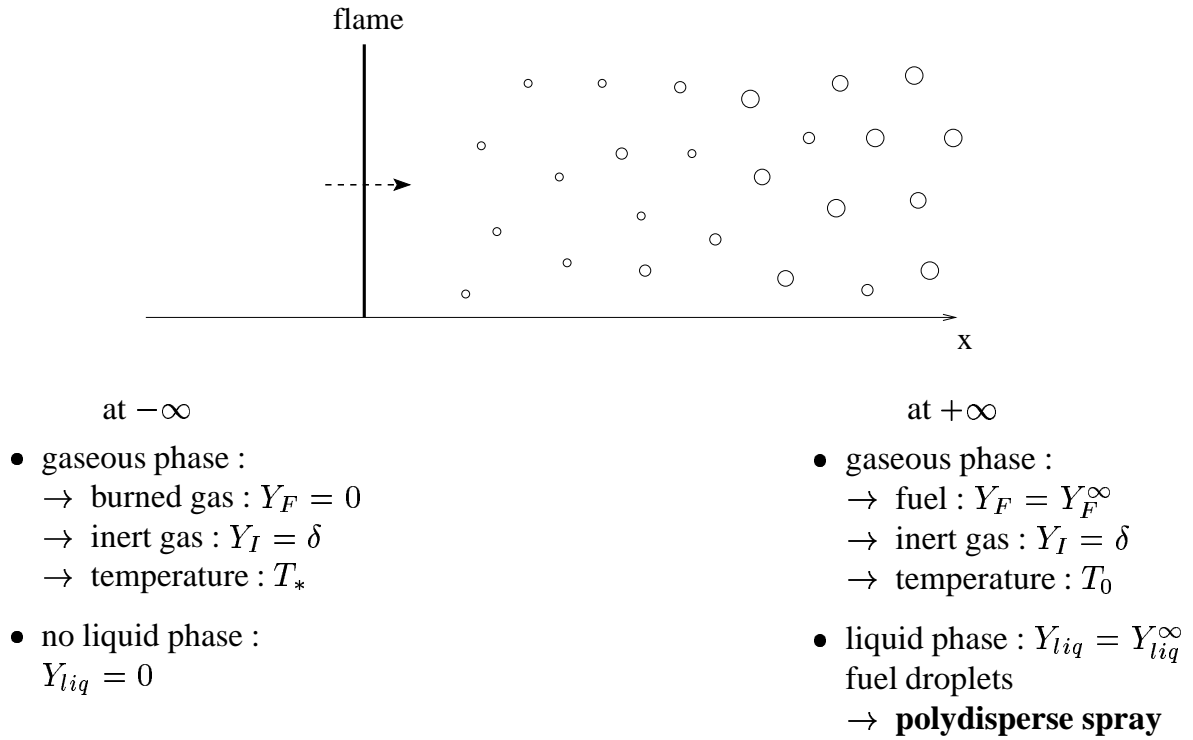


Figure 7.3: Sketch of the plane polydispersed spray flame.

We then define θ , α and ψ , the reduced temperature, mass fraction of fuel and distribution function such that:

$$T(t, x) = T_0 + (T_* - T_0) \theta(x - ct), \quad (7.6)$$

$$Y_F(t, x) = (1 - \omega) \alpha(x - ct), \quad (7.7)$$

$$f(t, x, S) = (1 - \omega) \psi(x - ct, S), \quad (7.8)$$

The distribution function at $+\infty$ in the new variables is then denoted ψ_0 (with $f_0 = (1 - \omega)\psi_0$). Let us also introduce the limit of α at $+\infty$:

$$\alpha^\infty = \frac{Y_F^{+\infty}}{1 - \omega}.$$

We then have:

$$\alpha^\infty + \frac{\rho_l}{6\sqrt{\pi}} \int_0^\infty S^{3/2} \psi_0(S) dS = 1.$$

The reduced ignition temperature is θ_c and the reduced boiling temperature θ_{eb} , with:

$$\theta_c = \frac{T_c - T_0}{T_* - T_0}, \quad \theta_{eb} = \frac{T_{eb} - T_0}{T_* - T_0}.$$

For each function h of T , Y_F or f , we note \tilde{h} the same function of θ , α or ψ . The function $\tilde{B}_M(\theta, \alpha)$ then reads:

$$\tilde{B}_M(\theta, \alpha) = \frac{\tilde{Y}_{Fs}(\theta) - (1 - \omega)\alpha}{1 - \tilde{Y}_{Fs}(\theta)}.$$

The reduced chemical rate $\tilde{k}(\theta) = k(T)$ vanishes for $\theta \leq \theta_c$. We assume that $\theta_c \in]0, 1[$ and $\theta_{eb} > 1$. We could eventually take $\theta_c = 0$ as in [Mar86] or [Bon97], but it is not the subject of this paper.

We obtain the system (S_0) :

$$(S_0) \quad \begin{cases} \kappa \theta'' + c \theta' + \tilde{k}(\theta) \alpha = 0, \\ D \alpha'' + c \alpha' - \tilde{k}(\theta) \alpha + S^m(z, \theta, \alpha) = 0, \\ c \partial_z \psi + \tilde{R}_S(\theta, \alpha) \partial_S \psi = 0, \quad S \geq 0, \end{cases}$$

with the source term:

$$S^m(z, \theta, \alpha) = \frac{\rho_l}{4\sqrt{\pi}} \tilde{R}_S(\theta, \alpha) \int_0^{+\infty} S^{1/2} \psi(z, S) dS,$$

and with the boundary conditions at infinity:

$$(\mathcal{L}_0) \quad \begin{cases} \theta(+\infty) = 0, \quad \alpha(+\infty) = \alpha^\infty, \quad \psi(+\infty, S) = \psi_0(S), \\ \theta(-\infty) = 1, \quad \alpha(-\infty) = 0, \quad \psi(-\infty, S) = 0. \end{cases}$$

Remark 3 An integration of the equations (7.1), (7.2) and (7.3) with $z \in \mathbb{R}$ and $S \in \mathbb{R}^+$ shows that $T_* - T_0 = q(Y_F^{+\infty} + Y_{liq}^{+\infty})$. It's the reason why q disappears in the first equation of system (S_0) .

Compared to the usual system of equations for mono-dimensional homogeneous gaseous flames [LMV02], the system is more complex because of the S dependence of the function ψ . But the equation on ψ being hyperbolic, an analytical solution for this function can be found, introducing the characteristics X :

$$\psi(z, S) = \psi_0(X(z, S)), \quad X(z, S) = S + \frac{1}{c} \int_z^\infty \tilde{R}_S(\theta(y), \alpha(y)) dy.$$

The system (S_0) can then be rewritten:

$$(S'_0) \quad \begin{cases} \kappa \theta'' + c \theta' + \tilde{k}(\theta) \alpha = 0, \\ D \alpha'' + c \alpha' - \tilde{k}(\theta) \alpha + S^m(z, \theta, \alpha) = 0, \end{cases}$$

with the source term and the characteristics:

$$S^m(z, \theta, \alpha) = \frac{\rho_l}{4\sqrt{\pi}} \tilde{R}_S(\theta, \alpha) \int_0^\infty S^{1/2} \psi_0(X(z, S)) dS,$$

$$X(z, S) = S + \frac{1}{c} \int_z^\infty \tilde{R}_S(\theta(y), \alpha(y)) dy.$$

and with the boundary conditions at infinity:

$$(\mathcal{L}'_0) \quad \begin{cases} \theta(+\infty) = 0, \quad \alpha(+\infty) = \alpha^\infty, \\ \theta(-\infty) = 1, \quad \alpha(-\infty) = 0. \end{cases}$$

However, the source term S^m is then non local: it depends on all the vaporization in $[z, +\infty[$. In order to avoid this problem and apply techniques developed in [LMV02], the system (S_0) is approximated by a finite dimensional one, which corresponds to a discretization of ψ as a function of S .

7.2.3 Use of a Eulerian multi-fluid model for the spray

Several type of methods have been developed in order to discretize the distribution function, tacking into account the polydispersion of the spray. But a Eulerian approach is needed here, in order to reintroduce local source terms. A fully Eulerian approach has been described and derived from the kinetic level of description in [LM01]: multi-fluid models. Moreover, the numerical analysis conducted in [Lau02] shows that, in our mono-dimensional case without neither dynamic nor thermal effect, a multi-fluid vaporizing model provides an approximation of order 1 of the kinetic equation. It can be seen as a discretization of the continuous size phase space, using a finite volume formulation, the size intervals being called the sections in reference to [GST93]. We can call such a method a multi-fluid method in that the dispersed phase is described as a set of continuous media: “fluids”, each “fluid” corresponding to a statistical average in a section: the cell defined by two fixed droplet sizes. The evolution of these coupled sections or “fluids” is governed by conservation equations for mass, momentum and enthalpy. In all previous references, only evaporation is considered and not condensation, thus resulting in a predefined upwind scheme; it is consistent with the model used for \tilde{R}_S .

Let us apply this multi-fluid method to our problem. We know that the function $\psi(z, S)$ is equal to zero if $S \geq S_{max}$ and we take a uniform partition of $[0, S_{max}]$: $S_i = i \Delta S$ with $i \in \{0, \dots, N\}$ and $\Delta S = S_{max}/N$. The sections are then the intervals $[S_{i-1}, S_i]$. Let $\hat{\mu}_i$ denote the reduced mass density of the i^{th} section:

$$\hat{\mu}_i(z) = \frac{\rho_l}{6\sqrt{\pi}} \int_{S_{i-1}}^{S_i} S^{3/2} \psi(z, S) dS. \quad (7.9)$$

As in [Lau02], the $\hat{\mu}_i$ are approximated by the μ_i such that:

$$\forall i \in \{1, \dots, N\}, \quad c \mu'_i(z) - \tilde{R}_S(\theta, \alpha) [(M_i + F_i) \mu_i(z) - F_{i+1} \mu_{i+1}(z)] = 0. \quad (7.10)$$

The term with M_i is the mass flux between the section i and the gas and the term with F_i is the mass flux between the section i and the section $i - 1$ ($F_{N+1} = 0$). If we choose to approximate ψ by a function of S constant in each section, then the constant coefficients M_i and F_i are [Lau02]:

$$\forall i \in \{1, \dots, N\}, \quad M_i = \frac{3 \int_{S_{i-1}}^{S_i} \sigma^{1/2} d\sigma}{2 \int_{S_{i-1}}^{S_i} \sigma^{3/2} d\sigma}, \quad F_i = \frac{S_{i-1}^{3/2}}{\int_{S_{i-1}}^{S_i} \sigma^{3/2} d\sigma}. \quad (7.11)$$

The boundary conditions are given by:

$$\mu_i(+\infty) = \mu_i^\infty = \frac{\rho_l}{6\sqrt{\pi}} \int_{S_{i-1}}^{S_i} S^{3/2} \psi_0(S) dS, \quad \mu_i(-\infty) = 0. \quad (7.12)$$

It is useless to consider a last section with 0 mass density at $+\infty$, because the mass density in this section would then be identically equal to 0. We then assume that the upper bound S_{max} has been chosen as the first point beyond which f_0 vanishes. It implies that μ_N^∞ is positive.

The techniques developed in [LMV02] are then applied to the system (S_N) :

$$(S_N) \quad \begin{cases} \kappa \theta'' + c \theta' + \tilde{k}(\theta) \alpha & = 0, \\ D \alpha'' + c \alpha' - \tilde{k}(\theta) \alpha + \tilde{R}_S(\theta, \alpha) \sum M_i \mu_i & = 0, \\ c \mu'_i & - \tilde{R}_S(\theta, \alpha) [(M_i + F_i) \mu_i - F_{i+1} \mu_{i+1}] = 0, \end{cases}$$

with the boundary conditions:

$$(\mathcal{L}_N) \quad \begin{cases} \theta(+\infty) = 0, & \alpha(+\infty) = \alpha^\infty, & \mu_i(+\infty) = \mu_i^\infty, \\ \theta(-\infty) = 1, & \alpha(-\infty) = 0, & \mu_i(-\infty) = 0 \end{cases}$$

The scheme is of order 1 in the surface step ΔS , as shown in [Lau02] and we will be able to recover the fluid-kinetic formulation (\mathcal{S}_0) , from the system (\mathcal{S}_N) , by taking the limit $N \rightarrow \infty$ (see section 7.6). We want to use the topological degree theory in order to prove the existence of solutions c, θ, α and μ_i for the system (\mathcal{S}_N) . However, the topological degree is defined for elliptic operator [VVC99], and the operator corresponding to the system (\mathcal{S}_N) is mixed hyperbolic/elliptic because there is no droplet diffusion. We then introduce a small diffusion coefficient ζ , and, as in [LMV02], we will study the limit when this diffusion coefficient tends to zero. The system with diffusion then reads:

$$(\mathcal{S}_\zeta) \quad \begin{cases} \kappa \theta'' + c \theta' + \tilde{k}(\theta) \alpha & = 0, \\ D \alpha'' + c \alpha' - \tilde{k}(\theta) \alpha + \tilde{R}_S(\theta, \alpha) \sum M_i \mu_i & = 0, \\ \zeta \mu_i'' + c \mu_i' - \tilde{R}_S(\theta, \alpha) [(M_i + F_i) \mu_i - F_{i+1} \mu_{i+1}] & = 0, \end{cases}$$

with the boundary conditions (\mathcal{L}_N) . We remark in the next subsection that the added diffusion can be interpreted as due to a small turbulent mixing.

7.2.4 Introducing turbulence and diffusion

When the droplets have their own dynamics, the distribution function f depends also on the droplet velocity u_l : $f(t, x, S, u_l)$. The transport equation then reads [Wil58], [Wil85]:

$$\frac{\partial f}{\partial t} + u_l \cdot \nabla_x f + \frac{\partial R_S f}{\partial S} + \nabla_{u_l} (F f) = 0, \quad (7.13)$$

where F is the drag acceleration. If we consider a Stokes drag, it reads:

$$F = \frac{\alpha}{S} (u - u_l),$$

where u is the gas velocity and α is a constant. The function R_S is assumed to be independent of u , thus neglecting the convective correction term [YC73], [LM01].

For turbulent flows, the gas velocity can be divided between its average value \bar{u} and a fluctuation u' which is of Gaussian type: $u = \bar{u} + u'$. As shown in [Ree91] and [CD97], an equation on the average \bar{f} of f reads:

$$\frac{\partial \bar{f}}{\partial t} + u_l \cdot \nabla_x \bar{f} + \frac{\partial R_S \bar{f}}{\partial S} + \nabla_{u_l} (\bar{F} \bar{f}) - \nabla_{u_l} \cdot (D_x \nabla_x \bar{f} + D_{u_l} \nabla_{u_l} \bar{f}) = 0, \quad (7.14)$$

where the averaged drag force reads:

$$F = \frac{\alpha}{S} (\bar{u} - u_l).$$

The random fluctuations in the gas velocity then generate, on average, a diffusion process in the phase space.

As in [LM01], we make an assumption on the shape of \bar{f} : in this article, the probability density function of the spray is supposed to be such that at a given size, there is only one characteristic velocity, with no

dispersion around it. But the considered flames were laminar. Here, we have to consider a dispersion around the characteristic velocity, because of the turbulence. So, we assume [RM02]:

$$\bar{f}(t, x, S, u_l) = n(t, x, S) \varphi_{\sigma(t, x, S)}(u_l - \bar{u}_l(t, x, S)),$$

where φ_{σ} is a Gaussian of dispersion σ :

$$\varphi_{\sigma}(v) = \frac{1}{(4\pi\sigma^2)^{3/2}} \exp\left(-\frac{3v^2}{4\sigma^2}\right).$$

From the equation (7.14), we obtain a semi-kinetic model used for the multi-fluid method [RM02]:

$$\frac{\partial n}{\partial t} + \nabla_x \cdot (n\bar{u}_l) + \frac{\partial R_S n}{\partial S} = 0 \quad (7.15)$$

$$\frac{\partial n \bar{u}_l}{\partial t} + \nabla_x \cdot \left(n \bar{u}_l \otimes \bar{u}_l + n \frac{2}{3} \sigma^2 \right) + \frac{\partial R_S n \bar{u}_l}{\partial S} = -\frac{\alpha}{S} n (\bar{u} - \bar{u}_l) - D_x \nabla_x n \quad (7.16)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} \left[n \left(\frac{\bar{u}_l^2}{2} + \sigma^2 \right) \right] + \nabla_x \cdot \left[n \bar{u}_l \left(\frac{\bar{u}_l^2}{2} + \sigma^2 \right) + n \frac{2}{3} \sigma^2 \bar{u}_l \right] + \frac{\partial}{\partial S} \left[R_S n \left(\frac{\bar{u}_l^2}{2} + \sigma^2 \right) \right] \\ = -\frac{\alpha}{S} n (\bar{u} - \bar{u}_l) \cdot \bar{u}_l - 2n \frac{\alpha}{S} \sigma^2 - D_x \nabla_x \cdot (n \bar{u}_l) + 3n D_{u_l} \end{aligned} \quad (7.17)$$

In the case $\sigma^2 = 0$ and $D_x = D_{u_l} = 0$, we recover the equations used in the laminar case [LM01].

Remark 4 We can also remark that D_{u_l} introduces a source term in the σ^2 equation:

$$n \frac{\partial \sigma^2}{\partial t} + n \bar{u}_l \cdot \nabla_x \sigma^2 + n \frac{2}{3} \sigma^2 \nabla_x \cdot \bar{u}_l + R_S n \frac{\partial \sigma^2}{\partial S} = -2n \frac{\alpha}{S} \sigma^2 - D_x n \nabla_x \cdot \bar{u}_l + 3n D_{u_l}.$$

So, take $\sigma^2 = 0$ and $D_x \neq 0$ or $D_{u_l} \neq 0$ is incoherent.

In the case of very small droplets, D_x takes the following asymptotic expression:

$$D_x = \frac{2}{3} \kappa \tau_d \frac{\alpha}{S},$$

where κ is the turbulent kinetic energy, τ_d is the correlation time of the gas turbulence seen by the droplets along their trajectories and the 3 comes from the space dimension. The source term in the equation of momentum conservation then reads:

$$-\frac{\alpha}{S} \left(n \bar{u}_l - n \bar{u} + \frac{2}{3} \kappa \tau_d \nabla_x n \right).$$

So, taking the formal singular limit of small S , we obtain:

$$n \bar{u}_l \approx n \bar{u} - \frac{2}{3} \kappa \tau_d \nabla_x n,$$

and the mass conservation equation can be rewritten:

$$\frac{\partial n}{\partial t} + \nabla_x \cdot (n\bar{u}) - \frac{2}{3} \kappa \tau_d \Delta n + \frac{\partial R_S n}{\partial S} = 0. \quad (7.18)$$

We then have a spatial diffusion coupled to the vaporization, the constant κ being the turbulent kinetic energy of the gas.

If the averaged velocity of the droplets is equal to zero, the multi-fluid model corresponding to the kinetic model (7.18) reads

$$\frac{\partial n}{\partial t} - \zeta \Delta n + \frac{\partial R_S n}{\partial S} = 0, \quad (7.19)$$

with $\zeta = \frac{2}{3}\kappa \tau_d$. This equation is linear in n . So, multiplying (7.19) by $\frac{\rho_l}{6\sqrt{\pi}}S^{3/2}$ and integrating it between S_{i-1} and S_i , we obtain a multi-fluid model which is exactly the equation on μ_i in the system (\mathcal{S}_ζ). Thus, the diffusion process on the mass variables has a physical interpretation and it allows us to apply the topological degree theory to this elliptic system.

7.3 Topological degree

In order to prove the existence of traveling waves, the topological degree is a useful tool. It is defined as follow (see, e. g. [Bro86]): let E_1 and E_2 be two Banach spaces. Suppose we are given a class ϕ of operators acting from E_1 to E_2 and a class H of homotopies, i.e., maps $A_\tau(u) : E_1 \times [0, 1] \rightarrow E_2$, $\tau \in [0, 1]$, $u \in E_1$ such that for any $\tau \in [0, 1]$ fixed, $A_\tau(u) \in \phi$. Assume moreover that for any bounded open set $D \subset E_1$ and any operator $A \in \phi$ such that $A(u) \neq 0$ for $u \in \partial D$ (∂D denotes the boundary of the set D), there is an integer $\gamma(A, D)$ satisfying the following conditions:

1. *Homotopy invariance.* Let $A_\tau(u) \in H$ and $A_\tau(u) \neq 0$ for $u \in \partial D$ and $\tau \in [0, 1]$. Then, we have:

$$\gamma(A_0, D) = \gamma(A_1, D).$$

2. *Additivity.* Let $D \subset E_1$ be an arbitrary open set in E_1 , and $D_1, D_2 \subset D$ be open sets such that $D_1 \cap D_2 = \emptyset$. Suppose that $A \in \phi$ does not vanish for $u \in \bar{D} \setminus (D_1 \cup D_2)$. Then, we have:

$$\gamma(A, D) = \gamma(A, D_1) + \gamma(A, D_2).$$

3. *Normalization.* There exists a bounded linear operator $J : E_1 \rightarrow E_2$ with a bounded inverse defined on E_2 such that for any bounded open set $D \subset E_1$ with $0 \in D$, $\gamma(J, D) = 1$.

The integer $\gamma(A, D)$ is called the topological degree.

Since we consider a problem in unbounded domains, the Leray-Schauder theory [LS34] cannot be directly applied. However the topological degree theory for elliptic operators can be extended to unbounded domains [Dan75], [Dan77], [VV94], [VV89], [VVC99]. One of the approaches is based on the theory of Fredholm operators [Fen76], [Isn74], [Skr73]. Here, we use the topological degree constructed in [VVC99] for elliptic, Fredholm and proper operators in unbounded domain and weighted Hölder spaces. This theory directly applies when the domain is the whole real line.

The topological degree is useful in order to investigate the existence of solution because, for an operator $A \in \phi$ without zero at the boundaries of a bounded open set D , if the topological degree of (A, D) is not equal to zero, then the problem $Aw = 0$ admits a solution. Moreover, the topological degree can be directly calculated for simple operators: for example, if $A \in \phi$ admits only one zero w and if the linearized operator

$A'(w)$ has no zero eigenvalue, then, for a bounded open set D which contains w , the topological degree of (A, D) is 1 or -1. The invariance by homotopy allows us to evaluate the topological degree for more complex operators.

The aim of this section is not to describe the construction of the topological degree or to present the whole theory. For the sake of legibility, we only present the application of the theory to traveling wave systems.

7.3.1 General reaction-diffusion operator

We introduce weighted Hölder spaces $C_\mu^{j+\delta}(\mathbb{R}) = \{u : u\mu \in C^{j+\delta}(\mathbb{R})\}$. The topological degree is constructed [VVC99] in the weighted Hölder spaces, so that the operators are proper and, generically, it cannot be constructed in spaces without weight [BV99]. As a weight, we take a polynomial function $\mu(x) = 1 + x^2$. We note that functions exponentially decreasing at infinity belong to these spaces. The following type of reaction-diffusion operators:

$$Aw = aw'' + c(w)w' + F(w),$$

operate from $E_1 = C_\mu^{2+\delta}(\mathbb{R})$ onto $E_2 = C_\mu^\delta(\mathbb{R})$, where a is a diagonal matrix, with positive, constant terms on the diagonal and F vanishes at w^+ and w^- , with $w^+ \neq w^-$. The function w belongs to E , a set of functions u such that $u - (1 - \Phi)w^+ - \Phi w^- \in E_1$, where $\Phi(z)$ is a C^∞ function which is identically equal to 1 for $z \in]-\infty, 0]$ and identically equal to 0 for $z \in [1, +\infty[$. The functional $c(w)$, which replaces the wave velocity, is defined by:

$$c(w) = \ln \int_{\mathbb{R}} |w(x) - w^+|^2 \sigma(z) dz, \quad (7.20)$$

where σ is an increasing function on \mathbb{R} , of limit 0 at $-\infty$ and 1 at $+\infty$ and such that $\int_{-\infty}^0 \sigma(x) dx < \infty$. This functional is such that, if we note $w_h(z) = w(z + h)$, $c(w_h)$ is a decreasing bijection from \mathbb{R} to \mathbb{R} , as a function of h . It is also such that, for a solution w of $Aw = 0$: $\langle c'(w), w' \rangle \neq 0$. It was introduced in order to solve some problems due to the invariance by translation and zero eigenvalue problem [VVC99]. Suppose that we have the constant c and not the functional. If there exists a solution $w(z)$ of the problem $Aw = 0$ with $w \in E$, then the function $w_h(z) = w(z + h)$ is also a solution, for all $h \in \mathbb{R}$. The weighted norm $\|\mu(z)(w - (1 - \Phi)w^+ - \Phi w^-)\|$ tends to infinity as h tends to $\pm\infty$. Therefore, a bounded domain D in the set E does not contain any solution or the branch of solutions intersects its boundary. So, the degree cannot be used. Moreover, if w is a solution of $Aw = 0$, then zero is an eigenvalue of the linearized operator $A'(w)$ (with the eigenvector w') and it is not easy to evaluate the topological degree of A . The functionalization of the parameter c allows us to solve these problems. It also moves the zero eigenvalue of the linearized problem about a traveling wave to the left half-plane, and it singles out one particular element of the family of solutions [VVV94]. Moreover it eliminates the unknown constant from the problem.

Then, if the condition

$$(C) : \quad \forall \lambda \geq 0, \quad \forall \xi \in \mathbb{R}, \quad \det(-a\xi^2 + c(w) i \xi + F'(w^\pm) - \lambda I) \neq 0 \quad (7.21)$$

is realized, we can define the topological degree for the operator A .

7.3.2 Introduction of a perturbed system

The topological degree can not be defined for the operator corresponding to the system (\mathcal{S}_ζ) , (\mathcal{L}_N) . Indeed, this operator is not regular because the function $\tilde{R}_S(\theta, \alpha) = \varphi \ln(1 + \tilde{B}_M(\theta, \alpha))^+$ is not C^1 . Moreover

$$\begin{array}{c}
(\mathcal{S}_0) + (\mathcal{L}_0) \\
\kappa \theta'' + c \theta' + \tilde{k}(\theta) \alpha = 0, \\
D \alpha'' + c \alpha' - \tilde{k}(\theta) \alpha + S^m = 0, \\
c \partial_z \psi + \tilde{R}_S(\theta, \alpha) \partial_S \psi = 0, \quad S \geq 0. \\
\\
N \rightarrow \infty \quad \left\{ \begin{array}{l} \uparrow \\ \downarrow \end{array} \right. \text{discretization: Multi-fluid model} \\
\\
(\mathcal{S}_N) + (\mathcal{L}_N) \\
\kappa \theta'' + c \theta' + \tilde{k}(\theta) \alpha = 0, \\
D \alpha'' + c \alpha' - \tilde{k}(\theta) \alpha + \tilde{R}_S(\theta, \alpha) \sum M_i \mu_i = 0, \\
c \mu_i' - \tilde{R}_S(\theta, \alpha) [(M_i + F_i) \mu_i - F_{i+1} \mu_{i+1}] = 0. \\
\\
r \rightarrow 0 \quad \left\{ \begin{array}{l} \uparrow \\ \downarrow \end{array} \right. \text{addition of a diffusion (turbulent mixing)} \\
\epsilon \rightarrow 0 \quad \left\{ \begin{array}{l} \uparrow \\ \downarrow \end{array} \right. \text{and small parameters} \\
\zeta \rightarrow 0 \quad \left\{ \begin{array}{l} \uparrow \\ \downarrow \end{array} \right. \\
\\
(\mathcal{S}_{\zeta, \epsilon, r}) + (\mathcal{L}_N) \\
\kappa \theta'' + c \theta' + \tilde{k} \alpha + \epsilon \tilde{k} (1 - \theta - \alpha) = 0, \\
D \alpha'' + c \alpha' - \tilde{k} \alpha + R_r \sum M_i \mu_i = 0, \\
\zeta \mu_i'' + c \mu_i' - R_r [(M_i + F_i) \mu_i - F_{i+1} \mu_{i+1}] - \epsilon \tilde{k} \mu_i = 0, \\
\\
\left\{ \begin{array}{l} \uparrow \\ \downarrow \end{array} \right. \text{change of variables} \\
\quad \quad \quad w = (\zeta \theta, \zeta \alpha, \zeta \mu_1, \dots, \zeta \mu_N) \\
\left\{ \begin{array}{l} \uparrow \\ \downarrow \end{array} \right. \text{functionalization of c} \\
\\
(\mathcal{S}_{rd}) \quad \text{a topological degree can be defined and used}
\end{array}$$

Figure 7.4: Sketch of the proof.

the condition (C) is not valid, neither at $-\infty$, nor at $+\infty$. The system (\mathcal{S}_ζ) is then perturbed, so that the topological degree can be defined for the operator corresponding to the new system. First, we replace $\tilde{R}_S(\theta, \alpha)$ by $R_r(\theta, \alpha)$ such that:

$$R_r(\theta, \alpha) = \varphi \left(1 - \Phi \left(\frac{\tilde{B}_M(\theta, \alpha)}{r} \right) \right) \ln(1 + \tilde{B}_M(\theta, \alpha)),$$

where r is a small positive parameter with at least $r \leq 1$ and $\Phi(z)$ is a C^∞ function such that:

$$\begin{cases} \text{for } z \leq 0 & \Phi(z) = 1, \\ \text{for } 0 < z < 1 & \Phi'(z) < 0, \\ \text{for } z \geq 1 & \Phi(z) = 0. \end{cases} \quad (7.22)$$

The function R_r tends to \tilde{R}_S when r tends to zero and we then denote $R_0 = \tilde{R}_S$. Second, we add a small positive parameter ϵ and introduce the perturbed system:

$$(\mathcal{S}_{\zeta, \epsilon, r}) \quad \begin{cases} \kappa \theta'' + c \theta' + \tilde{k}(\theta) \alpha & + \epsilon \tilde{k}(\theta) (1 - \theta - \alpha) = 0, \\ D \alpha'' + c \alpha' - \tilde{k}(\theta) \alpha + R_r(\theta, \alpha) \sum M_i \mu_i & = 0, \\ \zeta \mu_i'' + c \mu_i' & - R_r(\theta, \alpha) [(M_i + F_i) \mu_i - F_{i+1} \mu_{i+1}] - \epsilon \tilde{k}(\theta) \mu_i = 0, \end{cases}$$

with the boundary conditions (\mathcal{L}_N). After a change of variable which will be defined later, and the functionalization (7.20) of c , we can define and use the topological degree for the corresponding operator.

Contrary to what was made in preceding studies, as in [VVV94], the added terms are defined from functions already existing in the initial system (\mathcal{S}_0), as in [LMV02]. It allows us to preserve the monotonicity of variables, as it will be shown in the next section. Moreover, it makes simpler the homotopies which transform the system to one for which the topological degree can be evaluated.

As shown in Fig. 7.4, the sketch of the existence proof is as follows: we use the topological degree in order to prove the existence of solutions for ($\mathcal{S}_{\zeta, \epsilon, r}$) (Section 7.5) and we take the limits $r \rightarrow 0$, $\epsilon \rightarrow 0$ and $\zeta \rightarrow 0$ in order to prove existence of solutions for (\mathcal{S}_N) (Section 7.6). These steps require a priori estimates, independent of the homotopy parameter τ for the first step and independent of r , ϵ and ζ for the second step. These estimates have a common part. Consequently, we begin with general estimates (Section 7.4), independent of all parameters τ , r , ϵ and ζ .

7.4 A priori estimates

Here, we give a priori estimates independent of all the parameters r , ϵ and ζ and also of the homotopy parameter τ which will be introduced in the Section 7.5. We then consider the following system:

$$(\mathcal{S}_{\zeta, \epsilon, r, \tau}) \quad \begin{cases} \kappa \theta'' + c \theta' + \tilde{k} \alpha & + \epsilon \tilde{k} (1 - \theta - \alpha) = 0, \\ D \alpha'' + c \alpha' - \tilde{k} \alpha + (1 - \tau) R_r \sum M_i \mu_i & = 0, \\ \zeta \mu_i'' + c \mu_i' & - (1 - \tau) R_r [(M_i + F_i) \mu_i - F_{i+1} \mu_{i+1}] - \epsilon \tilde{k} \mu_i = 0, \end{cases}$$

with the boundary conditions (\mathcal{L}_N), with $0 \leq \tau \leq 1$, with a small non negative parameter ϵ , with a small positive parameter ζ and with a Lewis number $\text{Le} = \kappa/D$ larger than $1 + p$, where p is a non negative real

and will be defined later, in order to prevent the condensation phenomena. Estimates given in this Section are general enough, so that they are used to have a priori estimates in the weighted Hölder space $C_{\mu}^{2+\delta}(\mathbb{R})$ independent of τ in order to prove existence of solution of system $(\mathcal{S}_{\zeta, \epsilon, r})$ in Section 7.5 and to have a priori estimates in the Hölder space $C^{2+\delta}(\mathbb{R})$ independent of r , ϵ and ζ (or of ϵ and ζ for $r = 0$) in order to pass to the limits $r \rightarrow 0$, $\epsilon \rightarrow 0$ and $\zeta \rightarrow 0$ in Section 7.6.

7.4.1 Preliminary lemmas

To prove monotonicity of functions or to determine a priori estimates, we use properties of differential equations given by the two following lemmas:

Lemma 7.1 *Let I be the interval $] - \infty, b]$ or $] - \infty, b[$. Let u be a function in $C^{1+\delta}(\mathbb{R})$ and a a positive constant. If $u'(z) + a u(z)$ is non negative for $z \in I$ then $u(z)$ is non negative for $z \in I$. If, moreover, $u'(z) + a u(z)$ is positive for $z \in] - \infty, x_0[$ with $x_0 \in I$, then $u(z)$ is positive for $z \in I$.*

Proof. – We introduce the function $\Gamma(z) = u(z) \exp(a z)$ defined for $z \in I$. This function is C^1 with zero limit at $-\infty$ and $\Gamma'(z) = [u'(z) + a u(z)] \exp(a z)$. Studying the variations of Γ , we prove the lemma. \square

Lemma 7.2 *Let a be a positive number, $g(z)$ a non negative continuous function defined for $z \in \mathbb{R}$ and $F(z, v)$ a continuous function defined for $(z, v) \in \mathbb{R}^2$. The function F is assumed to be of the same sign as v and such that:*

$$\forall v \geq 0 \quad \forall z \in \mathbb{R} \quad F(z, v) \leq f(z) v,$$

where $f(z)$ is a non negative continuous function. Let u be a function in $C^{2+\delta}(\mathbb{R})$ with non negative limits u^{\pm} at $\pm\infty$ and solution of the equation:

$$\forall z \in \mathbb{R} \quad u''(z) + a u'(z) - F(z, u(z)) + g(z) = 0. \quad (7.23)$$

We make one of these assumptions:

1. g is the null function and u^+ or u^- is not equal to zero.
2. g is not the null function.

Then u is positive.

Proof. – First, we show that u is non negative. If it is not true, then u reaches its negative minimum in a real z_m . So, in this point, we have:

$$u''(z_m) = F(z_m, u(z_m)) - g(z_m), \quad u''(z_m) \geq 0, \quad u(z_m) < 0.$$

Then $u''(z_m)$ is equal to zero. Let us suppose that z_m is the biggest real for which u reaches its minimum. Then, for a small positive real b and for $z \in]z_m, z_m + b]$, $u(z)$ is negative and $u'(z)$ is positive. So, because of the equation (7.23), $u''(z)$ is negative and then $u'(z)$ is a decreasing function for $z \in]z_m, z_m + b]$. But it is inconsistent with the inequality $u'(z_m) = 0 < u'(z_m + b)$ and u is necessarily non negative.

We can apply the maximum principle to u because this function satisfies the inequality:

$$u''(z) + a u'(z) - f(z) u(z) + g(z) = F(z, u(z)) - f(z) u(z) \leq 0.$$

If u vanishes in a point, then u is identically equal to 0 and g is the null function. It is inconsistent with the assumptions and the lemma is proved. \square

7.4.2 Monotonicity

First, we give monotonicity properties of solutions of $(\mathcal{S}_{\zeta, \epsilon, r, \tau})$. Let introduce the variable $S_{\theta\alpha}$, the partial sums S_i and their limits S_i^∞ at $+\infty$:

$$S_{\theta\alpha} = \frac{\kappa}{D(1-\epsilon)}(1-\theta) - \alpha, \quad S_i = \sum_{j=i}^N \mu_j, \quad S_i^\infty = \sum_{j=i}^N \mu_j^\infty.$$

We also introduce the number p defined by:

$$p = \max \left\{ \begin{array}{l} \frac{\theta \tilde{Y}_{F_s}''(\theta)}{\tilde{Y}_{F_s}'(\theta)}, \quad 0 \leq \theta \leq \theta_{eb} - \frac{\nu}{T_* - T_0} \\ 0 \end{array} \right\} \quad \text{if } \theta_{eb} > \frac{\nu}{T_* - T_0}$$

$$p = 0 \quad \text{if } \theta_{eb} \leq \frac{\nu}{T_* - T_0}.$$

First, we give result of monotonicity for some variables:

Proposition 7.3 *If, for $\tau \in [0, 1]$, $r \in [0, 1]$, $\epsilon \geq 0$ and $0 < \zeta < D \leq \kappa$, such that and $\epsilon(1-\tau) \neq 0$, there exists a scalar c and functions θ , α and μ_i in $C^{2+\delta}(\mathbb{R})$ solution of $(\mathcal{S}_{\zeta, \epsilon, r, \tau})$, then:*

$$c > 0, \quad 0 < \alpha < 1, \quad \forall i \quad \mu_i > 0, \quad \forall i \quad S_i' > 0, \quad \theta' < 0, \quad S_{\theta\alpha}' > 0.$$

Moreover, if $D \leq \frac{\kappa}{1+p}$ then $\tilde{B}_M(\theta, \alpha) > 0$.

Proof. – Let us first prove that c is positive. Because θ_c is positive, there exists a real z_c such that for $z \geq z_c$, $\theta(z)$ is smaller than θ_c . Then the equation on θ' can be solved for $z \geq z_c$: $\theta'(z) = \theta'(z_c) \exp(-c(z-z_c)/k)$. But this function tends to zero when z tends to $+\infty$ and because of the uniqueness for the corresponding Cauchy problem, we have $\theta'(z_c) \neq 0$. Then c is positive. Because of the invariance by translation, we can assume without loss of generality that $\theta(0) = \theta_c$ and:

$$\forall z \geq 0, \quad \theta(z) = \theta_c \exp\left(-\frac{c}{\kappa}z\right). \quad (7.24)$$

We now prove that the μ_i are positive. The function $R_r(\theta(z), \alpha(z))$ of z is continuous and tends to $\phi \ln(1/\delta) > 0$ as z tends to $-\infty$. We can apply Lemma 7.2, first for μ_N , then for μ_{N-1} , down to μ_1 . It proves that the μ_i are positive.

Then, we prove that S_i is an increasing function. This function satisfies the following equation:

$$\zeta S_i'' + c S_i' = (1-\tau)R_r(\theta, \alpha) \sum_{j=i}^N M_j \mu_j + (1-\tau)R_r(\theta, \alpha) F_i \mu_i + \epsilon \tilde{k}(\theta) S_i.$$

Consequently, the quantity $\zeta S_i'' + c S_i'$ is nonnegative and also positive for sufficiently small z , where $R_r(\theta(z), \alpha(z))$ and $\tilde{k}(\theta(z))$ are positive. Making use of Lemma 7.1, we obtain that S_i' is positive.

Applying Lemma 7.2 to α , we show that α is positive. We now prove that $1 - \alpha - \zeta/D S_1$ is non negative. This function is denoted u . The equations on α and μ_i of $(\mathcal{S}_{\zeta, \epsilon, r, \tau})$ are integrated between z and $+\infty$ and added. We obtain, for all $z \in \mathbb{R}$:

$$D u'(z) + c u(z) = \int_z^{+\infty} \tilde{k}(\theta(x)) [\alpha(x) + \epsilon S_1(x)] dx + c \left(1 - \frac{\zeta}{D}\right) S_1(z) \leq 0.$$

Lemma 7.1 then shows that u is non negative. So, we have the inequality:

$$\alpha \leq 1 - \frac{\zeta}{D} S_1 < 1.$$

Let us then show that θ is a decreasing function, smaller than 1: $\theta' \leq 0$ and $\theta \leq 1$. If there exists a real z_o such that $\theta'(z_o) > 0$ and $\theta(z_o) \leq 1$, then we have $\theta''(z_o) < 0$ because of the first equation of $(\mathcal{S}_{\zeta, \epsilon, r, \tau})$. So θ' is decreasing around z_o . It is then easy to see that $\theta'(z)$ is decreasing and positive and $\theta(z)$ is increasing and smaller than 1 for $z \leq z_o$. It is inconsistent with the limit of θ at $-\infty$. So, if $\theta(z)$ is smaller or equal to 1 then it is decreasing. We also have to get rid of the case:

$$\begin{aligned} \theta(z) &> 1 && \text{for } z < z_o, \\ \theta(z) &\leq 1, \quad \theta'(z) \leq 0 && \text{for } z \geq z_o. \end{aligned}$$

In such a case, we denote ψ the function $\theta + \alpha + \sum \mu_i - 1$. This function $\psi(z)$ is positive for $z \leq z_o$ and its sign is not constant because of the equality $\int_{\mathbb{R}} \tilde{k}(\theta(x)) \psi(x) dx = 0$, obtained through the integration on \mathbb{R} and the sum of the equations of $(\mathcal{S}_{\zeta, \epsilon, r, \tau})$. So, we can introduce the first point a where ψ vanishes. The system $(\mathcal{S}_{\zeta, \epsilon, r, \tau})$ is integrated between $-\infty$ and a and we sum all equations, thus giving:

$$D \psi'(a) + c \psi(a) = \epsilon \int_{-\infty}^a \tilde{k}(\theta(x)) \psi(x) dx - (\kappa - D) \theta'(a) + (D - \zeta) S_1'(a) > 0.$$

Since $\psi(a) = 0$, we obtain $\psi'(a) > 0$. But $\psi(z)$ is positive for $z < a$ and vanishes for $z = a$. The assumption made was then false and θ is decreasing.

We then prove that θ is strictly decreasing. Indeed if $\theta'(z)$ vanishes, then $\theta''(z)$ is equal to zero. Because of the first equation of $(\mathcal{S}_{\zeta, \epsilon, r, \tau})$ and because of the preceding results, we necessarily have $\theta(z) \leq \theta_c$ and $z \leq 0$. It is inconsistent with the equation (7.24). So, θ' is negative.

Multiplying the first equation of $(\mathcal{S}_{\zeta, \epsilon, r, \tau})$ by $1/(1 - \epsilon)$ and adding the second equation, we obtain the equation for $S_{\theta\alpha}$:

$$D S_{\theta\alpha}'' + c S_{\theta\alpha}' = -\frac{c}{1 - \epsilon} \theta' \left(\frac{\kappa}{D} - 1 \right) + \frac{\epsilon}{1 - \epsilon} \tilde{k}(\theta) (1 - \theta) + (1 - \tau) R_r(\theta, \alpha) \sum M_i \mu_i.$$

So, the quantity $D S_{\theta\alpha}''(z) + c S_{\theta\alpha}'(z)$ is non negative and positive for $z < 0$. Applying Lemma 7.2, we obtain $S_{\theta\alpha}' > 0$.

Let note $y(z) = \tilde{Y}_{Fs}(\theta(z)) - (1 - \omega)\alpha(z)$. We want to prove that this function is positive if $D \leq \frac{\kappa}{1 + p}$.

It satisfies the equation:

$$D y''(z) + c y'(z) - F(z, y(z)) + g(z) = 0,$$

with

$$\begin{aligned} F(z, v) &= \left(1 + \frac{D(1 - \epsilon)}{\kappa(1 - \omega)} \tilde{Y}'_{Fs}(\theta(z)) \right) \tilde{k}(\theta(z)) v \\ &+ (1 - \tau)(1 - \omega) \varphi \ln \left(1 + \frac{v}{1 - \tilde{Y}_{Fs}(\theta(z))} \right) \left(1 - \Phi \left(\frac{v}{r(1 - \tilde{Y}_{Fs}(\theta(z)))} \right) \right) \sum_{i=1}^N M_i \mu_i(z), \end{aligned}$$

and

$$\begin{aligned} g(z) &= -\theta'(z) \left[D \theta'(z) \tilde{Y}''_{Fs}(\theta(z)) + c \left(1 - \frac{D}{\kappa} \right) \tilde{Y}'_{Fs}(\theta(z)) \right] \\ &+ \tilde{k}(\theta(z)) \left[\tilde{Y}_{Fs}(\theta(z)) \left(1 + \frac{(1 - \epsilon)D}{(1 - \omega)\kappa} \tilde{Y}'_{Fs}(\theta(z)) \right) + \epsilon \frac{D}{\kappa} (1 - \theta(z)) \tilde{Y}'_{Fs}(\theta(z)) \right]. \end{aligned}$$

An integration of the θ equation between z and $+\infty$ shows that $\kappa\theta' + c\theta \geq 0$. We can then give a lower bound for g , independent of c :

$$g(z) \geq \theta'(z)^2 \left[\frac{\kappa - D}{\theta(z)} \tilde{Y}'_{F_s}(\theta(z)) - D\tilde{Y}''_{F_s}(\theta(z)) \right] + \tilde{k}(\theta(z))\tilde{Y}_{F_s}(\theta(z)).$$

For $D \leq \frac{\kappa}{1+p}$, the g function is non negative and is not the zero function since $g \geq \tilde{k}(\theta)\tilde{Y}_{F_s}(\theta)$. We then can apply Lemma 7.2 which show that y is positive. Consequently, the proposition is proved. \square

7.4.3 General estimates

From this subsection, α^∞ is supposed to be greater than θ_c and we introduce a real, $\beta \in]0, 1[$, such that

$$\theta_c < \beta\alpha^\infty < \alpha^\infty. \quad (7.25)$$

This assumption is not very restrictive because θ_c can be chosen as small as we want and $\alpha^\infty > 0$. Estimates independent of r, ζ, ϵ and τ , and also inequalities, useful for Section 7.6, are given in the following theorem:

Theorem 7.4 For $0 \leq r \leq 1$, $0 < \zeta < D \leq \frac{\kappa}{1+p}$, $0 \leq \epsilon \leq 1 - \beta$ and $0 \leq \tau \leq 1$ such that $\epsilon(1 - \tau) \neq 0$, there exists constants $M > 0$, $c_a^- > 0$ and c^+ independent of r, ζ, ϵ and τ and $M_\zeta > 0$ independent of r, ϵ and τ such that, if there exists a scalar c and functions θ, α and μ_i in $C^{2+\delta}(\mathbb{R})$ solution of $(\mathcal{S}_{\zeta, \epsilon, r, \tau})$ then:

$$\|\theta\|_{C^{2+\delta}(\mathbb{R})} \leq M_\zeta, \quad \|\alpha\|_{C^{2+\delta}(\mathbb{R})} \leq M_\zeta \quad \|\mu_i\|_{C^{2+\delta}(\mathbb{R})} \leq M_\zeta \quad c_a^- \leq c \leq c^+,$$

and, for $r = 0$:

$$\|\theta\|_{C^{2+\delta}(\mathbb{R})} \leq M, \quad \|\alpha\|_{C^{2+\delta}(\mathbb{R})} \leq M \quad \|\mu_i\|_{C^{2+\delta}(\mathbb{R})} \leq M.$$

If we choose $\theta(0) = \theta_c$, we also have the inequalities:

$$(1 - \epsilon)(\alpha^\infty - \alpha) \leq \theta, \quad (7.26)$$

$$\forall i \in \{1, \dots, N\}, \quad \sum_{j=i}^N \prod_{k=j+1}^N \left(1 + \frac{F_k}{M_k}\right) (\mu_j^\infty - \mu_j) \geq 0, \quad (7.27)$$

$$\forall z \in \mathbb{R}^+, \quad \forall i \in \{1, \dots, N\}, \quad 0 \leq S_i^\infty - S_i \leq \left(1 + \frac{F_i}{M_i}\right) (\theta(z) - \alpha^\infty + \alpha(z)), \quad (7.28)$$

$$\forall z \in \mathbb{R}^+, \quad \theta(z) + \alpha(z) + S_1(z) \geq 1. \quad (7.29)$$

Proof. – We already know, because of Proposition (7.3), that c is positive, θ and $\sum \mu_i$ are monotone and α and all the μ_i are positive and bounded.

We now give an estimate for θ' , distinguishing two cases: $c \geq 1$ and $c < 1$. If c is bigger than 1, then $\theta'(z)$ reaches its minimum at $z = z_m$ and for all $z \in \mathbb{R}$, we have:

$$|\theta'(z)| \leq |\theta'(z_m)| = \left| -\frac{1 - \epsilon}{c} \tilde{k}(\theta(z_m))\alpha(z_m) - \frac{\epsilon}{c} \tilde{k}(\theta(z_m))[1 - \theta(z_m)] \right| \leq \tilde{k}(1).$$

Thus, this involves that $|\theta'|$ is smaller than $\tilde{k}(1)$.

If c is smaller than 1, suppose that $\theta'(z) > \tilde{k}(1)$, for a $z \in \mathbb{R}$. We define z_o as the biggest real, smaller than

z and such that $|\theta'(z_o)| = \tilde{k}(1)$. So, for $x \in [z_o, z]$, $|\theta'(x)|$ is bigger than $\tilde{k}(\theta(x))$. The first equation of $(\mathcal{S}_{\zeta, \epsilon, r, \tau})$ is then integrated between z_o and z :

$$|\theta'(z)| = \left| \theta'(z_o) - \frac{c}{\kappa}[\theta(z) - \theta(z_o)] - \frac{1-\epsilon}{\kappa} \int_{z_o}^z \tilde{k}(\theta(y))\alpha(y)dy - \frac{\epsilon}{\kappa} \int_{z_o}^z \tilde{k}(\theta(y))(1-\theta(y))dy \right|. \quad (7.30)$$

The term $|\theta'(z_o)|$ is upperly bounded by $\tilde{k}(1)$, c by 1, $|\theta(z) - \theta(z_o)|$ by 1, $|\alpha(y)|$ by 1 and $\tilde{k}(\theta(y))$ by $|\theta'(y)|$. Then, in all the cases, $|\theta'|$ is upperly bounded by $\tilde{k}(1) + \frac{2}{\kappa}$.

As in the proof of Proposition 7.3, we choose $\theta(0) = \theta_c$. Then c can be evaluated from $\theta'(0)$:

$$c = \frac{-\theta'(0)}{\theta_c}.$$

With what precedes, we have the upper bound for the wave velocity:

$$c \leq c^+ = \frac{\kappa\tilde{k}(1) + 2}{\theta_c}. \quad (7.31)$$

In order to have a lower bound for c , we first show the inequality $\theta + (1-\epsilon)\alpha \geq (1-\epsilon)\alpha^\infty$. The first equation of $(\mathcal{S}_{\zeta, \epsilon, r, \tau})$ and the second multiplied by $1-\epsilon$ are integrated between z and $+\infty$ and added. With $u = \theta + (1-\epsilon)(\alpha - \alpha^\infty)$, we obtain:

$$D u' + c u \geq -(\kappa - D)\theta' \geq 0.$$

Because of Lemma 7.1, u is necessarily non negative and $\theta + (1-\epsilon)\alpha \geq (1-\epsilon)\alpha^\infty$. So:

$$(1-\epsilon)\alpha \geq [(1-\epsilon)\alpha^\infty - \theta]^+.$$

The first equation of $(\mathcal{S}_{\zeta, \epsilon, r, \tau})$ is then multiplied by θ' and integrated on \mathbb{R} . With the preceding inequality, we obtain:

$$\begin{aligned} c \int_{\mathbb{R}} (\theta'(x))^2 dx &\geq - \int_{\mathbb{R}} \tilde{k}(\theta(x))[(1-\epsilon)\alpha^\infty - \theta(x)]^+ \theta'(x) dx - \epsilon \int_{\mathbb{R}} \tilde{k}(\theta(x))(1-\theta(x))\theta'(x) dx, \\ &\geq \int_0^{(1-\epsilon)\alpha^\infty} \tilde{k}(y)[(1-\epsilon)\alpha^\infty - y] dy + \epsilon \int_0^1 \tilde{k}(y)(1-y) dy. \end{aligned}$$

With the assumption (7.25) and the estimates of θ' , we find the lower bound for c :

$$c \geq c_a^- = \frac{\kappa}{2 + \kappa\tilde{k}(1)} \int_{\theta_c}^{\beta\alpha^\infty} \tilde{k}(y)[\beta\alpha^\infty - y] dy > 0. \quad (7.32)$$

In order to have estimates in $C^{2+\delta}(\mathbb{R})$, we can give here estimates in $C^3(\mathbb{R})$, because the solutions in $C^{2+\delta}(\mathbb{R})$ of $(\mathcal{S}_{r, \epsilon, \zeta, \tau})$ are necessarily regular. With the lower bound of c and bounds of θ , θ' , α and μ_i , it is then easy to prove that α' , μ_i' , α'' , θ'' and θ''' are bounded independently of r , ζ , ϵ and τ . We also prove that μ_i'' has bounds independent of r , ϵ and τ , but dependent of ζ . For $r > 0$, we have to derive the equations on α and μ_i and to give a bound, independent of r , ϵ and τ of the $R_r(\theta(z), \alpha(z))$ derivative in order to have estimates of α''' and μ_i''' . This function can be rewritten:

$$R_r(\theta(z), \alpha(z)) = \varphi\psi_r(\tilde{B}_M(\theta(z), \alpha(z))), \quad \psi_r(x) = \left(1 - \Phi\left(\frac{x}{r}\right)\right) \ln(1+x).$$

But $\tilde{B}_M(\theta(z), \alpha(z))$ is positive and smaller than $1 + \frac{1}{\delta}$ and its derivative is bounded independently of all parameters. Moreover, $\psi'_r(x)$ is bounded independently of r for $x \in [0, 1 + \frac{1}{\delta}]$:

$$\begin{aligned} 0 \leq \psi'_r(x) &= \frac{1 - \Phi\left(\frac{x}{r}\right)}{1+x} - \frac{x}{r} \Phi'\left(\frac{x}{r}\right) \frac{\ln(1+x)}{x} \\ &\leq 1 + \max\left\{y \Phi'(y), y \in [0, 1]\right\} \times \max\left\{\frac{\ln(1+x)}{x}, x \in \left]0, 1 + \frac{1}{\delta}\right]\right\}. \end{aligned}$$

It allows us to prove the first estimates of the theorem.

For $r = 0$, because $\tilde{B}_M > 0$, the function $R_0(\theta(z), \alpha(z))$ is regular for $z \in \mathbb{R}$ and it is easy to prove that $\alpha''', \mu_i'', \mu_i'''$ are bounded independently of ζ, ϵ and τ (for μ_i'', μ_i''' , we use the first and second derivative of the μ_i equation and we evaluate the maximum and the minimum of these functions), thus showing the second estimates of the theorem.

The inequality (7.27) is proved thanks to Lemma 7.1. Indeed, let us denote

$$u = \sum_{j=i}^N \prod_{k=j+1}^N \left(1 + \frac{F_k}{M_k}\right) (\mu_j^\infty - \mu_j).$$

Multiplying the equations on the μ_i of $(\mathcal{S}_{\zeta, \epsilon, r, \tau})$ for the index i to N by $\prod_{k=j+1}^N \left(1 + \frac{F_k}{M_k}\right)$, and integrating there sum between z and $+\infty$, the equation on u appears:

$$\zeta u'(z) + c(u(+\infty) - u(z)) = (M_i + F_i) \prod_{k=1}^N \left(1 + \frac{F_k}{M_k}\right) (1 - \tau) \int_z^{+\infty} R_r(\theta(y), \alpha(y)) \mu_i(y) dy \geq 0$$

and the inequality is shown.

Let us then show inequality (7.28). Let us denote $v(z)$ the function defined by:

$$v(z) = \frac{M_i}{F_i + M_i} (S_i^\infty - S_i(z)) + \alpha^\infty - \alpha(z) - \theta(z).$$

We then multiply by $\frac{M_i}{F_i + M_i}$ the equations on μ_i in $(\mathcal{S}_{\zeta, \epsilon, r, \tau})$ for the index i to N , integrate these equations as well as first and second equations of $(\mathcal{S}_{\zeta, \epsilon, r, \tau})$ between z and $+\infty$, and sum up all these equations. We finally get the following equation for v :

$$\begin{aligned} D v'(z) + c v(z) + \epsilon \int_z^{+\infty} \tilde{k}(\theta(y)) v(y) dy &= (\kappa - D) \theta'(z) + (\zeta - D) \frac{M_i}{F_i + M_i} S_i'(z) \\ &- \left[\frac{F_i}{F_i + M_i} S_i^\infty + \sum_{k=1}^{i-1} \mu_k^\infty \right] \epsilon \int_z^{+\infty} \tilde{k}(\theta(y)) dy \\ &- (1 - \tau) \int_z^{+\infty} R_r(\theta(y), \alpha(y)) \left[\sum_{k=1}^{i-1} M_k \mu_k(y) + \sum_{k=i+1}^N \frac{F_i}{F_i + M_i} M_k \mu_k(y) \right] dy. \end{aligned}$$

Because θ and S_i are decreasing and because of the inequality $\zeta \leq D \leq \kappa$, the function defined by the left hand side of the preceding equation is then non positive. If $v(0)$ is positive, then $v'(0)$ is negative, and

necessarily, $v(z)$ is positive and decreasing for $z \leq 0$. It is impossible because v has a non positive limit at $-\infty$. So, $v(0)$ is non positive, and for $z \geq 0$, we have $Dv'(z) + cv(z) \leq 0$. As for Lemma 7.1, introducing the function $\Gamma(z) = u(z) \exp(az)$, we prove that $v(z) \leq 0$ for $z \geq 0$ and inequality (7.28) is proved.

Let us now turn to inequality (7.29). We note $w = 1 - \theta - \alpha - S_1$. Integrating the equations of $(\mathcal{S}_{\zeta, \epsilon, r, \tau})$ between z and $+\infty$, and adding, the equation on w yields:

$$Dw'(z) + cw(z) + \epsilon \int_z^{+\infty} \tilde{k}(\theta(y)) w(y) dy = (\kappa - D)\theta'(z) - (D - \zeta)S_1'(z) \leq 0.$$

As for v , we then prove that $w(z) \leq 0$ for $z \geq 0$. The theorem is then proved. \square

7.4.4 Behavior of solutions at infinity

We have suggested in the section 7.3, that a change of variables will be done in order to be able to define the topological degree. This change of variable is defined in the subsection 7.5.3. But for that, we have to show that the functions θ , α and μ_i , solutions of $(\mathcal{S}_{\zeta, \epsilon, r, \tau})$ are exponentially decreasing; this behavior is characterized in the following Proposition:

Proposition 7.5 *If the scalar c and the functions θ , α and μ_i in $C^{2+\delta}(\mathbb{R})$ are solution of $(\mathcal{S}_{\zeta, \epsilon, r, \tau})$, then, for z greater than $z_c = \theta^{-1}(\theta_c)$, we have:*

$$\theta(z) \leq \theta_c \exp\left(-\frac{c_a^-}{\kappa}(z - z_c)\right), \quad |\alpha^\infty - \alpha(z)| \leq \max\left\{\frac{1}{1-\epsilon}, \mathcal{N}\right\} \theta_c \exp\left(-\frac{c_a^-}{\kappa}(z - z_c)\right),$$

$$\forall i \in \{1, \dots, N\}, \quad 0 \leq S_i^\infty - S_i(z) \leq (1 + \mathcal{N}) \left(1 + \frac{F_i}{M_i}\right) \theta_c \exp\left(-\frac{c_a^-}{\kappa}(z - z_c)\right),$$

$$\forall i \in \{1, \dots, N-1\}, \quad |\mu_i^\infty - \mu_i(z)| \leq (2 + \frac{F_i}{M_i} + \frac{F_{i+1}}{M_{i+1}})(1 + \mathcal{N}) \theta_c \exp\left(-\frac{c_a^-}{\kappa}(z - z_c)\right),$$

with $\mathcal{N} = \sup_{x \in [0, 1]} \tilde{Y}_{Fs}(x)$.

Proof. – We have already remarked that, for $z \geq z_c$, $\theta(z) = \theta_c \exp(-c(z - z_c)/\kappa)$ and the first inequality is proved, thanks to Theorem 7.4.

Theorem 7.4 also gives the result: $(1 - \epsilon)(\alpha^\infty - \alpha) \leq \theta$. Because of Proposition 7.3, we have: $\alpha - \alpha^\infty \leq \tilde{Y}_{Fs}(\theta) - \tilde{Y}_{Fs}(0) \leq \mathcal{N}\theta$. The second inequality is then proved.

The third inequality is easy to prove from (7.28) and the last inequality is due to $\mu_i = S_i - S_{i+1}$. \square

7.5 Existence result for the system $(\mathcal{S}_{\zeta, \epsilon, r})$

In this section, the parameters ζ , ϵ and r are supposed fixed such that:

$$0 < \zeta < D \leq \frac{\kappa}{1+p}, \quad 0 < \epsilon \leq 1 - \beta, \quad 0 < r \leq 1.$$

Moreover, we denote Φ , a C^∞ function with the property (7.22), and E , the space:

$$E = \left\{ v, \quad \Phi - v \in C_\mu^{2+\delta}(\mathbb{R}) \right\}.$$

We then want to prove the existence of a solution of the system $(\mathcal{S}_{\zeta, \epsilon, \tau})$. For that, we evaluate the topological degree of the corresponding operator of this system, using two continuous transformations, leading us to a simpler system. The first transformation is defined by the operator A_τ :

$$A_\tau \begin{pmatrix} \theta \\ \alpha \\ \mu_1 \\ \vdots \\ \mu_N \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \kappa \theta'' \\ D \alpha'' \\ \zeta \mu_1'' \\ \vdots \\ \zeta \mu_N'' \end{pmatrix} + c \begin{pmatrix} \theta' \\ \alpha' \\ \mu_1' \\ \vdots \\ \mu_N' \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} \tilde{k}(\theta) \alpha + \epsilon \tilde{k}(\theta)(1 - \theta - \alpha) \\ -\tilde{k}(\theta) \alpha + (1 - \tau)R_r(\theta, \alpha) \sum M_i \mu_i \\ -(1 - \tau)R_r(\theta, \alpha)[(M_1 + F_1) \mu_1 - F_2 \mu_2] - \epsilon \tilde{k}(\theta) \mu_1 \\ \vdots \\ -(1 - \tau)R_r(\theta, \alpha)(M_N + F_N) \mu_N - \epsilon \tilde{k}(\theta) \mu_N \end{pmatrix}. \quad (7.33)$$

The second transformation is defined by the operator B_τ :

$$B_\tau \begin{pmatrix} \theta \\ \alpha \\ \mu_1 \\ \vdots \\ \mu_N \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \kappa \theta'' \\ D_\tau \alpha'' \\ \zeta_\tau \mu_1'' \\ \vdots \\ \zeta_\tau \mu_N'' \end{pmatrix} + c \begin{pmatrix} \theta' \\ \alpha' \\ \mu_1' \\ \vdots \\ \mu_N' \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} \tilde{k}(\theta) \alpha + \epsilon_\tau \tilde{k}(\theta)(1 - \theta - \alpha) \\ -\tilde{k}(\theta) \alpha \\ -\epsilon_\tau \tilde{k}(\theta) \mu_1 \\ \vdots \\ -\epsilon_\tau \tilde{k}(\theta) \mu_N \end{pmatrix}, \quad (7.34)$$

with $\epsilon_\tau = \tau + (1 - \tau)\epsilon$, $D_\tau = \kappa\tau + (1 - \tau)D$ and $\zeta_\tau = \kappa\tau + (1 - \tau)\zeta$.

The system $(\mathcal{S}_{\zeta, \epsilon, \tau})$ is then $A_0 w = 0$. First, we see that these transformations yield to a simpler system $B_1 w = 0$, for which the existence and the uniqueness of solutions have already been proved. We then show how to define and use the topological degree. Finally, we give estimates in the weighted Hölder space which allow us to prove the existence of solutions for $(\mathcal{S}_{\zeta, \epsilon, \tau})$.

7.5.1 Existence and uniqueness for the transformed system

Let us begin with an investigation of system $B_1 w = 0$:

Proposition 7.6 *Up to a translation, there exists only one solution c, θ, α, μ_i of the system:*

$$\begin{cases} \kappa \theta'' + c \theta' + \tilde{k}(\theta)(1 - \theta) = 0, \\ \kappa \alpha'' + c \alpha' - \tilde{k}(\theta) \alpha = 0, \\ \kappa \mu_i'' + c \mu_i' - \tilde{k}(\theta) \mu_i = 0, \end{cases} \quad (7.35)$$

such that $\theta, (\alpha^\infty - \alpha)/\alpha^\infty$ and $(\mu_i^\infty - \mu_i)/\mu_i^\infty$ are in E .

Proof. – The proof comes from the existence and the uniqueness, up to a translation, of the solution $c \in \mathbb{R}$ and $\theta \in E$ of:

$$\kappa \theta'' + c \theta' + \tilde{k}(\theta)(1 - \theta) = 0. \quad (7.36)$$

The unique solution of (7.35) is then $c, \theta, \alpha = \alpha^\infty(1 - \theta), \mu_i = \mu_i^\infty(1 - \theta)$. \square

7.5.2 Estimates in the Hölder space

Estimates independent of τ are given by Theorem 7.4 for solutions of $A_\tau(\theta, \alpha, \mu) = 0$ and their behavior at $+\infty$ is given by Proposition 7.5. Let us give similar results for solutions of $B_\tau(\theta, \alpha, \mu) = 0$. First, we give monotonicity properties:

Proposition 7.7 *If, for $0 \leq \tau \leq 1$, there exists a scalar c and functions θ, α and μ_i in $C^{2+\delta}(\mathbb{R})$ solution of $B_\tau(\theta, \alpha, \mu) = 0$, then:*

$$c > 0, \quad \alpha' > 0, \quad \forall i \quad \mu_i' \geq 0, \quad \theta' < 0.$$

Proof. – As for Proposition 7.3, we prove that $c > 0$. We then apply Lemma 7.2 in order to prove that $\alpha > 0$ and $\mu_i \geq 0$ and Lemma 7.1 in order to prove that θ is decreasing and α, μ_i are increasing. \square

The a priori estimates and behavior at $+\infty$ are then given by the following theorem:

Theorem 7.8 *There exists $M > 0, c_b^- > 0$ and c^+ such that, for each $\tau \in [0, 1]$, if there exists a scalar c and functions θ, α and μ_i in $C^{2+\delta}(\mathbb{R})$ solution of $B_\tau(\theta, \alpha, \mu) = 0$ then:*

$$\|\theta\|_{C^{2+\delta}(\mathbb{R})} \leq M, \quad \|\alpha\|_{C^{2+\delta}(\mathbb{R})} \leq M \quad \|\mu_i\|_{C^{2+\delta}(\mathbb{R})} \leq M \quad c_b^- \leq c \leq c^+.$$

Moreover, if $z_c = \theta^{-1}(\theta_c)$, the behavior of the functions at $+\infty$ is given, for $z \geq z_c$, by:

$$\theta(z) = \theta_c \exp\left(-\frac{c}{\kappa}(z - z_c)\right) \leq \exp\left(-\frac{c_b^-}{\kappa}(z - z_c)\right) \quad (7.37)$$

$$\alpha^\infty - \alpha(z) = \alpha(z_c) \exp\left(-\frac{c}{D_\tau}(z - z_c)\right) \leq \exp\left(-\frac{c_b^-}{\kappa}(z - z_c)\right) \quad (7.38)$$

$$\mu_i^\infty - \mu_i(z) = \mu_i(z_c) \exp\left(-\frac{c}{\zeta_\tau}(z - z_c)\right) \leq \exp\left(-\frac{c_b^-}{\kappa}(z - z_c)\right) \quad (7.39)$$

Proof. – As for Theorem 7.4, we prove that $|\theta'|$ is upperly bounded by $\tilde{k}(1) + \frac{2}{\kappa}$ and then that c is upperly bounded by $c^+ = (\kappa\tilde{k}(1) + 2)/\theta_c$.

We have also $\theta \geq (1 - \epsilon_\tau)(\alpha^\infty - \alpha)$ and we then obtain, integrating the first equation of $B_\tau(\theta, \alpha, \mu) = 0$ multiplied by θ' :

$$\begin{aligned} c \int_{\mathbb{R}} (\theta'(x))^2 dx &\geq \int_0^{(1-\epsilon_\tau)\alpha^\infty} \tilde{k}(y)[(1-\epsilon_\tau)\alpha^\infty - y] dy + \epsilon_\tau \int_0^1 \tilde{k}(y)(1-y) dy \\ &\geq \epsilon \int_0^1 \tilde{k}(y)(1-y) dy. \end{aligned}$$

Then we give a lower bound for c :

$$c \geq c_b^- = \frac{\kappa \epsilon}{2 + \kappa \tilde{k}(1)} \int_0^1 \tilde{k}(y)(1-y) dy.$$

It is then easy to prove that $\alpha', \mu_i', \alpha'', \mu_i'', \theta''$ and also $\theta''', \alpha''', \mu_i'''$ are bounded independently of τ .

The behavior of functions at $+\infty$ is easy to see and the theorem is proved. \square

7.5.3 Definition of the topological degree

In this subsection, we define the topological degree for the considered operators A_τ and B_τ , after a change of variables. Let introduce a real λ such that

$$0 < \lambda < \frac{c^-}{\kappa}, \quad c^- = \min\{c_a^-, c_b^-\} > 0,$$

where c_a^- and c_b^- are the lower bounds for the wave velocities introduced in Theorem 7.4 and in Theorem 7.8. Let ξ denote the function defined by $\xi(z) = \exp(\lambda(1 - \Phi(z))z)$, where Φ is a C^∞ function described by (7.22). The change of variables is given by:

$$t = \xi\theta, \quad a = \xi \frac{\alpha^\infty - \alpha}{\alpha^\infty}, \quad m_i = \xi \frac{\mu_i^\infty - \mu_i}{\mu_i^\infty}. \quad (7.40)$$

Then, we have:

$$\forall z \leq 0 \quad t(z) = \theta(z) \quad a(z) = \frac{\alpha^\infty - \alpha(z)}{\alpha^\infty} \quad m_i(z) = \frac{\mu_i^\infty - \mu_i(z)}{\mu_i^\infty} \quad (7.41)$$

$$\forall z \geq 1 \quad t(z) = \theta(z)e^{\lambda z} \quad a(z) = \frac{\alpha^\infty - \alpha(z)}{\alpha^\infty} e^{\lambda z} \quad m_i(z) = \frac{\mu_i^\infty - \mu_i(z)}{\mu_i^\infty} e^{\lambda z} \quad (7.42)$$

For solutions of $A_\tau(\theta, \alpha, \mu) = 0$ or of $B_\tau(\theta, \alpha, \mu) = 0$ in the weighted Hölder space, θ is necessarily decreasing and we can define $z_c = \theta^{-1}(\theta_c)$. Because of Proposition 7.5 for A_τ and Theorem 7.8 of B_τ , we know that there exists a constant \mathcal{C} , independent of τ , such that if $z \geq z_c$ and $z \geq 1$, then:

$$\begin{aligned} t(z) &\leq \mathcal{C} \exp\left(\frac{c^-}{\kappa} z_c\right) \exp\left(\left(\lambda - \frac{c^-}{\kappa}\right) z\right), \\ |a(x)| &\leq \mathcal{C} \exp\left(\frac{c^-}{\kappa} z_c\right) \exp\left(\left(\lambda - \frac{c^-}{\kappa}\right) z\right), \\ |m_i(x)| &\leq \mathcal{C} \exp\left(\frac{c^-}{\kappa} z_c\right) \exp\left(\left(\lambda - \frac{c^-}{\kappa}\right) z\right). \end{aligned} \quad (7.43)$$

After change of variables in $A_\tau(\theta, \alpha, \mu) = 0$, the obtained system is:

$$\begin{cases} \kappa t'' + (c - 2\kappa l_1)t' + [(2l_1^2 - l_2)\kappa - l_1 c]t + F_1(t, a) = 0, \\ D a'' + (c - 2D l_1)a' + [(2l_1^2 - l_2)D - l_1 c]a + F_2(t, a, m) = 0, \\ \zeta m_i'' + (c - 2\zeta l_1)m_i' + [(2l_1^2 - l_2)\zeta - l_1 c]m_i + F_3(t, a, m) = 0, \end{cases} \quad (7.44)$$

with $l_1 = \xi'/\xi$, $l_2 = \xi''/\xi$ and

$$\begin{aligned} F_1(t, a) &= \tilde{k} \left(\frac{t}{\xi}\right) [(1 - \epsilon)\alpha^\infty(\xi - a) + \epsilon(\xi - t)], \\ F_2(t, a, m) &= \tilde{k} \left(\frac{t}{\xi}\right) (\xi - a) - (1 - \tau) R_r \left(\frac{t}{\xi}, \alpha^\infty \left(1 - \frac{a}{\xi}\right)\right) \sum M_i \frac{\mu_i^\infty}{\alpha^\infty} (\xi - m_i), \\ F_3(t, a, m) &= (1 - \tau) R_r \left(\frac{t}{\xi}, \alpha^\infty \left(1 - \frac{a}{\xi}\right)\right) \left[(M_i + F_i)(\xi - m_i) - F_{i+1} \frac{\mu_{i+1}^\infty}{\mu_i^\infty} (\xi - m_{i+1}) \right] \\ &\quad + \epsilon \tilde{k} \left(\frac{t}{\xi}\right) (\xi - m_i). \end{aligned}$$

Let note \tilde{A}_τ the corresponding operator to (7.44), with the functional $c(t, a, m)$, defined by (7.20), replacing c . The problems $A_\tau(\theta, \alpha, m) = 0$ and $\tilde{A}_\tau(t, a, m) = 0$ are then equivalent because of (7.41) and (7.43). For the operator B_τ , we can also define the operator \tilde{B}_τ by the same change of variables and the problems $B_\tau(\theta, \alpha, m) = 0$ and $\tilde{B}_\tau(t, a, m) = 0$ are also equivalent.

For $z \geq 1$, $l_1(z) = \lambda$ and $l_2(z) = \lambda^2$, and because of the choice of λ , we know that $\lambda(\kappa\lambda - c) < 0$, $\lambda(D\lambda - c) < 0$ and $\lambda(\zeta\lambda - c) < 0$. For the operator \tilde{A}_τ and also for the operator \tilde{B}_τ , the condition (7.21) is then valid and we can define the topological degree. These operators are homotopies.

7.5.4 Estimates in the weighted Hölder space

In order to find a priori estimates in the weighted Hölder space, we first prove that there is no 'infinite translation' of the solutions of $A_\tau(\theta, \alpha, m)$ and $B_\tau(\theta, \alpha, m)$, when τ varies. It means, for example, that the real z_c for which $\theta(z_c) = \theta_c$ has bounds, independent of τ . It is due to the choice of the functional $c(w)$. Then, the behavior of the solutions at $\pm\infty$ allows us to find the estimates.

Let note $\mathcal{L} = 1 + 1/(\alpha^\infty)^2 + 1/\sum(\mu_i^\infty)^2$. Up to an eventual translation, we can choose σ such that

$$\int_{-\infty}^0 \sigma(z) dz < \frac{\exp(c^-)}{\mathcal{L}}. \quad (7.45)$$

Lemma 7.9 For solution θ, α, m_i of $A_\tau(\theta, \alpha, m) = 0$ or of $B_\tau(\theta, \alpha, m) = 0$, the real $z_c = \theta^{-1}(\theta_c)$ is bounded independently of $\tau \in [0, 1]$.

Proof. – The functional c is defined by:

$$c(t, a, m) = \ln \left(\int_{\mathbb{R}} [t^2(z) + a^2(z) + \sum_i m_i^2(z)] \sigma(z) dz \right).$$

In the variables θ, α and μ_i :

$$\begin{aligned} \tilde{c}(\theta, \alpha, \mu) &= c \left(\xi\theta, \xi \left(\frac{\alpha^\infty - \alpha}{\alpha^\infty} \right), \xi \left(\frac{\mu_1^\infty - \mu_1}{\mu_1^\infty} \right), \dots, \xi \left(\frac{\mu_N^\infty - \mu_N}{\mu_N^\infty} \right) \right) \\ &= \ln \left(\int_{\mathbb{R}} \left[\theta^2(z) + \left(\frac{\alpha^\infty - \alpha}{\alpha^\infty} \right)^2 + \sum_i \left(\frac{\mu_i^\infty - \mu_i}{\mu_i^\infty} \right)^2 \right] \xi^2(z) \sigma(z) dz \right). \end{aligned}$$

Let assume that $z_c > 0$. We then have:

$$\tilde{c}(\theta, \alpha, \mu) \geq \ln \int_0^{z_c} |\theta(z)|^2 \xi^2(z) \sigma(z) dz \geq \ln(\theta_c^2 z_c \sigma(0)). \quad (7.46)$$

However, Theorem 7.4 or Theorem 7.8 say that $\tilde{c}(\theta, \alpha, \mu) \leq c^+$. We then have the upper bound for z_c independent of τ :

$$z_c \leq \frac{e^{c^+}}{\theta_c^2 \sigma(0)}. \quad (7.47)$$

Let now assume that $z_c < 0$. Theorem 7.4 or Theorem 7.8 show that $\tilde{c}(\theta, \alpha, \mu) \geq c^-$. Then:

$$\begin{aligned} e^{c^-} \leq e^{\tilde{c}(\theta, \alpha, \mu)} &= \int_{-\infty}^0 \left[\theta^2(z) + \left(\frac{\alpha^\infty - \alpha(z)}{\alpha^\infty} \right)^2 + \sum_i \left(\frac{\mu_i^\infty - \mu_i(z)}{\mu_i^\infty} \right)^2 \right] \sigma(z) dz \\ &+ \int_0^{+\infty} \left[\theta^2(z) + \left(\frac{\alpha^\infty - \alpha(z)}{\alpha^\infty} \right)^2 + \sum_i \left(\frac{\mu_i^\infty - \mu_i(z)}{\mu_i^\infty} \right)^2 \right] \xi^2(z) \sigma(z) dz. \end{aligned}$$

With the relations (7.43) and because $\Phi(z) \leq \exp(\lambda z)$ for $z \geq 0$, we obtain:

$$e^{c^-} \leq \mathcal{L} \int_{-\infty}^0 \sigma(z) dz + \mathcal{L} \int_0^{+\infty} e^{2\lambda z} e^{-2c^- z_c/\kappa} dz.$$

So:

$$\frac{e^{c^-}}{\mathcal{L}} \leq \int_{-\infty}^0 \sigma(z) dz + \frac{1}{2(c^-/\kappa - \lambda)} e^{2c^- z_c/\kappa},$$

and because of (7.45), the lemma is proved. \square

Before giving more estimates let us prove a lemma, which allows us to evaluate the behavior at $+\infty$ or at $-\infty$ of solution of some ordinary differential equation:

Lemma 7.10 *Let note I the interval $] -\infty, z_0]$, a and b two positive reals and y a function in $C^{2+\delta}(I)$ such that:*

- y is non negative,
- $y(z)$ tends to 0 when z tends to $-\infty$,
- for all $z \in I$, $y''(z) + a y'(z) - b y(z) \geq 0$.

Then, for $z \in I$:

$$y(z) \leq y(z_0) \exp\left(\frac{\sqrt{a^2 + 4b} - a}{2}(z - z_0)\right) \quad (7.48)$$

$$0 \leq y'(z) \leq \left[y'(z_0) + \frac{a + \sqrt{a^2 + 4b}}{2} y(z_0)\right] \exp\left(\frac{\sqrt{a^2 + 4b} - a}{2}(z - z_0)\right) \quad (7.49)$$

Proof. – Let introduce the function Λ_1 defined for $z \in I$ by:

$$\Lambda_1(z) = \left(y'(z) + \frac{a - \sqrt{a^2 + 4b}}{2} y(z)\right) \exp\left(\frac{a + \sqrt{a^2 + 4b}}{2} z\right).$$

A computation of derivative shows that this function is increasing. Moreover, it tends to 0 at $-\infty$. Then it is non negative and $y'(z) + (a - \sqrt{a^2 + 4b})/2 y(z) \geq 0$. We also introduce the function Γ defined for $z \in I$ by:

$$\Gamma(z) = y(z) \exp\left(\frac{a - \sqrt{a^2 + 4b}}{2} z\right).$$

This function is also increasing because of the previous result, and simply writing $\Gamma(z) \leq \Gamma(z_0)$, we show the validity of the first inequality (7.48).

Let now introduce the function Λ_2 defined for $z \in I$ by:

$$\Lambda_2(z) = \left(y'(z) + \frac{a + \sqrt{a^2 + 4b}}{2} y(z)\right) \exp\left(\frac{a - \sqrt{a^2 + 4b}}{2} z\right).$$

This function is increasing and then $\Lambda_2(z) \leq \Lambda_2(z_0)$ for $z \leq z_0$. Because y is non negative, we obtain the second inequality (7.49) and the lemma is proved. \square

We can then give estimates in the weighted Hölder space:

Theorem 7.11 *There exists a constant $M > 0$ independent of $\tau \in [0, 1]$ such that, if t, a, m_i in E are solution of $\tilde{A}_\tau(t, a, m_1, \tau, \dots, m_N, \tau) = 0$, then:*

$$\|\Phi - t\|_{C_\mu^{2+\delta}(\mathbb{R})} \leq M, \quad \|\Phi - a\|_{C_\mu^{2+\delta}(\mathbb{R})} \leq M, \quad \|\Phi - m_i\|_{C_\mu^{2+\delta}(\mathbb{R})} \leq M, \quad (7.50)$$

Proof. – Let note $\theta = t/\zeta \in E$, $\alpha = \alpha^\infty(1 - a/\zeta) \in E$, $\mu_i = \mu_i^\infty(1 - m_i/\zeta)$ which are solution of $A_\tau(\theta, \alpha, \mu_1, \dots, \mu_N) = 0$.

Theorem 7.4, relations (7.41) and (7.43) and upper bound for $z_c = \theta^{-1}(\theta_c)$ in Lemma 7.9 give upper bound independent of τ for the norms of t, a and m_i in the Hölder space $C^{2+\delta}(\mathbb{R})$. Estimates independent of τ in the space $C_\mu^{2+\delta}(\mathbb{R}^+)$ are straightforward because of Proposition 7.5. We then only have to find estimates independent of τ in the space $C_\mu^{2+\delta}(\mathbb{R}^-)$ of the functions $1 - \theta, \alpha$ and μ_i , which are respectively equal to $1 - t, \alpha^\infty(1 - a)$ and $\mu_i^\infty(1 - m_i)$ on \mathbb{R}^- .

We know that $\theta(z_c) = \theta_c, \theta'(z_c) = -c\theta_c/\kappa$ and $\theta''(z_c) = c^2\theta_c/\kappa^2 > 0$. Let then note z_d the larger real in $] - \infty, z_c]$ such that $\theta''(z_d) = 0$ (θ'' have necessarily a zero in $] - \infty, z_c]$: in the other case, θ' would be increasing and upperly bounded by $\theta'(z_c) = -c\theta_c/\kappa$ in $] - \infty, z_c]$, but it is impossible). The function θ' is increasing on $[z_d, z_c]$ and then:

$$\forall z \in [z_d, z_c] \quad \theta'(z) \leq -\frac{c\theta_c}{\kappa}. \quad (7.51)$$

An integration of this inequality between z_d and z_c give a lower bound for z_d :

$$z_d \geq z_c - \frac{\kappa}{c - \theta_c}. \quad (7.52)$$

So, as z_c, z_d admits a lower bound independent of τ .

Moreover, for $z = z_d$, the equation on θ give:

$$-c\theta'(z_d) = (1 - \epsilon)\tilde{k}(\theta(z_d))(1 - \alpha(z_d)) + \epsilon\tilde{k}(\theta(z_d))(1 - \theta(z_d)) \leq \tilde{k}(\theta(z_d)).$$

Applying (7.51) to $z = z_d$ and because $\tilde{k}(\theta(z))$ is a decreasing function, we obtain, for $z \leq z_d$:

$$\tilde{k}(\theta(z)) \geq \frac{c^2\theta_c}{\kappa}. \quad (7.53)$$

Let consider increasing variables $1 - \theta, S_{\theta\alpha} = (1 - \theta)\kappa/[D(1 - \epsilon)] - \alpha$ and $S_i = \sum_{k=i}^N \mu_k$. Because of (7.53), those variables are such that, for $z \leq z_d$:

$$-\kappa\theta''(z) - c\theta'(z) \geq \epsilon\frac{c^2\theta_c}{\kappa}(1 - \theta(z)), \quad (7.54)$$

$$D S_{\theta\alpha}''(z) + c S_{\theta\alpha}'(z) \geq \epsilon\frac{D^2 c^2 \theta_c}{\kappa^2} S_{\theta\alpha}(z), \quad (7.55)$$

$$\zeta S_i''(z) + c S_i'(z) \geq \epsilon\frac{c^2\theta_c}{\kappa} S_i(z). \quad (7.56)$$

We apply Lemma 7.10 to those variables. First for $1 - \theta$, we obtain, for $z \leq z_d$:

$$\begin{aligned} 0 &\leq 1 - \theta(z) \leq [1 - \theta(z_d)] \exp\left(\frac{c}{2\kappa}[\sqrt{1 + 4\epsilon\theta_c} - 1](z - z_d)\right) \\ 0 &\leq -\theta'(z) \leq \left[-\theta'(z_d) + \frac{c}{2\kappa}(1 + \sqrt{1 + 4\epsilon\theta_c})\theta(z_d)\right] \exp\left(\frac{c}{2\kappa}[\sqrt{1 + 4\epsilon\theta_c} - 1](z - z_d)\right) \end{aligned}$$

We have also remarked that there exists a constant M , independent of τ , which upper bound the norms of θ , α and μ_i in the Hölder space $C^{2+\delta}(\mathbb{R})$. The constants c^- and c^+ are also independent of τ and $0 < c^- \leq c \leq c^+$. Then:

$$0 \leq 1 - \theta(z) \leq \exp\left(\frac{c^-}{2\kappa}[\sqrt{1+4\epsilon\theta_c} - 1](z - z_d)\right), \quad (7.57)$$

$$0 \leq -\theta'(z) \leq \left[M + \frac{c^+}{2\kappa}(1 + \sqrt{1+4\epsilon\theta_c})\right] \exp\left(\frac{c^-}{2\kappa}[\sqrt{1+4\epsilon\theta_c} - 1](z - z_d)\right). \quad (7.58)$$

In the same way, for $S'_{\theta\alpha}$, if $z \leq z_d$:

$$0 \leq S'_{\theta\alpha}(z) \leq \left[M + \frac{c^+}{2D}\left(1 + \sqrt{1+4\epsilon\frac{D^2}{\kappa^2}\theta_c}\right)\right] \exp\left(\frac{c^-}{2D}\left[\sqrt{1+4\epsilon\frac{D^2}{\kappa^2}\theta_c} - 1\right](z - z_d)\right).$$

As $1 - \theta$, the functions α and α' then exponentially tend to zero at $-\infty$:

$$\begin{aligned} 0 \leq \alpha(z) &\leq \frac{\kappa}{(1-\epsilon)D}(1 - \theta(z)) \leq \frac{\kappa}{(1-\epsilon)D} \exp\left(\frac{c^-}{2\kappa}[\sqrt{1+4\epsilon\theta_c} - 1](z - z_d)\right), \\ \alpha'(z) &\leq -\frac{\kappa}{(1-\epsilon)D}\theta'(z) \\ &\leq \frac{\kappa}{(1-\epsilon)D}\left[M + \frac{c^+}{2\kappa}(1 + \sqrt{1+4\epsilon\theta_c})\right] \exp\left(\frac{c^-}{2\kappa}[\sqrt{1+4\epsilon\theta_c} - 1](z - z_d)\right), \\ -\alpha'(z) &\leq S'_{\theta\alpha}(z) \\ &\leq \left[M + \frac{c^+}{2D}\left(1 + \sqrt{1+4\epsilon\frac{D^2}{\kappa^2}\theta_c}\right)\right] \exp\left(\frac{c^-}{2D}\left[\sqrt{1+4\epsilon\frac{D^2}{\kappa^2}\theta_c} - 1\right](z - z_d)\right). \end{aligned}$$

Finally, applying Lemma 7.10 to S_i , we have, for $z \leq z_d$:

$$0 \leq S_i(z) \leq \exp\left(\frac{c^-}{2\zeta}\left[\sqrt{1+4\epsilon\frac{\zeta}{\kappa}\theta_c} - 1\right](z - z_d)\right) \quad (7.59)$$

$$0 \leq S'_i(z) \leq \left[M + \frac{c^+}{2\zeta}\left(1 + \sqrt{1+4\epsilon\frac{\zeta}{\kappa}\theta_c}\right)\right] \exp\left(\frac{c^-}{2\zeta}\left[\sqrt{1+4\epsilon\frac{\zeta}{\kappa}\theta_c} - 1\right](z - z_d)\right) \quad (7.60)$$

The functions μ_i and μ'_i then exponentially tend to zero at $-\infty$ because $0 \leq \mu_i \leq S_i$, $\mu'_i = S'_i - S'_{i+1} \leq S'_i$ and $-\mu'_i = S'_{i+1} - S'_i \leq S'_{i+1}$.

We then have an upper bound, independent of τ , for the norm of $1 - \theta$, α and μ_i in the space $C^{2+\delta}_\mu(\mathbb{R}^-)$ and the theorem is proved. \square

Theorem 7.12 *There exists a constant $M > 0$ such that, for each $\tau \in [0, 1]$, if t, a, m_i in E are solution of $\tilde{B}_\tau(t, a, m_1, \dots, m_N) = 0$, then:*

$$\|\Phi - t\|_{C^{2+\delta}_\mu(\mathbb{R})} \leq M, \quad \|\Phi - a\|_{C^{2+\delta}_\mu(\mathbb{R})} \leq M, \quad \|\Phi - m_i\|_{C^{2+\delta}_\mu(\mathbb{R})} \leq M, \quad (7.61)$$

Proof. – Let note $\theta = t/\zeta \in E$, $\alpha = \alpha^\infty(1 - a/\zeta) \in E$, $\mu_i = \mu_i^\infty(1 - m_i/\zeta)$ which are solution of $B_\tau(\theta, \alpha, \mu_1, \dots, \mu_N) = 0$.

Theorem 7.8, relations (7.41) and (7.43) and the upper bound for $z_c = \theta^{-1}(\theta_c)$ in Lemma 7.9 give an upper bound independent of τ for the norms of t , a and m_i in the Hölder space $C^{2+\delta}(\mathbb{R})$. Estimates independent of τ in the space $C_\mu^{2+\delta}(\mathbb{R}^+)$ are straightforward because of Theorem 7.8. We then only have to find estimates independent of τ in the space $C_\mu^{2+\delta}(\mathbb{R}^-)$ of the functions $1 - \theta$, α and μ_i , which are respectively equal to $1 - t$, $\alpha^\infty(1 - a)$ and $\mu_i^\infty(1 - m_i)$ on \mathbb{R}^- .

We introduce, as in the proof of Theorem 7.11, the largest real z_d in $] -\infty, z_c]$ such that $\theta''(z_d) = 0$ and we have:

$$z_d \geq z_c - \frac{\kappa}{c^- \theta_c}, \quad \tilde{k}(\theta(z)) \geq \frac{c^2 \theta_c}{\kappa}.$$

The increasing variables $1 - \theta$, α and μ_i are then such that, for $z \leq z_d$:

$$-\kappa \theta''(z) - c \theta'(z) \geq \epsilon \frac{c^2 \theta_c}{\kappa} (1 - \theta(z)), \quad (7.62)$$

$$D_\tau \alpha''(z) + c \alpha'(z) \geq \frac{c^2 \theta_c}{\kappa} \alpha(z), \quad (7.63)$$

$$\zeta_\tau \mu_i''(z) + c \mu_i'(z) \geq \epsilon \frac{c^2 \theta_c}{\kappa} \mu_i(z). \quad (7.64)$$

Applying Lemma 7.10 to those variables, we obtain:

$$\begin{aligned} 0 &\leq 1 - \theta(z) \leq \exp\left(\frac{c^-}{2\kappa}[\sqrt{1 + 4\epsilon\theta_c} - 1](z - z_d)\right), \\ 0 &\leq -\theta'(z) \leq \left[M + \frac{c^+}{2\kappa}(1 + \sqrt{1 + 4\epsilon\theta_c})\right] \exp\left(\frac{c^-}{2\kappa}[\sqrt{1 + 4\epsilon\theta_c} - 1](z - z_d)\right), \\ 0 &\leq \alpha(z) \leq \exp\left(\frac{c^-}{2\kappa}[\sqrt{1 + 4\epsilon\theta_c} - 1](z - z_d)\right), \\ 0 &\leq \alpha'(z) \leq \left[M + \frac{c^+}{2D}(1 + \sqrt{1 + 4\epsilon\theta_c})\right] \exp\left(\frac{c^-}{2\kappa}[\sqrt{1 + 4\epsilon\theta_c} - 1](z - z_d)\right), \\ 0 &\leq \mu_i(z) \leq \exp\left(\frac{c^-}{2\kappa}[\sqrt{1 + 4\epsilon\theta_c} - 1](z - z_d)\right), \\ 0 &\leq \mu_i'(z) \leq \left[M + \frac{c^+}{2\zeta}(1 + \sqrt{1 + 4\epsilon\theta_c})\right] \exp\left(\frac{c^-}{2\kappa}[\sqrt{1 + 4\epsilon\theta_c} - 1](z - z_d)\right). \end{aligned}$$

We then have an upper bound, independent of τ , for the norm of $1 - \theta$, α and μ_i in the space $C_\mu^{2+\delta}(\mathbb{R}^-)$ and the theorem is proved. \square

7.5.5 Conclusion

For ζ , ϵ and r fixed such that $0 < \zeta < D \leq \frac{\kappa}{1+p}$, $0 < \epsilon \leq 1 - \beta$ and $0 < r \leq 1$, we then have defined two homotopies between the operator of $(\mathcal{S}_{\zeta, \epsilon, r})$ and a simpler operator vanishing only at one point. Moreover, we also have given a priori estimates in the weighted Hölder space, independent of τ . We can then conclude with the existence of solution of $(\mathcal{S}_{\zeta, \epsilon, r})$.

Theorem 7.13 *There exists a scalar $c > 0$ and functions θ , α , μ_i solution of $(\mathcal{S}_{\zeta, \epsilon, r})$, such that θ , $(\alpha^\infty - \alpha)/\alpha^\infty$ and $(\mu_i^\infty - \mu_i)/\mu_i^\infty$ are in E .*

Proof. – In fact, we prove that there exists solution t, a, m_i in E of system $\tilde{A}_0(t, a, m) = 0$, evaluating its topological degree.

Because of Theorem 7.12, an open ball \mathcal{B}_1 can be chosen in E^{N+2} , which contain all the zero of the homotopy \tilde{B}_τ . The topological degrees of $(\tilde{B}_0 = \tilde{A}_1, \mathcal{B}_1)$ and $(\tilde{B}_1, \mathcal{B}_1)$ are then equal. Moreover, the problem $B_1 w = 0$ admits a unique solution w_0 . Because of the functionalization of c (7.20), there is no eigenvalue for linearized operator at w_0 . The topological degree of (B_1, \mathcal{B}_1) is then 1 or -1. So, the topological degree of (A_1, \mathcal{B}_1) is different from zero.

Because of Theorem 7.11, an open ball \mathcal{B}_2 can be chosen in E^{N+2} , which contain all the zero of the homotopy \tilde{A}_τ . The topological degrees of $(\tilde{A}_0, \mathcal{B}_2)$ and $(\tilde{A}_1, \mathcal{B}_2)$ are then equal and not equal to zero. The theorem is then proved. \square

7.6 Limits

We saw that, for each $\zeta \in]0, D[$, with $D \leq \frac{\kappa}{1+p}$, for each $\epsilon \in]0, 1 - \beta]$ and for each $r \in]0, 1]$, there exists a solution of $(\mathcal{S}_{\zeta, \epsilon, r})$. We then show successively, the existence of solution for $(\mathcal{S}_{\zeta, \epsilon, 0})$, for (\mathcal{S}_ζ) , for (\mathcal{S}_N) and then for (\mathcal{S}_0) .

7.6.1 Limit on the parameter r

Let now note θ_r, α_r and $\mu_{i,r}$ a solution of $(\mathcal{S}_{\zeta, \epsilon, r})$, for each $r \in]0, 1[$. Theorem 7.4 give estimates in $C^{2+\delta}(\mathbb{R})$ for θ_r, α_r and $\mu_{i,r}$, independent of r but eventually dependent of ζ . These a priori estimates allows us to pass to the limit when r tends to 0, with convergent subsequences, thus giving a solution of the limit system. But the used compactness property is only valid for function defined in bounded domains. The limit solution can be extended to the whole real line but the convergence can then not be uniform on \mathbb{R} . So the boundary conditions of each function have to be recovered, thanks to inequalities given in Proposition 7.3 and in Theorem 7.4. We then have the Theorem:

Theorem 7.14 *There exists a scalar c and functions θ, α and μ_i in $C^{2+\delta}(\mathbb{R})$ solution of the system $(\mathcal{S}_{\zeta, \epsilon, 0})$.*

Proof. – Let note $r_n = 1/n$ for $n \geq 1$ and $c_n \theta_n, \alpha_n, \mu_{i,n}$ a solution of $(\mathcal{S}_{\zeta, \epsilon, r_n})$ such that $\theta_n(0) = \theta_c$. Since the sequence $(\theta_n)_{n \in \mathbb{N}}$ is bounded in $C^{2+\delta}(\mathbb{R})$, then for any bounded subset $[-q, q]$, with $q \in \mathbb{N}^*$, we can choose a subsequence $(\theta_{j_k})_{k \in \mathbb{N}}$ which converges to some limiting function θ in $C^2([-q, q])$. We can extend the limiting function θ to the whole real line and choose a subsequence such that the functions $\theta_{j_k} - \theta$ converge to zero in C^2 on every bounded real interval. Moreover, the function θ is in $C^{2+\delta}(\mathbb{R})$: indeed, it is sufficient to verify the inequality

$$\forall x \in \mathbb{R}, \quad \forall y \in \mathbb{R}/\{x\}, \quad \frac{|\theta''(x) - \theta''(y)|}{|x - y|^\delta} \leq M.$$

It follows from the similar inequality for the functions θ_{j_k} with the constant M independent of n and from the C^2 convergence of the sequence $(\theta_{j_k})_{k \in \mathbb{N}}$ to θ in each bounded interval. We also can extract from $(\alpha_{j_k})_{k \in \mathbb{N}}$ and $(\mu_{i, j_k})_{k \in \mathbb{N}}$ subsequences still noted $(\alpha_{j_k})_{k \in \mathbb{N}}$ and $(\mu_{i, j_k})_{k \in \mathbb{N}}$ which converge to functions α and μ_i of $C^{2+\delta}(\mathbb{R})$, the convergence being C^2 on all bounded interval. Without loss of generality we can assume that the sequence $(c_{j_k})_{k \in \mathbb{N}}$, bounded by c_a^- and c^+ , converge to $c > 0$. Moreover, for each $z \in \mathbb{R}$, the sequence

$R_{r_n}(\theta_n(z), \alpha_n(z))$ converges to $\tilde{R}_S(\theta(z), \alpha(z))$. Then, θ , α and μ_i are solution of the equations of $(\mathcal{S}_{\zeta, \epsilon, 0})$. Because \tilde{B}_M is non negative, they are regular functions (they belong to the Hölder space $C^{2+\delta}(\mathbb{R})$). We still have to find the limits of the functions at $\pm\infty$.

The function θ is decreasing and $S_i = \sum_{j=i}^N \mu_j$, for $i = 1$ to N , are increasing functions. Moreover, those functions are bounded: then, they admit finite limits at $\pm\infty$. Since $\theta(0) = \theta_c$, we have for $z \geq 0$: $\theta(z) = \theta_c \exp(-cz/\kappa)$. Then $\theta(z)$ tends to 0 as z tends to $+\infty$ and $\theta(z) > \theta_c$ for $z < 0$. Because of the differential equation for θ , we know that $\tilde{k}(\theta(z))\alpha(z)$ tends to 0 as z tends to $-\infty$. Then, necessarily, $\alpha(z)$ tends to 0 as z tends to $-\infty$.

Because of the differential equation for S_1 , we know that $R_0(\theta(z), \alpha(z)) \sum_{j=1}^N M_j \mu_j(z)$ tends to 0 as z tends to $\pm\infty$. At $-\infty$, $R_0(\theta(z), \alpha(z))$ has a positive limit. The functions $\mu_j(z)$ being positive, they then tend to 0 as z tends to $-\infty$. At $+\infty$, $R_0(\theta(z), \alpha(z))$ necessarily tends to 0 and then, $\alpha(z)$ tends to $\tilde{Y}_{F_S}(0) = \alpha^\infty$ as z tends to $+\infty$.

Integrating on \mathbb{R} the sum of the equation of $(\mathcal{S}_{\zeta, \epsilon, 0})$, we obtain: $\lim_{+\infty} S_1 = \lim_{-\infty} \theta - \alpha^\infty \leq 1 - \alpha^\infty$. Moreover, for $z \geq 0$, we know that $\theta(z) + \alpha(z) + S_1(z) \geq 1$. Passing to the limit $z \rightarrow +\infty$, we have $\lim_{+\infty} S_1 \geq 1 - \alpha^\infty$. Then $S_1(z)$ tends to $1 - \alpha^\infty = S_1^\infty$ as z tends to $+\infty$ and $\theta(z)$ tends to 1 as z tends to $-\infty$.

Let note l_j the limit of $\mu_j(z)$ as $z \rightarrow +\infty$. Because of (7.27), we have:

$$\forall i \in \{1, \dots, N\}, \quad \sum_{j=i}^N \prod_{k=j+1}^N \left(1 + \frac{F_k}{M_k}\right) (\mu_j^\infty - l_j) \geq 0.$$

Let note $\lambda_j = \prod_{k=j+1}^N \left(1 + \frac{F_k}{M_k}\right) - \prod_{k=j+2}^N \left(1 + \frac{F_k}{M_k}\right)$. The previous equation then reads:

$$\sum_{j=i}^N \sum_{k=j}^N \lambda_k (\mu_j^\infty - l_j) \geq 0.$$

Introducing the sums $\mathcal{S}_k = \sum_{j=1}^k (\mu_j^\infty - l_j)$, we have: $\sum_{k=i}^N \lambda_k \mathcal{S}_k \geq (\sum_{k=i}^N \lambda_k) \mathcal{S}_{i-1}$, with $\mathcal{S}_0 = 0$. We know that $\mathcal{S}_N = 0$. Then it is easy to prove that $\mathcal{S}_i \leq 0$ for $i \in \{1, \dots, N\}$. But the first inequality is $\sum_{k=1}^N \lambda_k \mathcal{S}_k \geq 0$. Then $\mathcal{S}_i = 0$ for all i , the $\mu_j(z)$ tend to μ_j^∞ as $z \rightarrow +\infty$ and the theorem is proved. \square

7.6.2 Limit on the parameter ϵ

Thanks to the estimates for $\tau = r = 0$ of Theorem 7.4 and to inequalities of Proposition 7.3 and of Theorem 7.4, we can pass to the limit when ϵ tends to 0:

Theorem 7.15 *There exists a scalar c and functions θ , α and μ_i in $C^{2+\delta}(\mathbb{R})$ solution of the system (\mathcal{S}_ζ) .*

Proof. – As for the proof of Theorem 7.14, because of estimates of Theorem 7.4, we can find a sequence ϵ_n , converging to zero, such that the solutions $c_n, \theta_n, \alpha_n, \mu_{i,n}$ of $(\mathcal{S}_{\zeta, \epsilon_n, 0})$ converge to a scalar c and functions θ, α and μ_i in $C^{2+\delta}(\mathbb{R})$, the convergence being C^2 on all bounded interval.

The inequalities used in order to recover the limits of the functions at $\pm\infty$ can still be used here. The theorem is then proved. \square

7.6.3 Limit on the diffusion coefficient

Let now note θ_ζ , α_ζ and $\mu_{i,\zeta}$ a solution of (\mathcal{S}_ζ) , for each $\zeta \in [0, D]$. Estimates of Theorem 7.4 and inequalities of Proposition 7.3 and of Theorem 7.4 are also valid for $\tau = \epsilon = r = 0$. We can then pass to the limit when ζ tends to 0 in the system (\mathcal{S}_ζ) and also in the inequalities, thus giving other inequalities useful for the next step:

Theorem 7.16 *There exists a scalar c and functions θ , α and μ_i in $C^{2+\delta}(\mathbb{R})$ solution of the system (\mathcal{S}_N) . Moreover,*

$$0 < c^- \leq c \leq c^+, \quad 0 \leq \alpha \leq 1, \quad \tilde{B}_M(\theta, \alpha) \geq 0, \quad \forall i \quad \mu_i \geq 0, \quad \forall i \quad S'_i \geq 0, \quad \theta' \leq 0.$$

Proof. – The proof is very similar to the proof of Theorem 7.15: because of estimates of Theorem 7.4, we can find a sequence ζ_n , converging to zero, such that the solutions $c_n, \theta_n, \alpha_n, \mu_{i,n}$ of (\mathcal{S}_{ζ_n}) converge to a scalar c and functions in $C^{2+\delta}(\mathbb{R})$: θ, α and μ_i , the convergence being C^2 on all bounded interval.

The inequalities used in order to recover the limits of the functions at $\pm\infty$ can still be used here and the theorem is proved. \square

7.6.4 Limit on the number of sections

We have here to pass to the limit when the number of sections goes to infinity. We then use the numerical analysis of the sectional approach given in [Lau02] [LM02]. But in these articles, the distribution function for the kinetic problem was known. Here, we have to prove the existence of the distribution function for the limit problem and to recover the kinetic equation. In a first step, we then construct an approximation of this distribution. In a second step, we show the convergence of this approximation and of the solutions for the gaseous phase when the number of sections goes to infinity.

Construction of an approximation of the distribution function

In order to construct an approximation of the distribution function, we introduce the characteristics corresponding to gaseous variables solutions for the discretized system (\mathcal{S}_N) . A distribution function can then be defined as the transport of the distribution ψ_0 along these characteristics. We then check in a proposition, using the numerical analysis of the sectional method, that the source term for the gaseous phase in the discretized system is close to the one calculated from the approximated distribution function. This last result will be essential for the passage to the limit in the equations.

Let us note, $c^{(N)}$, $\theta^{(N)}$, $\alpha^{(N)}$ and $\mu_i^{(N)}$ in $C^{2+\delta}(\mathbb{R})$ solution of the system (\mathcal{S}_N) , with $\theta^{(N)}(0) = \theta_c$. We also renote $F_i^{(N)}$ and $M_i^{(N)}$ the constants in the equations on the $\mu_i^{(N)}$. The function $\tilde{R}_S(\theta^{(N)}(z), \alpha^{(N)}(z))$ is non negative and upperly bounded by $\varphi(1 + \mathcal{N})\theta^{(N)}(z)/\delta$ and $\theta^{(N)}$ is exponentially decreasing on \mathbb{R}^+ . Then, the function $\tilde{R}_S(\theta^{(N)}(z), \alpha^{(N)}(z))$ is integrable on each interval $[z, +\infty[$. Let then introduce the characteristics $X^{(N)}$ and the function $\psi^{(N)}$ defined by:

$$X^{(N)}(z, S) = S + \frac{1}{c^{(N)}} \int_z^\infty \tilde{R}_S(\theta^{(N)}(y), \alpha^{(N)}(y)) dy \quad (7.65)$$

$$\psi^{(N)}(z, S) = \psi_0(X(z, S)). \quad (7.66)$$

The function $\psi^{(N)}$ is a solution of the system:

$$\begin{aligned} c^{(N)} \partial_z \psi(z, S) + R_S(\theta^{(N)}(y), \alpha^{(N)}(y)) \partial_S \psi^{(N)}(z, S) &= 0 & z \in \mathbb{R} \quad S \in \mathbb{R}^+ \\ \psi^{(N)}(+\infty, S) &= \psi_0(S) & S \in \mathbb{R}^+. \end{aligned}$$

We want then to prove that the source term S^m is close to a moment of this function $\psi^{(N)}$:

Proposition 7.17 *There exists a constant \mathcal{K} independent of N and such that, for all $z \in \mathbb{R}$:*

$$\left| \sum_{i=1}^N M_i^{(N)} \mu_i^{(N)}(z) - \frac{\rho_l}{4\sqrt{\pi}} \int_0^{+\infty} S^{1/2} \psi^{(N)}(z, S) dS \right| \leq \mathcal{K} \Delta S.$$

Proof. – First, because of equations (7.65) and (7.66), the function $\psi^{(N)}(z, S)$ is null for $z \leq z_m$ such that:

$$\int_{z_m}^{+\infty} \tilde{R}_S(\theta^{(N)}(z), \alpha^{(N)}(z)) dz = c^{(N)} S_{max}.$$

Such a z_m exists because the function $\tilde{R}_S(\theta^{(N)}(z), \alpha^{(N)}(z))$ tends to $-\varphi \ln \delta$ when z tends to $-\infty$.

Let introduce the mass densities in each section, calculated with the distribution function $\psi^{(N)}$:

$$\bar{\mu}_i^{(N)}(z) = \frac{\rho_l}{6\sqrt{\pi}} \int_0^{+\infty} S^{3/2} \psi^{(N)}(z, S) dS.$$

In order to prove the proposition, we introduce two terms:

$$\begin{aligned} \left| \sum_{i=1}^N M_i^{(N)} \mu_i^{(N)}(z) - \frac{\rho_l}{4\sqrt{\pi}} \int_0^{+\infty} S^{1/2} \psi^{(N)}(z, S) dS \right| &\leq \left| \sum_{i=1}^N M_i^{(N)} (\mu_i^{(N)}(z) - \bar{\mu}_i^{(N)}(z)) \right| \\ &+ \left| \sum_{i=1}^N M_i^{(N)} \bar{\mu}_i^{(N)}(z) - \frac{\rho_l}{4\sqrt{\pi}} \int_0^{+\infty} S^{1/2} \psi^{(N)}(z, S) dS \right|. \end{aligned} \quad (7.67)$$

We begin by giving an upper bound of the first term. It is proved in [Lau02], [LM02] that the used multi-fluid method is of order 1. More precisely, if

$$\gamma_i^{(N)} = c^{(N)} \partial_z \bar{\mu}_i^{(N)} - \tilde{R}_S(\theta^{(N)}, \alpha^{(N)}) [(M_i^{(N)} + F_i^{(N)}) \bar{\mu}_i^{(N)} - F_{i+1}^{(N)} \bar{\mu}_{i+1}^{(N)}]$$

then $\gamma_i^{(N)}(z) = 0$ for $z \leq z_m$ and for $z > z_m$:

$$|\gamma_i^{(N)}(z)| \leq \mathcal{C} \tilde{R}_S(\theta^{(N)}(z), \alpha^{(N)}(z)) \sqrt{S_i} \Delta S^2.$$

with

$$\mathcal{C} = \frac{\rho_l}{6\sqrt{\pi}} \left[6 \|\psi_0'\|_{L^\infty(\mathbb{R}^+)} + \frac{3}{4} S_{max} \|\psi_0''\|_{L^\infty(\mathbb{R}^+)} \right].$$

Let now introduce, for each section, the difference between the calculated mass density and the ‘real’ mass density: $e_i^{(N)}(z) = \mu_i^{(N)}(z) - \bar{\mu}_i^{(N)}(z)$. Those functions are such that:

$$c^{(N)} \partial_z e_i^{(N)} - \tilde{R}_S(\theta^{(N)}, \alpha^{(N)}) [(M_i^{(N)} + F_i^{(N)}) e_i^{(N)} - F_{i+1}^{(N)} e_{i+1}^{(N)}] = -\gamma_i^{(N)},$$

and $e_i^{(N)}(z)$ tends to 0 when z tends to $\pm\infty$. Then, $|e_i^{(N)}|$ reaches its maximum at z_o such that $\partial_z e_i^{(N)}(z_o) = 0$. We have then the inequality:

$$\|e_i^{(N)}\|_{L^\infty(\mathbb{R})} \leq |e_i^{(N)}(z_o)| \leq \frac{F_{i+1}^{(N)}}{M_i^{(N)} + F_i^{(N)}} |e_{i+1}^{(N)}(z_o)| + \frac{1}{M_i^{(N)} + F_i^{(N)}} \left| \frac{\gamma_i^{(N)}(z_o)}{\tilde{R}_S(\theta^{(N)}(z_o), \alpha^{(N)}(z_o))} \right|.$$

Let note $\beta_i = \int_{S_{i-1}}^{S_i} \sigma^{3/2} d\sigma$. Then:

$$\|e_i^{(N)}\|_{L^\infty(\mathbb{R})} \leq \frac{\beta_i}{\beta_{i+1}} \|e_{i+1}^{(N)}\|_{L^\infty(\mathbb{R})} C \frac{\beta_i}{S_i} \Delta S^2.$$

We obtain an upper bound for $\|e_i^{(N)}\|_{L^\infty(\mathbb{R})}$:

$$\|e_i^{(N)}\|_{L^\infty(\mathbb{R})} \leq C \Delta S^2 \left(\sum_{k=i}^N \frac{1}{S_k} \right) \beta_i.$$

So, the first term of (7.67) can be upperly bounded:

$$\begin{aligned} \left| \sum_{i=1}^N M_i^{(N)} e_i^{(N)}(z) \right| &\leq C \Delta S^2 \sum_{i=1}^N \left(\sum_{k=i}^N \frac{1}{S_k} \right) \frac{3}{2} \int_{S_{i-1}}^{S_i} \sigma^{1/2} d\sigma \leq C \Delta S^2 \sum_{k=1}^N \sqrt{S_k} \\ &\leq C \left[\frac{2}{3} S_{max}^{3/2} + \Delta S \sqrt{S_{max}} \right] \Delta S \end{aligned}$$

We now have to upperly bound the second term of (7.67).

$$\left| \sum_{i=1}^N M_i^{(N)} \bar{\mu}_i^{(N)}(z) - \frac{\rho_l}{4\sqrt{\pi}} \int_0^{+\infty} S^{1/2} \psi^{(N)}(z, S) dS \right| \leq \frac{\rho_l}{4\sqrt{\pi}} \|\psi_0\|_{L^\infty(\mathbb{R}^+)} \sum_{i=1}^N \int_{S_{i-1}}^{S_i} S^{1/2} |u_i(S)| dS$$

with

$$u_i(S) = \frac{S \int_{S_{i-1}}^{S_i} \sigma^{1/2} d\sigma}{\int_{S_{i-1}}^{S_i} \sigma^{3/2} d\sigma} - 1 = \frac{\int_{S_{i-1}}^{S_i} (S - \sigma) \sigma^{1/2} d\sigma}{\int_{S_{i-1}}^{S_i} \sigma^{3/2} d\sigma}.$$

So:

$$\sum_{i=1}^N \int_{S_{i-1}}^{S_i} S^{1/2} |u_i(S)| dS \leq \frac{2}{3} \int_0^{\Delta S} S^{1/2} dS + \sum_{i=2}^N \frac{\Delta S}{S_{i-1}} \int_{S_{i-1}}^{S_i} S^{1/2} dS$$

But:

$$\begin{aligned} \frac{3}{2} \sum_{i=2}^N \frac{1}{S_{i-1}} \int_{S_{i-1}}^{S_i} S^{1/2} dS &= \sum_{i=1}^{N-1} \left[S_{i+1}^{1/2} \left(1 + \frac{\Delta S}{S_i} \right) - S_i^{1/2} \right] \\ &= \sqrt{S_{max}} - \sqrt{\Delta S} + \Delta S \sum_{i=1}^{N-1} \frac{1}{\sqrt{S_i}} \sqrt{1 + \frac{\Delta S}{S_i}}. \end{aligned}$$

We can then upperly bound the preceding term:

$$\begin{aligned} \sum_{i=1}^N \int_{S_{i-1}}^{S_i} S^{1/2} |u_i(S)| dS &\leq \frac{2}{3} \Delta S \left(\sqrt{S_{max}} + \sqrt{2\Delta S} \sum_{i=1}^{N-1} \frac{1}{\sqrt{i}} \right) \\ &\leq \frac{2}{3} \Delta S \left(\sqrt{S_{max}} + \sqrt{2\Delta S} \int_0^N \frac{1}{\sqrt{x}} dx \right) \\ &\leq \frac{2}{3} (1 + 2\sqrt{2}) \Delta S \sqrt{S_{max}}. \end{aligned}$$

We can then upper bound the second term of (7.67):

$$\left| \sum_{i=1}^N M_i^{(N)} \bar{\mu}_i^{(N)}(z) - \frac{\rho_l}{4\sqrt{\pi}} \int_0^{+\infty} S^{1/2} \psi^{(N)}(z, S) dS \right| \leq \frac{\rho_l}{6\sqrt{\pi}} (1 + 2\sqrt{2}) \|\psi_0\|_{L^\infty(\mathbb{R}^+)} \sqrt{S_{max}} \Delta S,$$

and the proposition is proved. \square

Passage to the limit

We can then pass to the limit, using the techniques similar to ones of previous subsections:

Theorem 7.18 *There exists a scalar c and functions θ , α and μ_i in $C^{2+\delta}(\mathbb{R})$ solution of the system (\mathcal{S}_0) . Moreover, $\tilde{B}_M > 0$.*

Proof. – The constants c^- , c^+ of Theorem 7.4 are independent of N . We then have the estimates, for all $N \in \mathbb{N}^*$:

$$0 < c^- \leq c^{(N)} \leq c^+, \quad 0 \leq \alpha^{(N)} \leq 1, \quad 0 \leq -\theta^{(N)'} \leq \tilde{k}(1) + \frac{2}{\kappa}, \quad B_M^{(N)} \geq 0.$$

Because $\tilde{R}_S(\theta^{(N)}, \alpha^{(N)})$ is bounded by the constant $\varphi(2 + \delta)/\delta$ independent of N and z , it is easy to have upper bounds independent of N for $\|\alpha^{(N)'}\|_{L^\infty(\mathbb{R})}$ and then for $\|\theta^{(N)}\|_{C^{2+\delta}(\mathbb{R})}$ and $\|\alpha^{(N)}\|_{C^2(\mathbb{R})}$. As for Theorems 7.15 and 7.16, there exists a scalar c , functions $\theta \in C^{2+\delta}(\mathbb{R})$ and $\alpha \in C^2(\mathbb{R})$ and subsequences $c^{(N_k)}$, $\theta^{(N_k)}$ and $\alpha^{(N_k)}$ which converge to c , θ and α , the convergence being C^2 in all bounded interval for the functions.

Let prove that the function $\psi^{(N_k)}$ have also a limit. We know that, for $z \geq 0$:

$$|\tilde{R}_S(\theta^{(N_k)}(z), \alpha^{(N_k)}(z))| \leq \frac{\varphi}{\delta} (\mathcal{N} + 1) \theta^{(N_k)}(z) = \theta_c \exp\left(-\frac{c^{(N_k)}}{\kappa} z\right) \leq \theta_c \exp\left(-\frac{c^-}{\kappa} z\right),$$

and, in the same way

$$|\tilde{R}_S(\theta(z), \alpha(z))| \leq \theta_c \exp\left(-\frac{c^-}{\kappa} z\right).$$

Then $\tilde{R}_S(\theta^{(N_k)}, \alpha^{(N_k)})$ converge uniformly to $\tilde{R}_S(\theta, \alpha)$. So, the characteristic $X^{(N_k)}(z, S)$ converges to $X(z, S) = S + \frac{1}{c} \int_z^{+\infty} \tilde{R}_S(\theta(y), \alpha(y)) dy$ and $\psi^{(N_k)}(z, S) = \psi_0(X^{(N_k)}(z, S))$ converges to $\psi(z, S) = \psi_0(X(z, S))$. Those convergences are uniform in $S \in \mathbb{R}^+$. So:

$$\lim_{k \rightarrow \infty} \frac{\rho_l}{4\sqrt{\pi}} \int_0^{+\infty} S^{1/2} \psi^{(N_k)}(z, S) dS = \frac{\rho_l}{4\sqrt{\pi}} \int_0^{+\infty} S^{1/2} \psi(z, S) dS$$

and because of Proposition 7.17, θ , α , ψ , c are solution of (\mathcal{S}_0) .

We only have to find the limits of the functions θ and α at $\pm\infty$. We saw that for $z \geq 0$, $\theta(z) = \theta_c \exp(-cz/\kappa)$ and $\lim_{z \rightarrow +\infty} \theta(z) = 0$. Because θ has a limit at $-\infty$ and because of the equation on θ , we have $\lim_{z \rightarrow -\infty} \alpha(z) = 0$. Moreover $\tilde{R}_S(\theta(z), \alpha(z))$ tends to 0 as z tends to $+\infty$. Then $\lim_{z \rightarrow +\infty} \alpha(z) = \tilde{Y}_{F_S}(0) = \alpha^\infty$. We also have

$$\begin{aligned} \sum \mu_i^{(N_k)} &= \sum \bar{\mu}_i^{(N_k)} + O(N_k) = \frac{\rho_l}{6\sqrt{\pi}} \int_0^{+\infty} S^{3/2} \psi^{(N_k)}(z, S) dS + O(N_k) \\ &\rightarrow \frac{\rho_l}{6\sqrt{\pi}} \int_0^{+\infty} S^{3/2} \psi(z, S) dS. \end{aligned}$$

Then

$$\theta + \alpha + \frac{\rho_l}{6\sqrt{\pi}} \int_0^{+\infty} S^{3/2} \psi(z, S) dS \geq 1.$$

As for $\psi^{(N_k)}(z, S)$, $\psi(z, S) = 0$ for sufficiently large z and then $\theta(z) + \alpha(z) \geq 1$. Then, necessarily, $\lim_{z \rightarrow -\infty} \theta(z) = 1$ and the theorem is proved. \square

7.7 Conclusion

In this paper, we have proved the existence of traveling wave solution for the system of partial differential equations (\mathcal{PDE}) of mixed type hyperbolic-parabolic describing the propagation of a plane flame in a polydisperse fuel spray. Let us recall the system satisfied by the traveling wave solution profiles :

$$(S_0) \quad \begin{cases} \kappa \theta'' + c \theta' + \tilde{k}(\theta) \alpha = 0, \\ D \alpha'' + c \alpha' - \tilde{k}(\theta) \alpha + S^m(z, \theta, \alpha) = 0, \\ c \partial_z \psi + \tilde{R}_S(\theta, \alpha) \partial_S \psi = 0, \quad S \geq 0, \end{cases}$$

with the source term:

$$S^m(z, \theta, \alpha) = \frac{\rho_l}{4\sqrt{\pi}} \tilde{R}_S(\theta, \alpha) \int_0^{+\infty} S^{1/2} \psi(z, S) dS,$$

and with the boundary conditions at infinity:

$$(L_0) \quad \begin{cases} \theta(+\infty) = 0, \quad \alpha(+\infty) = \alpha^\infty, \quad \psi(+\infty, S) = \psi_0(S), \\ \theta(-\infty) = 1, \quad \alpha(-\infty) = 0, \quad \psi(-\infty, S) = 0. \end{cases}$$

The originality of the present contribution is fourfold. First, from the modeling point of view, we use a detailed model, coupling a thermo-diffusive model for the gaseous phase to a kinetic description of the vaporization of a polydisperse spray of liquid fuel droplets. More specifically, we obtain the existence of a solution under the condition that Lewis number is such that $Le \geq 1 + p$, where the positive real p only depends on the fuel saturated vapor mass fraction $Y_{F_s}(T)$ and on the temperature of the cold gas T_0 :

$$p = \max \left\{ \frac{(T - T_0) Y_{F_s}''(T)}{Y_{F_s}'(T)}, \quad T_0 \leq T \leq T_{eb} - \nu \right\} \quad \text{if } T_0 < T_{eb} - \nu$$

$$p = 0 \quad \text{if } T_0 \geq T_{eb} - \nu.$$

This condition insures that no condensation phenomenon is taking place. It is coherent with the chosen model; however, it would be very interesting to further investigate if this condition can be weakened so that the existence of the traveling wave persists down to $Le = 1$. Second, the use of Eulerian multi-fluid models in order to treat the droplet size phase space allows us to circumvent the difficulty of a non-local vaporization source term in the reactant parabolic equation. It is not only an interesting way of treating the vaporization process but, and this is the third aspect of the originality of the paper, it is compatible, with the addition of a droplet mass density diffusion process through some weak gaseous turbulent agitation and allows us to use the techniques of topological degree in unbounded domains for elliptic operators. In other terms, if we would first take the limit of an infinite number of sections in the discretization of the droplet size phase space, we could prove the existence of a traveling wave in the presence of a small turbulent agitation in the gaseous

phase resulting in a diffusion process at the level of the droplets. Four, we use a new way of perturbing the system of elliptic equations in order to define an elliptic, Fredholm and proper operator in weighted Hölder spaces, in such a way that the monotonicity and homotopies are treated in a much simpler way. Finally, this paper is a first step forward to providing the qualitative analysis of two-phase flame propagation in using models bridging the gap between too simplified theoretical models and practical applications.

7.8 Acknowledgments

The support of University Lyon 1 through a BQR Grant (2001-2002, Project Coordinator : M. Massot) and of CNRS through a Young Investigator Grant (M. Massot and V. Volpert) is gratefully acknowledged. The authors wish to thank Vitaly Volpert for several helpful discussions.

Bibliography

- [AS89] B. Abramzon and W.A. Sirignano. Droplet vaporization model for spray combustion calculations. *Int. J. Heat Mass Transfer*, 32:1605–1618, 1989.
- [BD02] P. Berthouaud and K. Domelevo. Existence et stabilité d’ondes planes pour un système de combustion diphasique monodimensionnel. prépublication 18, MIP UMR 5640, Toulouse, 2002.
- [BNS83] Henri Berestycki, Basil Nicolaenko, and Bruno Scheurer. Traveling wave solutions to reaction-diffusion systems modeling combustion. In *Nonlinear partial differential equations (Durham, N.H., 1982)*, pages 189–208. Amer. Math. Soc., Providence, R.I., 1983.
- [Bon97] Alexis Bonnet. Propagation of flames in the limit of zero ignition temperature. *Arch. Rational Mech. Anal.*, 138(3):205–238, 1997.
- [Bro86] Felix E. Browder. Degree theory for nonlinear mappings. In *Nonlinear functional analysis and its applications, Part 1 (Berkeley, Calif., 1983)*, pages 203–226. Amer. Math. Soc., Providence, RI, 1986.
- [BV99] Cristelle Barillon and Vitaly A. Volpert. Topological degree for a class of elliptic operators in R^n . *Topol. Methods Nonlinear Anal.*, 14(2):275–293, 1999.
- [CD97] J. F. Clouet and K. Domelevo. Solution of a kinetic stochastic equation modeling a spray in a turbulent gas flow. *Math. Models Methods Appl. Sci.*, 7(2):239–263, 1997.
- [Dan75] E. N. Dancer. Boundary-value problems for ordinary differential equations on infinite intervals. *Proc. London Math. Soc. (3)*, 30:76–94, 1975.
- [Dan77] E. N. Dancer. Boundary-value problems for ordinary differential equations of infinite intervals. II. *Quart. J. Math. Oxford Ser. (2)*, 28(109):101–115, 1977.
- [DS97] K. Domelevo and L. Sainsaulieu. A numerical method for the computation of the dispersion of a cloud of particles by a turbulent gas flow field. *J. Comput. Phys.*, 133(2):256–278, 1997.
- [Fen76] Christiano Clemente Fenske. Extensio gradus ad quasdam applicationes Fredholmii. *Mitt. Math. Sem. Giessen*, (Heft 121):65–70, 1976.
- [Gio99] Vincent Giovangigli. Plane laminar flames with multicomponent transport and complex chemistry. *Math. Models Methods Appl. Sci.*, 9(3):337–378, 1999.

- [GM98] Claude Godrèche and Paul Manneville, editors. *Hydrodynamics and nonlinear instabilities*. Cambridge University Press, Cambridge, 1998. With chapters by Bernard Castaing, P. Huerre and M. Rossi, Vincent Hakim, Stephan Fauve, and G. Joulin and P. Vidal.
- [GST93] J.B. Greenberg, I. Silverman, and Y. Tambour. On the origin of spray sectional conservation equations. *Combustion and Flame*, 93:90–96, 1993.
- [GST98] J.B. Greenberg, I. Silverman, and Y. Tambour. On droplet enhancement of the burning velocity of laminar premixed spray flames. *Combustion and Flame*, 113:271–273, 1998.
- [Isn74] C. A. S. Isnard. The topological degree on Banach manifolds. In *Global analysis and its applications (Lectures, Internat. Sem. Course, Internat. Centre Theoret. Phys., Trieste, 1972)*, Vol. II, pages 291–313. Internat. Atomic Energy Agency, Vienna, 1974.
- [KG97] A. Kalma and J. B. Greenberg. Special features of the combustion of a propagating flame in a polydisperse fuel spray cloud. *International Journal of Turbo and Jet Engines*, 14:201–216, 1997.
- [Lau02] Frédérique Laurent. Analyse numérique d’une méthode multi-fluide Eulérienne pour la description de sprays qui s’évaporent. *C. R. Math. Acad. Sci. Paris*, 334(5):417–422, 2002.
- [LL96] Elisabeth Logak and Vincent Loubeau. Travelling wave solutions to a condensed phase combustion model. *Asymptotic Anal.*, 12(4):259–294, 1996.
- [LM01] Frédérique Laurent and Marc Massot. Multi-fluid modeling of laminar poly-dispersed spray flames: origin, assumptions and comparison of the sectional and sampling methods. *Combust. Theory and Modelling*, 5:537–572, 2001.
- [LM02] F. Laurent and M. Massot. Numerical analysis of Eulerian multi-fluid models in the context of kinetic formulations for dilute evaporating sprays. in preparation, 2002.
- [LMV02] F. Laurent, M. Massot, and Vit. A. Volpert. Propagation of gaseous flames in the limit of small diffusion coefficients. prépublication, MAPLY, UMR 5585 Lyon, 2002. (<http://maply.univ-lyon1.fr/publis/publiv/2002/publis.html>).
- [LS34] S. Leray and J. Schauder. Topologie et équations fonctionnelles. *Ann. Sci. Ecole Norm. Sup.*, 113:45–78, 1934.
- [LSN⁺02] F. Laurent, V. Santoro, M. Noskov, A. Gomez, M.D. Smooke, and M. Massot. Accurate treatment of size distribution effects in polydispersed spray diffusion flames: multi-fluid modeling, computations and experiments. prépublication, MAPLY, UMR 5585 Lyon, 2002. (<http://maply.univ-lyon1.fr/publis/publiv/2002/publis.html>).
- [Mar86] Martine Marion. Mathematical study of a model with no ignition temperature for laminar plane flames. In *Reacting flows: combustion and chemical reactors, Part 2 (Ithaca, N.Y., 1985)*, pages 239–252. Amer. Math. Soc., Providence, RI, 1986.

- [MKGS98] M. Massot, M. Kumar, A. Gomez, and M. D. Smooke. Counterflow spray diffusion flames of heptane: computations and experiments. In *Proceedings of the 27th Symp. (International) on Combustion, The Comb. Institute*, pages 1975–1983, 1998.
- [Ree91] M. W. Reeks. On a kinetic equation for the transport of particles in turbulent flows. *Phys. Fluids*, 3:446–456, 1991.
- [RM02] J. Réveillon and M. Massot. Lagrangian/Eulerian analysis of the subgrid dispersion of vaporizing polydispersed sprays in turbulent flows. CTR summer, Center for Turbulence Research, Stanford University, 2002.
- [RMV01] J. Réveillon, M. Massot, and L. Vervisch. Direct numerical simulation of turbulent sprays. In *Proceedings of the workshop: Trends in Numerical and Physical Modeling for Industrial Multiphase Flows*, Sept. 2001.
- [RV00] J. Réveillon and L. Vervisch. Spray vaporization in nonpremixed turbulent combustion modeling: a single droplet model. *Combustion and Flame*, 121:75–90, 2000.
- [SGT91] I. Silverman, J. B. Greenberg, and Y. Tambour. Asymptotic analysis of a premixed polydisperse spray flame. *SIAM J. Appl. Math.*, 51(5):1284–1303, 1991.
- [Skr73] I. V. Skrypnik. Nonlinear elliptic equations of higher order. *Gamoqeneb. Math. Inst. Sem. Mohsen. Anotacie.*, (7):51–52, 1973.
- [VV89] A. I. Vol’pert and V. A. Vol’pert. Application of the theory of the rotation of vector fields to the investigation of wave solutions of parabolic equations. *Trudy Moskov. Mat. Obshch.*, 52:58–109, 247, 1989.
- [VV94] A. I. Vol’pert and V. A. Volpert. Construction of the Leray-Schauder degree for elliptic operators in unbounded domains. *Ann. Inst. H. Poincaré Anal. Non Linéaire*, 11(3):245–273, 1994.
- [VVC99] V. A. Volpert, A. I. Volpert, and J. F. Collet. Topological degree for elliptic operators in unbounded cylinders. *Adv. Differential Equations*, 4(6):777–812, 1999.
- [VVV94] Aizik I. Volpert, Vitaly A. Volpert, and Vladimir A. Volpert. *Traveling wave solutions of parabolic systems*. American Mathematical Society, Providence, RI, 1994. Translated from the Russian manuscript by James F. Heyda.
- [Wil58] F.A. Williams. Spray combustion and atomization. *Phys. Fluids*, 1:541–545, 1958.
- [Wil85] F.A. Williams. *Combustion Theory (Combustion Science and Engineering Series)*. ed F A Williams (Reading, MA: Addison-Wesley), 1985.
- [YC73] M. C. Yuen and L. W. Chen. On drag of evaporating liquid droplets. *Combustion Science and Technology*, 14:147–154, 1973.
- [ZBLM85] Ya. B. Zel’dovich, G. I. Barenblatt, V. B. Librovich, and G. M. Makhviladze. *The mathematical theory of combustion and explosions*. Consultants Bureau [Plenum], New York, 1985. Translated from the Russian by Donald H. McNeill.

- [ZFK38] Ya. B. Zel'dovich and D. A. Frank-Kamenetskii. A theory of thermal propagation of flame. *Acta Physicochim*, 9:341–350, 1938.

Chapitre 8

Conclusions et Perspectives

8.1 Conclusions

Ce travail de thèse est intitulé “modélisation mathématique et numérique de la combustion de brouillards de gouttes polydispersés”. On y développe en effet des modèles multi-fluides eulériens pour la phase liquide et on réalise leur analyse numérique et mathématique. Cependant, si la première application visée de ces modèles est la combustion de brouillards de gouttes, ils modélisent en fait une gamme plus large de configurations : les écoulements à inclusions dispersées. D’autres applications sont alors possibles : la modélisation des particules, et en particulier leur coalescence, dans les Boosters d’Ariane, des applications à l’astronomie pour la formation des planètes, mais aussi des applications médicales pour les sprays ou encore des applications agricole pour l’épandage des insecticides.

Sur le plan de la modélisation, ce travail a abouti à une réelle compréhension de l’origine des méthodes multi-fluides eulériennes pour la description des brouillards de gouttes polydispersés et de leurs hypothèses sous-jacentes. Cette compréhension a permis d’en déterminer les limitations, mais aussi d’étendre le modèle : on a ainsi obtenu le premier modèle eulérien capable de décrire des interactions entre gouttes, comme la coalescence. De plus, ces méthodes multi-fluides eulériennes ont été optimisées, et validées par des comparaisons expérimentales et numériques sur des cas tests de flammes diphasiques laminares.

Sur le plan numérique, on a montré que la méthode multi-fluides eulérienne de type sectionnelle, pour la description de l’évaporation des gouttes est d’ordre 1 en le pas de discrétisation de l’espace des tailles de gouttes, moyennant certaines conditions de compatibilités. On a donné également la meilleure manière de faire cette discrétisation, dans un cas général. Enfin, cette analyse permet d’introduire de nouveaux modèles, d’ordre plus élevés.

Sur le plan des mathématiques, on a montré l’existence d’onde progressive monodimensionnelle pour un modèle couplé thermo-diffusif-cinétique décrivant la propagation de flamme plane dans un brouillard de gouttes polydispersé. Le modèle décrit permet de faire le lien entre les modèles numériques pour des simulations réalistes et ceux qui sont utilisés pour des études mathématiques. C’est le premier pas dans l’étude des propriétés qualitatives des flammes en présence d’un brouillard de gouttes polydispersé.

On peut remarquer que ce sont les modèles développés pour la description des brouillards de gouttes, et leur analyse numérique, qui ont rendu possible une analyse mathématique de phénomènes de propagations de flammes. C’est ce qui fait la cohérence de l’ensemble de ces travaux.

8.2 Perspectives

Sur les trois aspects abordés tout au long de ce travail s'ouvrent des perspectives.

8.2.1 Modélisation des écoulements à inclusions dispersés - Calcul scientifique

Dans le chapitre 3, on a pu prendre en compte la coalescence des gouttes avec les méthodes multi-fluides eulériennes, ouvrant alors la voie à d'autres extensions. Ainsi, dans le cadre de son stage de DEA encadré par M. Massot et P. Villedieu, G. Dufour a étendu ces méthodes à la description de la fragmentation [Duf02]. On peut également envisager de prendre en compte des interactions gouttes-paroi.

D'autre part, une évaluation est nécessaire de l'erreur commise par les modèles multi-fluides eulériens lorsque les hypothèses de l'approche sectionnelle ne sont pas vérifiées. Elle est en cours, sur des cas 2D de tourbillons.

Enfin, des travaux sur l'extension de ces modèles à la turbulence sont actuellement réalisés par K. Domelevo, M. Massot, J. Réveillon. Ils sont l'étape suivante vers la modélisation et la simulation de situations industrielles, comme les réacteurs d'un futur avion supersonique.

8.2.2 Analyse numériques

Une analyse asymptotique de la méthode sectionnelle, pour un pas de discrétisation de l'espace des tailles de gouttes tendant vers 0, a été menée dans le chapitre 5 et permet de donner la meilleure manière de faire la discrétisation. Parallèlement, dans le chapitre 3, on a obtenu une manière de discrétiser 'correctement' la distribution, afin d'avoir une bonne précision pour un faible nombre de sections, et donc un faible coût. Pour faire le lien entre ces deux approches d'autres méthodes multi-fluides eulériennes sont en cours de développement. Il s'agit de considérer de moment de la distribution, dans chaque section. Ces méthodes, d'ordre plus élevés, ont aussi pour but de réduire la diffusion numérique de la méthode sectionnelle. Ces études se poursuivent.

Les systèmes à discrétiser (modèle semi-cinétique) sont des systèmes types gaz sans pression, déjà étudiés dans des cas 1D et 2D [Bou94] [BJL02]. Cependant, dans le cas turbulent, ces systèmes sont alors du type gaz avec pression et demandent des études supplémentaires.

8.2.3 Propagation de flammes

Dans le chapitre 7, on a montré l'existence de la propagation de flamme plane dans un brouillard de gouttes polydispersé, pour un nombre de Lewis supérieur à $1 + p$, où p est un réel positif ou nul, ne dépendant que de la température des gaz froids et de la fraction massique de vapeur saturante. Il serait très intéressant de savoir si cette condition sur le nombre de Lewis peut être affaiblie et si ces flammes se propageant existent encore jusqu'à $Le = 1$.

D'autre part, ce résultat d'existence ouvre sur des perspectives d'études de propriétés qualitatives de telles flammes, comme des études de stabilité. Il amène également à des études asymptotiques, dans la limite des hautes énergies d'activation, pour l'évaluation de la vitesse d'onde.

Enfin, l'étape suivante consiste à enrichir le modèle en tenant compte de la perte de chaleur dans le gaz, due à l'évaporation des gouttes. Les méthodes mises en œuvre risquent en effet de ne pas s'appliquer directement à ce cas qui ne garantit pas nécessairement la monotonie du profil de température.

Bibliographie

- [BJL02] F. Bouchut, S. Jin, and X. Li. Numerical approximations of pressureless and isothermal gas dynamics. *SIAM J. Num. Anal.*, 2002. to appear.
- [Bou94] F. Bouchut. On zero pressure gas dynamics. In *Advances in kinetic theory and computing*, pages 171–190. World Sci. Publishing, River Edge, NJ, 1994.
- [Duf02] Guillaume Dufour. Un modèle multi-fluide eulérien pour la fragmentation de gouttes dans un spray dense. rapport de DEA, Université Paul Sabatier Toulouse III, ONERA Centre de Toulouse, MAPLY Université Claude Bernard Lyon 1, 2002.

Bibliographie Générale

- [Ach99] P. Achim. *Simulation de collisions, coalescence et rupture de gouttes par une approche lagrangienne : application aux moteurs à propergol solide*. PhD thesis, Faculté des Sciences de l'Université de Rouen, 1999.
- [AOB89] A.A. Amsden, P. J. O'Rourke, and T. D. Butler. Kiva II, a computer program for chemically reactive flows with sprays. Technical Report LA-11560-MS, Report Los Alamos National Laboratory, Los Alamos, New Mexico, 1989.
- [AP90] N. Ashgriz and J. Y. Poo. Coalescence and separation in binary collisions of liquid droplets. *Journal of Fluid Mechanics*, 221 :183–204, 1990.
- [AS89] B. Abramzon and W.A. Sirignano. Droplet vaporization model for spray combustion calculations. *Int. J. Heat Mass Transfer*, 32 :1605–1618, 1989.
- [BBL93] Henri Berestycki, Alexis Bonnet, and Bernard Larrouturou. Unicité des flammes planes en chimie complexe. *C. R. Acad. Sci. Paris Sér. I Math.*, 317(12) :1185–1190, 1993.
- [BD02] P. Berthonnaud and K. Domelevo. Existence et stabilité d'ondes planes pour un système de combustion diphasique monodimensionnel. prépublication 18, MIP UMR 5640, Toulouse, 2002.
- [BDGR00] R. Ben-Dakhli, V. Giovangigli, and D. Rosner. Soret effect in counterflow spray diffusion flames. In *Proceedings of the 28th Symp. (International) on Combustion, The Comb. Institute*, 2000.
- [BDGR02] R. Ben-Dakhli, V. Giovangigli, and D. Rosner. Soret effects in laminar counterflow spray diffusion flames. *Combust. Theory and Modelling*, 6 :1–17, 2002.
- [Bir94] G. A. Bird. Molecular gas dynamics and the direct simulation of gas flows. *Oxford science publications*, 42, 1994.
- [BJL02] F. Bouchut, S. Jin, and X. Li. Numerical approximations of pressureless and isothermal gas dynamics. *SIAM J. Num. Anal.*, 2002. to appear.
- [BLS94] A. Bonnet, B. Larrouturou, and L. Sainsaulieu. Sur la stabilité des flammes planes stationnaires dans un cas de solutions multiples lorsque le nombre de Lewis est inférieur à 1. In *Les grands systèmes des sciences et de la technologie*, pages 107–118. Masson, Paris, 1994.
- [BNS83] Henri Berestycki, Basil Nicolaenko, and Bruno Scheurer. Traveling wave solutions to reaction-diffusion systems modeling combustion. In *Nonlinear partial differential equations (Durham, N.H., 1982)*, pages 189–208. Amer. Math. Soc., Providence, R.I., 1983.
- [Bon92] Alexis Bonnet. Travelling waves for planar flames with complex chemistry reaction network. *Comm. Pure Appl. Math.*, 45(10) :1271–1302, 1992.

- [Bon95] Alexis Bonnet. Non-uniqueness for flame propagation when the Lewis number is less than 1. *European J. Appl. Math.*, 6(4) :287–306, 1995.
- [Bon97] Alexis Bonnet. Propagation of flames in the limit of zero ignition temperature. *Arch. Rational Mech. Anal.*, 138(3) :205–238, 1997.
- [Bou94] F. Bouchut. On zero pressure gas dynamics. In *Advances in kinetic theory and computing*, pages 171–190. World Sci. Publishing, River Edge, NJ, 1994.
- [Bou02] Joan Boulanger. *Caractérisation de l'extrémité d'une flamme de diffusion. Analyse asymptotique et simulation directe de la combustion partiellement prémélangée*. PhD thesis, Laboratoire de Mécanique des Fluides Numérique, UMR 6614 CNRS CORIA, 2002.
- [Bre83] Haïm Brezis. *Analyse fonctionnelle*. Masson, Paris, 1983. Théorie et applications. [Theory and applications].
- [Bro86] Felix E. Browder. Degree theory for nonlinear mappings. In *Nonlinear functional analysis and its applications, Part 1 (Berkeley, Calif., 1983)*, pages 203–226. Amer. Math. Soc., Providence, RI, 1986.
- [BSJL72] P.R. Brazier-Smith, S.G. Jennings, and J. Latham. The interaction falling water drops : coalescence. *Proceedings of the Royal Society*, 326 :393–408, 1972.
- [BV99] Cristelle Barillon and Vitaly A. Volpert. Topological degree for a class of elliptic operators in R^n . *Topol. Methods Nonlinear Anal.*, 14(2) :275–293, 1999.
- [CD97] J. F. Clouet and K. Domelevo. Solution of a kinetic stochastic equation modeling a spray in a turbulent gas flow. *Math. Models Methods Appl. Sci.*, 7(2) :239–263, 1997.
- [Cer88] Carlo Cercignani. *The Boltzmann equation and its applications*. Springer-Verlag, New York, 1988.
- [CGW78] R. Clift, J. R. Grace, and M. E. Weber. *Bubbles, Drop and Particles*. Academic Press, New York, 1978.
- [Cha00] P. H. Chavanis. Trapping of dust by coherent vortices in the solar nebula. *Astron. Astrophys.*, 356 :1089–1111, 2000.
- [CIP94] Carlo Cercignani, Reinhard Illner, and Mario Pulvirenti. *The mathematical theory of dilute gases*. Springer-Verlag, New York, 1994.
- [CL01] G.-Q. Chen and H. Liu. Formation of delta-shocks and vacuum states in the vanishing pressure limit of solutions to the isentropic Euler equations. report, UCLA CAM, 2001.
- [CP83] R. Caflisch and G. C. Papanicolaou. Dynamic theory of suspensions with Brownian effects. *SIAM J. Appl. Math.*, 43(4) :885–906, 1983.
- [CS90] G. Continillo and W. A. Sirignano. Counterflow spray combustion modeling. *Combustion and Flame*, 81 :325–340, 1990.
- [CSS77] C. T. Crowe, M. P. Sharma, and D. E. Stock. The particle-source-in cell (psi-cell) model for gas-droplet flows. *J. Fluids Eng.*, pages 325–332, 1977.
- [Dan75] E. N. Dancer. Boundary-value problems for ordinary differential equations on infinite intervals. *Proc. London Math. Soc.* (3), 30 :76–94, 1975.

- [Dan77] E. N. Dancer. Boundary-value problems for ordinary differential equations of infinite intervals. II. *Quart. J. Math. Oxford Ser. (2)*, 28(109) :101–115, 1977.
- [Des00a] Bruno Després. About some genuinely conservative Eulerian-Lagrangian models for compressible multiphase flows. In *Proceedings of the workshop : Trends in Numerical and Physical Modeling for Industrial Multiphase Flows*, Sept. 2000.
- [Des00b] L. Desvillettes. About the modelling of complex flows by gas-particle methods. In *Proceedings of the workshop : Trends in Numerical and Physical Modeling for Industrial Multiphase Flows*, Cargèse, 2000.
- [Deu74] P. Deuflhard. A modified Newton method for the solution of ill-conditioned systems of nonlinear equations with application to multiple shooting. *Numer. Math.*, 22 :289–315, 1974.
- [DFV⁺00] J. Dupays, Y. Fabignon, P. Villedieu, G. Lavergne, and J. L. Estivalezes. Some aspects of two-phase flows in solid propellant rocket motors, in solid propellant chemistry, combustion and interior ballistics. *Progress in Astronautics and Aeronautics*, 185, 2000.
- [DG88] N. Darabiha and V. Giovangigli. Vector computers and complex chemistry combustion. *Mathematical Modeling in Combustion and Related Topics*, pages 491–503, 1988.
- [Dom98] K. Domelevo. The kinetic-sectional approach for evaporating sprays. prépublication 98-20, MIP UMR 5640, Toulouse, 1998.
- [Dom01] K. Domelevo. The kinetic sectional approach for noncolliding evaporating sprays. *Atomization and Sprays*, 11 :291–303, 2001.
- [Dre83] D. A. Drew. Mathematical modeling of two-phase flow. *Ann. Rev. Fluid. Mech.*, 15 :261–91, 1983.
- [DS97] K. Domelevo and L. Sainsaulieu. A numerical method for the computation of the dispersion of a cloud of particles by a turbulent gas flow field. *J. Comput. Phys.*, 133(2) :256–278, 1997.
- [Duf02] Guillaume Dufour. Un modèle multi-fluide eulérien pour la fragmentation de gouttes dans un spray dense. rapport de DEA, Université Paul Sabatier Toulouse III, ONERA Centre de Toulouse, MAPLY Université Claude Bernard Lyon 1, 2002.
- [Duk80] John K. Dukowicz. A particle-fluid numerical model for liquid sprays. *J. Comput. Phys.*, 35(2) :229–253, 1980.
- [Dur99] Dale R. Durran. *Numerical methods for wave equations in geophysical fluid dynamics*. Springer-Verlag, New York, 1999.
- [EG94] Alexandre Ern and Vincent Giovangigli. *Multicomponent transport algorithms*. Springer-Verlag, Berlin, 1994.
- [EG98] Alexandre Ern and Vincent Giovangigli. Thermal diffusion effects in hydrogen-air and methane-air flames. *Combust. Theory and Modelling*, 2 :349–372, 1998.
- [ERD00] Valero Eusebio, Mario Ricchiuto, and Gérard Degrez. Two-phase computations using a two-fluid model and fluctuation splitting schemes. In *Proceedings of the workshop : Trends in Numerical and Physical Modeling for Industrial Multiphase Flows*, Sept. 2000.
- [Fen76] Christiano Clemente Fenske. Extensio gradus ad quasdam applicationes Fredholmii. *Mitt. Math. Sem. Giessen*, (Heft 121) :65–70, 1976.

- [GAT86] J.B. Greenberg, D. Albagli, and Y. Tambour. An opposed jet quasi-monodisperse spray diffusion flame. *Combust. Sci. Technol.*, 50 :255–270, 1986.
- [GB78] H. C. Gupta and F. V. Bracco. Numerical computations of two-dimensional unsteady sprays for applications to engines. *AIAA Journal*, 16(10) :1053–1061, 1978.
- [GDS⁺96] L. P. Gao, Y. D’Angelo, I. Silverman, A. Gomez, and M. D. Smooke. Quantitative comparison of detailed numerical computations and experiments in counterflow spray diffusion flames. In *Proceedings of the 26th Symp. (International) on Combustion, The Comb. Institute*, pages 1739–1746, 1996.
- [Gio88] Vincent Giovangigli. *Structure et Extinctions de Flamme Laminaires Prémélangées*. Thèse d’État, Université Pierre et Marie Curie, Paris VI, 1988.
- [Gio99a] Vincent Giovangigli. *Multicomponent flow modeling*. Birkhäuser Boston Inc., Boston, MA, 1999.
- [Gio99b] Vincent Giovangigli. Plane laminar flames with multicomponent transport and complex chemistry. *Math. Models Methods Appl. Sci.*, 9(3) :337–378, 1999.
- [GM98a] Vincent Giovangigli and Marc Massot. Asymptotic stability of equilibrium states for multicomponent reactive flows. *Math. Models Methods Appl. Sci.*, 8(2) :251–297, 1998.
- [GM98b] Claude Godrèche and Paul Manneville, editors. *Hydrodynamics and nonlinear instabilities*. Cambridge University Press, Cambridge, 1998. With chapters by Bernard Castaing, P. Huerre and M. Rossi, Vincent Hakim, Stephan Fauve, and G. Joulin and P. Vidal.
- [God53] G. A. E. Godsave. Studies of the combustion of drops in a fuel spray : the burning of single drops of fuel. In *Proceedings of the 4th Symp. (International) on Combustion, The Comb. Institute*, pages 818–830, Baltimore, 1953.
- [Gre95] Emmanuel Grenier. Existence globale pour le système des gaz sans pression. *C. R. Acad. Sci. Paris Sér. I Math.*, 321(2) :171–174, 1995.
- [GST93] J.B. Greenberg, I. Silverman, and Y. Tambour. On the origin of spray sectional conservation equations. *Combustion and Flame*, 93 :90–96, 1993.
- [GST98] J.B. Greenberg, I. Silverman, and Y. Tambour. On droplet enhancement of the burning velocity of laminar premixed spray flames. *Combustion and Flame*, 113 :271–273, 1998.
- [Gue01] J. F. Guery. Simulation eulérienne des écoulements diphasiques dans les moteurs à propergol solide. In *Modélisation Numérique de Brouillards Polydispersés*, Dec. 2001.
- [HDM75] G. L. Hubbard, V. E. Denny, and A. F. Mills. Droplet evaporation : effects of transients and variable properties. *Int. J. Heat Mass Transfer*, 18 :1003–1008, 1975.
- [HF93] L.-P. Hsiang and G. M. Faeth. Drop properties after secondary breakup. *Int. J. Multiphase Flow*, 19(5) :721–735, 1993.
- [Hin83] Alan C. Hindmarsh. ODEPACK, a systematized collection of ODE solvers. In *Scientific computing (Montreal, Que., 1982)*, pages 55–64. IMACS, New Brunswick, NJ, 1983.
- [HMD97] T. J. Held, A. J. Marchese, and F. L. Dryer. A semi-empirical reaction mechanism for n-heptane oxidation and pyrolysis. *Comb. Sci. and Tech.*, 123 :107–146, 1997.

- [HNW87] E. Hairer, S. P. Nørsett, and G. Wanner. *Solving ordinary differential equations. I*. Springer-Verlag, Berlin, 1987. Nonstiff problems.
- [HSC97] R. J. Hall, M. D. Smooke, and M. B. Colket. Predictions of soot dynamics in opposed jet diffusion flames, a tribute to irvin glassman. In *Physical and Chemical Aspects of Combustion*, chapter 8, pages 189–230. Gordon and Breach Science Publishers, 1997.
- [HV98] J. Hylkema and P. Villedieu. A random particle method to simulate coalescence phenomena in dense liquid sprays. In *Lecture Notes in Physics*, volume 515, pages 488–493, Arcachon, France, 1998. Proc. 16th Int. Conf. on Num. Meth. in Fluid Dyn.
- [HW78] L. C. Hasselman and C. K. Westbrook. A theoretical model for fuel injection in stratified charge engines. *SAE paper 780138*, 1978.
- [HW91] E. Hairer and G. Wanner. *Solving ordinary differential equations. II*. Springer-Verlag, Berlin, 1991. Stiff and differential-algebraic problems.
- [Hyl99] J. Hylkema. *Modélisation cinétique et simulation numérique d'un brouillard dense de gouttelettes. Application aux propulseurs à poudre*. PhD thesis, ENSAE, 1999.
- [Isn74] C. A. S. Isnard. The topological degree on Banach manifolds. In *Global analysis and its applications (Lectures, Internat. Sem. Course, Internat. Centre Theoret. Phys., Trieste, 1972)*, Vol. II, pages 291–313. Internat. Atomic Energy Agency, Vienna, 1974.
- [Kan63] Ya. I. Kanel. The stationary solution of the set of equations in the theory of combustion. *Dokl. Phys. Chem.*, 149 :241–243, 1963.
- [KG97] A. Kalma and J. B. Greenberg. Special features of the combustion of a propagating flame in a polydisperse fuel spray cloud. *International Journal of Turbo and Jet Engines*, 14 :201–216, 1997.
- [Lau02] Frédérique Laurent. Analyse numérique d'une méthode multi-fluide Eulérienne pour la description de sprays qui s'évaporent. *C. R. Math. Acad. Sci. Paris*, 334(5) :417–422, 2002.
- [LeV92] Randall J. LeVeque. *Numerical methods for conservation laws*. Birkhäuser Verlag, Basel, second edition, 1992.
- [LL96] Elisabeth Logak and Vincent Loubeau. Travelling wave solutions to a condensed phase combustion model. *Asymptotic Anal.*, 12(4) :259–294, 1996.
- [LLW91] G. T. Linteris, P. A. Libby, and F. A. Williams. Droplet dynamics in a nonuniform flow field. *Combustion Science and Technology*, 80 :468–478, 1991.
- [LLW93] S. C. Li, P. A. Libby, and F. A. Williams. Spray structure in counterflowing streams with and without a flame. *Combustion and Flame*, 94 :161–177, 1993.
- [LM01] Frédérique Laurent and Marc Massot. Multi-fluid modeling of laminar poly-dispersed spray flames : origin, assumptions and comparison of the sectional and sampling methods. *Combust. Theory and Modelling*, 5 :537–572, 2001.
- [LM02a] F. Laurent and M. Massot. Numerical analysis of Eulerian multi-fluid models in the context of kinetic formulations for dilute evaporating sprays. in preparation, 2002.
- [LM02b] F. Laurent and M. Massot. Propagation of plane polydispersed spray flames. prépublication, MAPLY, UMR 5585 Lyon, 2002. (<http://maply.univ-lyon1.fr/publis/publiv/2002/publis.html>).

- [LMV01] F. Laurent, M. Massot, and P. Villedieu. Eulerian multi-fluid modeling for the numerical simulation of polydisperse dense liquid spray. prépublication, soumis, MAPLY, UMR 5585 Lyon, 2001. (<http://maply.univ-lyon1.fr/publis/publiv/2001/335/publi.ps.gz>).
- [LMV02] F. Laurent, M. Massot, and Vit. A. Volpert. Propagation of gaseous flames in the limit of small diffusion coefficients. prépublication, MAPLY, UMR 5585 Lyon, 2002. (<http://maply.univ-lyon1.fr/publis/publiv/2002/publis.html>).
- [LS34] S. Leray and J. Schauder. Topologie et équations fonctionnelles. *Ann. Sci. Ecole Norm. Sup.*, 113 :45–78, 1934.
- [LSN⁺02] F. Laurent, V. Santoro, M. Noskov, A. Gomez, M.D. Smooke, and M. Massot. Accurate treatment of size distribution effects in polydispersed spray diffusion flames : multi-fluid modeling, computations and experiments. prépublication, MAPLY, UMR 5585 Lyon, 2002. (<http://maply.univ-lyon1.fr/publis/publiv/2002/publis.html>).
- [Mar85] Martine Marion. Qualitative properties of a nonlinear system for laminar flames without ignition temperature. *Nonlinear Anal.*, 9(11) :1269–1292, 1985.
- [Mar86] Martine Marion. Mathematical study of a model with no ignition temperature for laminar plane flames. In *Reacting flows : combustion and chemical reactors, Part 2 (Ithaca, N.Y., 1985)*, pages 239–252. Amer. Math. Soc., Providence, RI, 1986.
- [Mas96] M. Massot. *Modélisation Mathématique et Numérique de la Combustion des Mélanges Gazeux*. PhD thesis, Thèse de l’Ecole Polytechnique, 1996.
- [Mas02] M. Massot. Singular perturbation analysis for the reduction of complex chemistry in gaseous mixtures using the entropic structure. *Discrete and Continuous Dynamical Systems - Series B*, 2(3) :433–456, 2002.
- [MKGS98] M. Massot, M. Kumar, A. Gomez, and M. D. Smooke. Counterflow spray diffusion flames of heptane : computations and experiments. In *Proceedings of the 27th Symp. (International) on Combustion, The Comb. Institute*, pages 1975–1983, 1998.
- [ML01] M. Massot and F. Laurent. Derivation of Eulerian multi-fluid models from a kinetic description for polydisperse sprays. In *Proceedings of the workshop : Trends in Numerical and Physical Modeling for Industrial Multiphase Flows*, Sept. 2001.
- [MLB⁺02] M. Massot, F. Laurent, J.-P. Bertoglio, M. Lance, J.-L. Marié, and L. Shao. Modélisation des couplages "dynamiques de gouttes/évaporation" pour la prédiction des champs de concentration en combustion diphasique polydispersée. In *Recherche Aéronautique sur le Supersonique, 1er Colloque National*, pages 227–232, 2002.
- [MSL⁺98] C. McEnally, A. Shaffer, M. B. Long, L. Pfefferle, M.D. Smooke, M.B. Colket, and R.J. Hall. Computational and experimental study of soot formation in a coflow laminar ethylene diffusion flame. In *Proceedings of the 27th Symp. (International) on Combustion, The Comb. Institute*, pages 664–672, 1998.
- [MV01] Marc Massot and Philippe Villedieu. Modélisation multi-fluide eulérienne pour la simulation de brouillards denses polydispersés. *C. R. Acad. Sci. Paris Sér. I Math.*, 332(9) :869–874, 2001.
- [MVF02] D. L. Marchisio, R. D. Vigil, and R. O. Fox. Quadrature method of moments for aggregation-breakage processes. *Journal of Colloid and Interface Science*, 2002. to appear.

- [Nov61] B. V. Novozhilov. The rate of propagation of the front of an exothermic reaction in a condensed phase. *Dokl. Phys. Chem.*, 141 :836–838, 1961.
- [OA87] P. J. O'Rourke and A. Amsden. The tab method for numerical calculation of spray droplet breakup. Technical Report 87545, Los Alamos National Laboratory, Los Alamos, New Mexico, 1987.
- [O'R81] P. J. O'Rourke. *Collective drop effects on vaporizing liquid sprays*. PhD thesis, Los Alamos National Laboratory 87545, University of Princeton, 1981.
- [Pli77] V. A. Pliss. *Integralnye mnozhestva periodicheskikh sistem differentsialnykh uravnenii*. 1977.
- [Ram00] D. Ramos. Un modèle à cinq équations : Application au cas test du robinet de ransom. In *Proceedings of the workshop : Trends in Numerical and Physical Modeling for Industrial Multiphase Flows*, Sept. 2000.
- [Rav85] P.-A. Raviart. An analysis of particle methods. In *Numerical methods in fluid dynamics (Como, 1983)*, pages 243–324. Springer, Berlin, 1985.
- [Ree91] M. W. Reeks. On a kinetic equation for the transport of particles in turbulent flows. *Phys. Fluids*, 3 :446–456, 1991.
- [RF00] Doraiswami Ramkrishna and Arnold G. Fredrickson. *Population Balances : Theory and Applications to Particulate Systems in Engineering*. Academic Press, 2000.
- [RHSK00] Rüger, Hohmann, Sommerfeld, and Kohnen. Euler/Lagrange calculations of turbulent sprays : the effect of droplet collisions and coalescence. *Atomization and Sprays*, 10(1), 2000.
- [RM02] J. Réveillon and M. Massot. Lagrangian/Eulerian analysis of the subgrid dispersion of vaporizing polydispersed sprays in turbulent flows. CTR summer, Center for Turbulence Research, Stanford University, 2002.
- [RMV01] J. Réveillon, M. Massot, and L. Vervisch. Direct numerical simulation of turbulent sprays. In *Proceedings of the workshop : Trends in Numerical and Physical Modeling for Industrial Multiphase Flows*, Sept. 2001.
- [Roq92] Jean-Michel Roquejoffre. Stability of travelling fronts in a model for flame propagation. II. Nonlinear stability. *Arch. Rational Mech. Anal.*, 117(2) :119–153, 1992.
- [RS95] Pierre-Arnaud Raviart and Lionel Sainsaulieu. A nonconservative hyperbolic system modeling spray dynamics. I. Solution of the Riemann problem. *Math. Models Methods Appl. Sci.*, 5(3) :297–333, 1995.
- [RV00] J. Réveillon and L. Vervisch. Spray vaporization in nonpremixed turbulent combustion modeling : a single droplet model. *Combustion and Flame*, 121 :75–90, 2000.
- [SCSG90] M. D. Smooke, J. Crump, K. Seshadri, and V. Giovangigli. Comparison between experimental measurements and numerical calculations of the structure of counterflow, diluted, methane-air, premixed flames. In *Proceedings of the 23rd Symp. (International) on Combustion, The Comb. Institute*, pages 503–511, 1990.
- [Sev01] Michael Sever. An existence theorem in the large for zero-pressure gas dynamics. *Differential Integral Equations*, 14(9) :1077–1092, 2001.
- [SG92] M. D. Smooke and V. Giovangigli. Numerical modeling of axisymmetric laminar diffusion flames. *Impact Comput. Sci. Eng.*, 4(1) :46–79, 1992.

- [SGT91] I. Silverman, J. B. Greenberg, and Y. Tambour. Asymptotic analysis of a premixed polydisperse spray flame. *SIAM J. Appl. Math.*, 51(5) :1284–1303, 1991.
- [Skr73] I. V. Skrypnik. Nonlinear elliptic equations of higher order. *Gamogeneb. Math. Inst. Sem. Mohsen. Anotacie.*, (7) :51–52, 1973.
- [Smo83] M. D. Smooke. Error estimate for the modified Newton method with applications to the solution of nonlinear, two-point boundary value problems. *J. Optim. Theory Appl.*, 39(4) :489–511, 1983.
- [SNLP02] Y. Sommerer, F. Nicoud, J. P. L egier, and T. Poinso. Simulations aux grandes  echelles de la combustion instationnaire dans les syst emes partiellement pr em elangs pauvres. In *Recherche A eronautique sur le Supersonique, 1er Colloque National*, pages 71–78, 2002.
- [Spa53] D. B. Spalding. The combustion of liquid fuels. In *Proceedings of the 4th Symp. (International) on Combustion, The Comb. Institute*, pages 847–864, Baltimore, 1953.
- [SR00] D. P. Schmidt and C. J. Rutland. A new droplet collision algorithm. *Journal of computational physics*, 164(1) :62–80, 2000.
- [THA76] J. R. Travis, F. H. Harlow, and A. A. Amsden. Numerical calculations of two-phase flows. *Nucl. Sci. Eng.*, 61 :1–10, 1976.
- [Tur96] S. R. Turns. An introduction to combustion : Concepts and applications. *McGraw-Hill Series in Mechanical Engineering*, 1996.
- [VBB02] A. Vallet, A. A. Burluka, and R. Borghi. Development of an Eulerian model for the "atomization" of a liquid jet. Technical report, Coria, Universit e de Rouen, 2002.
- [Ver96] P. Versaevl. *Combustion laminaire diphasique : Etude th eorique et exp erimentale*. PhD thesis, Th ese de l' cole Centrale Paris, 1996.
- [VH85] A. I. Vol'pert and S. I. Hudjaev. *Analysis in classes of discontinuous functions and equations of mathematical physics*. Martinus Nijhoff Publishers, Dordrecht, 1985.
- [VH97] Philippe Villedieu and Jouke Hylkema. Une m ethode particulaire al eatoire reposant sur une  equation cin etique pour la simulation num erique des sprays denses de gouttelettes liquides. *C. R. Acad. Sci. Paris S er. I Math.*, 325(3) :323–328, 1997.
- [VH00] Philippe Villedieu and Jouke Hylkema. Mod eles num eriques lagrangiens pour la phase dispers ee dans les propulseurs  a poudre. Rapport Final 1/3784.00/DTIM, ONERA, 2000.
- [Vil02] C edric Villani. *A review of mathematical topics in collisional kinetic theory*. S. Friedlander and D. Serre Eds., 2002. Handbook of Fluid Mechanics.
- [VP97] D. Veynante and T. Poinso. Reynolds averaged and large eddy simulation modeling for turbulent combustion. In *New tools in turbulence modelling (Les Houches, 1996)*, pages 105–140. Springer, Berlin, 1997.
- [VV89] A. I. Vol'pert and V. A. Vol'pert. Application of the theory of the rotation of vector fields to the investigation of wave solutions of parabolic equations. *Trudy Moskov. Mat. Obshch.*, 52 :58–109, 247, 1989.
- [VV94] A. I. Vol'pert and V. A. Volpert. Construction of the Leray-Schauder degree for elliptic operators in unbounded domains. *Ann. Inst. H. Poincar e Anal. Non Lin eaire*, 11(3) :245–273, 1994.

- [VVC99] V. A. Volpert, A. I. Volpert, and J. F. Collet. Topological degree for elliptic operators in unbounded cylinders. *Adv. Differential Equations*, 4(6) :777–812, 1999.
- [VVV94] Aizik I. Volpert, Vitaly A. Volpert, and Vladimir A. Volpert. *Traveling wave solutions of parabolic systems*. American Mathematical Society, Providence, RI, 1994. Translated from the Russian manuscript by James F. Heyda.
- [Wer95] K. L. Wert. A rationally-based correlation of mean fragment size for drop secondary breakup. *Int. J. Multiphase Flow*, 21(6) :1063–1071, 1995.
- [Wil58] F.A. Williams. Spray combustion and atomization. *Phys. Fluids*, 1 :541–545, 1958.
- [Wil85] F.A. Williams. *Combustion Theory (Combustion Science and Engineering Series)*. ed F A Williams (Reading, MA : Addison-Wesley), 1985.
- [WMR01] D. L. Wright, R. McGraw, and D. E. Rosner. Bivariate extension of the quadrature method of moments for modeling simultaneous coagulation and sintering of particle populations. *J. of Colloid and Interface Sci.*, 236 :242–251, 2001.
- [YC73] M. C. Yuen and L. W. Chen. On drag of evaporating liquid droplets. *Combustion Science and Technology*, 14 :147–154, 1973.
- [ZBLM85] Ya. B. Zel'dovich, G. I. Barenblatt, V. B. Librovich, and G. M. Makhviladze. *The mathematical theory of combustion and explosions*. Consultants Bureau [Plenum], New York, 1985. Translated from the Russian by Donald H. McNeill.
- [ZFK38] Ya. B. Zel'dovich and D. A. Frank-Kamenetskii. A theory of thermal propagation of flame. *Acta Physicochim*, 9 :341–350, 1938.

Mathematical and numerical modelisation of polydispersed spray flames

A Eulerian multi-fluid model is introduced in order to describe the evolution of polydispersed spray flames. It is rigorously derived from a kinetic level of description and has the capability to take into account droplets interactions, such as coalescence, an uncommon feature of Eulerian models. It is validated, in the case of diluted spray, by comparison with experimental measurements on laminar spray diffusion flames. It is also compared numerically with Lagrangian methods, in dense or diluted sprays cases. Moreover, its numerical analysis is conducted, in a case where the vaporization process is isolated. This analysis leads to the introduction of higher order methods, for the size space discretization. It also allows us to consider the propagation of planar polydispersed spray flames. This configuration is described by a reaction-diffusion system for a thermo-diffusive model of the gas, coupled with the kinetic model of the spray. The flame propagation is described by traveling waves for the whole system. To study the existence, we use topological degree methods for elliptic operators in unbounded domains. However, the kinetic model introduce an hyperbolic PDE. The results of the numerical analysis allows us to consider a discretization of the size space phase and yields to a finite dimensional dynamical system. We then add a diffusion coefficient in order to obtain an elliptic system and apply topological degree methods. Passing to the limit on the diffusion coefficient and then on the discretization step allows us to prove the existence of a planar propagating polydispersed spray flame.

Key words : diphasic combustion, polydispersed spray, numerical analysis, topological degree, reaction-diffusion

Modélisation mathématique et numérique de la combustion de brouillards de gouttes polydispersés

On introduit un modèle multi-fluides eulérien pour décrire l'évolution de sprays polydispersés dans des flammes diphasiques. Nous montrons que ce modèle peut être obtenu à partir d'un niveau cinétique de description. Il peut ainsi prendre en compte des interactions entre gouttes d'inerties différentes, comme la coalescence, ce qui n'avait jamais été fait avec un modèle eulérien. Il est validé par des comparaisons avec des mesures expérimentales pour le cas des sprays dilués sur des configurations de flammes laminaires de diffusion à contre-courant. Il est également comparé numériquement à des méthodes d'échantillonnages dans des cas de sprays dilués ou denses. D'autre part, son analyse numérique est menée dans un cas simplifié où seule subsiste l'évaporation. Cette analyse nous permet d'introduire d'autres méthodes numériques d'ordre arbitrairement élevé pour discrétiser l'espace des phases en taille et décrire l'évaporation. Elle nous permet aussi de considérer la propagation de flammes planes de prémélange, en présence d'un spray polydispersé. Cette configuration est décrite par un système de réaction-diffusion pour un modèle thermo-diffusif du gaz couplé au modèle cinétique du spray. La propagation de telles flammes est décrite par des ondes progressives du système complet. Pour en étudier l'existence, on utilise des méthodes de degré topologique pour des opérateurs elliptiques dans des domaines non bornés. Cependant, le modèle cinétique introduit une EDP hyperbolique. Les résultats d'analyse numérique permettent d'envisager une discrétisation de l'espace des tailles de gouttes, afin de se ramener à un système dynamique de dimension finie. Il reste à ajouter une diffusion dans la partie hyperbolique du système, afin d'obtenir un système elliptique et pouvoir appliquer une méthode de degré topologique. En passant à la limite sur la diffusion, puis sur le pas de discrétisation, on montre l'existence de flamme plane se propageant, en présence d'un spray polydispersé.

Discipline : Mathématiques

Mots-clés : combustion diphasique, brouillard polydispersé, analyse numérique, degré topologique, réaction-diffusion

Laboratoire : MAPLY (Mathématiques APliquées de LYon) - UMR 5585
Université Claude Bernard Lyon 1, Bâtiment Doyen Jean Braconnier
21, avenue Claude Bernard 69622 Villeurbanne Cedex