



HAL
open science

Développement de méthodes multi-échelles pour la simulation numérique des écoulements réactifs diphasiques

Olivier Thomine

► **To cite this version:**

Olivier Thomine. Développement de méthodes multi-échelles pour la simulation numérique des écoulements réactifs diphasiques. Dynamique des Fluides [physics.flu-dyn]. Université de Rouen, 2011. Français. NNT: . tel-00683632v1

HAL Id: tel-00683632

<https://theses.hal.science/tel-00683632v1>

Submitted on 29 Mar 2012 (v1), last revised 20 Apr 2017 (v3)

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 de Doctorat

présentée à la

Faculté des Sciences & Techniques de l'Université de Rouen

en vue de l'obtention du grade de

Docteur de l'Université de Rouen

Discipline : Sciences physiques

Spécialité : Mécanique des Fluides, Numérique et Énergétique
par

Olivier THOMINE

Développement de méthodes multi-échelles pour la
simulation numérique des écoulements réactifs
diphases

Soutenue le 02/11/2011

Devant le jury composé de :

J. Reveillon	Professeur des Universités, CORIA, Rouen	Directeur
A. Hadjadj	Professeur des Universités, CORIA, Rouen	Co-directeur
Y. D'Angelo	Professeur INSA, Rouen	Examinateur
L. Freret	Ingénieur de Recherche, LIP, Paris	Examinatrice
A. Mura	Chargé de Recherche, LCD, Poitiers	Rapporteur
B. Cuenot	Chef de Projet, CERFACS, Toulouse	Rapporteur
A. Chinnayya	Maître de conférences, CORIA, Rouen	Invité

Résumé

L'objectif de cette thèse est de développer des méthodes numériques dans un code de simulation numérique direct contenant une méthode de suivi Lagrangien de phase disperse. Ces méthodes numériques ont permis d'optimiser le suivi Lagrangien parallèle des gouttes afin de pouvoir simuler de très grands domaines. Un algorithme de gestion des collisions entre les gouttes a aussi été développé et mis en place ainsi qu'une procédure permettant d'intégrer des corps immergés de formes quelconques. Ces méthodes numériques ont permis d'effectuer des simulations de référence et d'obtenir des statistiques détaillées de diverses configurations telles que le croisement de jets de gouttes qui se collisionnent ou bien la propagation d'un front de flamme dans un spray évaporant. La comparaison de ces caractéristiques avec les mêmes simulations où la prise en charge du spray était effectuée par une méthode Eulérienne multi-fluide ont été faites. Les très bonnes concordances qualitatives et quantitatives entre les prises en charge Lagrangiennes et Eulériennes ont permis de montrer les capacités du modèle Eulérien à rendre compte de phénomènes physiques complexes. Ce modèle Eulérien permettra de bien meilleurs scaling lors de son portage sur des architectures massivement parallèles.

Abstract

The main goal of this PhD dissertation is to discuss the numerical methods that have been developed and implemented in a DNS code associated to a Lagrangian tracking procedure for dispersed phase. These numerical methods allow for an optimization of the Lagrangian tracking of the droplets in a parallel computing environment and allow for a very large domain to be simulated. A procedure to include an immersed body of any geometry in the midst of the simulation domain has been implemented. A dedicated collision algorithm has also been developed that models the droplet/droplet and droplet/IBM (Immersed Boundary Method) interactions. These numerical methods allows to simulate numerous physical phenomena to obtain detailed statistics in many complex configurations amongst which problem of droplet interweaving or flame front propagation in an evaporating spray. A detailed comparison between this Lagrangian method and a Eulerian approach is shown. The consistency between these two methods demonstrates the capability of the Eulerian method to accurately capture complex physical phenomena. This Eulerian method is foreseen to have a better computational cost than the Lagrangian method when running on massively parallel architectures.

Table des matières

1	Introduction Générale	19
2	Développements numériques	24
2.1	Introduction	24
2.2	Équations résolues	25
2.2.1	Aérodynamique	25
2.2.2	Équations cinétiques	28
2.2.2.1	Force massique	29
2.2.2.2	Taux d'évolution de la surface des gouttes	30
2.2.2.3	Transfert thermique	31
2.2.3	Méthode multi-fluides pour la simulation Eulérienne de sprays	31
2.3	Code Asphodele	32
2.3.1	Évolution du spray Lagrangien	32
2.3.1.1	Loi d'évolution du mouvement	33
2.3.1.2	Lois d'évaporation	34
2.3.1.3	Détermination du transfert de masse	35
2.3.1.4	Détermination du transfert d'énergie	39
2.3.1.5	Méthode 2-way pour le spray	40
2.3.2	Base LMN	42
2.3.2.1	Approximation Low Mach Number	45
2.3.3	Méthodes de parallélisation	46
2.3.3.1	Parallélisation Eulérienne	47
2.3.3.2	Parallélisation Lagrangienne	48
2.4	Outils développés	51
2.4.1	Corps immergés	51

2.4.1.1	Génération de disques immergés	53
2.4.1.2	Génération de polygones immergés quelconques	53
2.4.2	Collisions	55
2.4.2.1	Collisions entre les gouttes	57
2.4.2.2	Collisions entre les gouttes et les corps immergés	64
2.4.3	Méthodes utilisées pour la chimie	68
2.4.3.1	Loi d'Arrhenius	68
2.4.3.2	Méthode KGKAS	70
2.4.3.3	Flamme froide	78
2.5	Mise en application : cylindre chaud	79
2.5.1	Outils numériques utilisés	80
2.5.2	Configuration numérique	80
2.5.3	Étude de la ségrégation	82
2.5.3.1	Impact du nombre de Stokes sur les collisions entre les gouttes et le corps immergé.	82
2.5.3.2	Impact du nombre de Stokes sur la densité de gouttes en amont.	85
2.5.3.3	Impact du nombre de Stokes sur la densité de gouttes dans la zone de recirculation du cylindre.	87
2.5.4	Étude du mélange	88
2.5.5	Étude de la combustion	89
2.5.6	Conclusion	92
3	Combustion laminaire	94
3.1	Introduction	94
3.2	Flamme 1D de référence	98
3.3	Caractérisation de flammes 1D diphasiques	101
3.3.1	Etat de l'art	101
3.3.2	Configuration numérique	102
3.3.3	Résultats numériques	104
3.3.4	Exploitation des résultats	108
3.3.5	Conclusion	116
4	Combustion turbulente de sprays	118
4.1	Introduction	118

4.2	Combustion turbulente d'un spray évaporant polydisperse avec croisement de gouttes : modélisation Eulérienne des collisions à nombre de Knudsen fini et validation.	120
4.2.1	Introduction	121
4.2.2	Simulation de particules discrètes et modèle statistique pour les particules se collisionnant	122
4.2.2.1	Algorithme Lagrangien DPS	123
4.2.2.2	Description statistique du spray	124
4.2.3	Configuration des jets croisés et solutions de référence	125
4.2.4	Modèle Eulérien multi-fluides et multi-vitesses avec collision	126
4.2.4.1	Approche multi-fluides multi-vitesses	127
4.2.4.2	Fermeture du terme de collision de Boltzmann par une méthode de quadrature	128
4.2.4.3	Méthode numérique et conservation dans l'espace des vitesses	129
4.2.5	Résultats et discussions	130
4.2.5.1	Comparaison Lagrangienne/modèle multi-fluides pour un spray monodisperse	130
4.2.5.2	Comparaison Lagrangienne/modèle multi-fluides pour un spray bidisperse	135
4.2.6	Conclusion	137
4.3	Rôle de la ségrégation préférentielle sur la dynamique de flamme au coeur d'un spray polydisperse évaporant.	137
4.3.1	Introduction	137
4.3.2	Simulations diphasiques	139
4.3.2.1	Modèles gazeux et diphasiques utilisés, méthodes numériques	139
4.3.2.2	Configuration DNS et parallélisation	142
4.3.3	Résultats et discussions	142
4.3.3.1	Dispersion et ségrégation du spray	143
4.3.3.2	Évaporation du spray	144
4.3.3.3	Combustion turbulente du spray	146
4.4	Simulation d'un spray initialement polydisperse sur la dynamique de flamme.	150
4.4.1	Introduction	150
4.4.2	Simulations diphasiques	151
4.4.2.1	Configuration DNS et parallélisation	151

4.4.3	Résultats et discussions	151
4.4.3.1	Dispersion et ségrégation du spray polydispersé	152
4.4.3.2	Évaporation du spray polydispersé	156
4.4.3.3	Propagation d'un front de flamme dans le domaine	161
4.4.3.4	Conclusion	165
5	Conclusion	166
6	Annexes	169
6.1	Interaction choc / nuage de gouttes	169
6.1.1	Introduction	169
6.1.2	Configuration 1D	170
6.1.2.1	Caractéristiques du gaz	170
6.1.2.2	Caractéristiques des particules	171
6.1.2.3	Équations Euler/gaz - Lagrange/particules	172
6.1.3	Interaction spray/choc - théorie	173
6.1.3.1	Détermination analytique de la vitesse Eulérienne du brouillard	173
6.1.3.2	Détermination analytique de la longueur de pénétration du brouillard	174
6.1.3.3	Détermination analytique de la densité Eulérienne du brouillard	176
6.1.3.4	Extension de la théorie à l'interaction 2-way	178
6.1.4	1D - résultats numériques	180
6.1.5	Conclusion	187
6.1.6	Annexe : Résolution de l'équation 6.12	187
6.2	Normalisation	188
	Bibliographie	193

Table des figures

1.1	Évolution des normes EURO pour les principaux polluants gazeux	20
1.2	Interactions entre les différents phénomènes, de la présence du spray jusqu'à sa combustion.	21
2.1	NDF et évolution de celle-ci dans le cas d'une évaporation	31
2.2	Apparition d'un δ -choc selon les modèles Eulériens utilisés.	33
2.3	Répartition des termes sources issus d'une goutte	41
2.4	Découpage d'un domaine afin de paralléliser son traitement	47
2.5	Stencils et communications nécessaires à l'estimation des dérivées.	48
2.6	Passage d'une goutte d'un sous-domaine à l'autre	49
2.7	Ghosts utilisés et passage de gouttes d'un processus MPI à l'autre pour la phase disperse	49
2.8	Répartition et envoi des termes sources entre les sous-domaines	50
2.9	Méthode utilisée pour la parallélisation des termes sources Lagrangiens.	51
2.10	Masques utilisés pour les cylindres et les polygones immergés, ainsi que l'écoulement résultant autour d'un cylindre immergé.	53
2.11	Description de la méthode utilisée pour créer le masque de polygones immergés.	54
2.12	Algorithme de création d'un masque pour un polygone \mathcal{P} quelconque.	56
2.13	Découpage du domaine afin de chercher les partenaires potentiels de collision. ● : goutte dont on cherche les partenaires potentiels de collision, \circ : gouttes que l'on ignore, \bullet : partenaires potentiels de collision.	57
2.14	Distance et surface équivalente maximale à envisager pour la détection des collisions	58
2.15	Création de l'arbre et parcourt sur celui-ci	60
2.16	Ecart relatif de N_x^\bullet et N_x	61
2.17	Repère $[\mathbf{n}, \mathbf{t}_1]$ utilisé lors d'une collision se produisant dans le plan XY	63
2.18	Capture instantanée des gouttes entrant en collision.	65

2.19	Iso-contour de la densité de gouttes obtenue dans le cas collisionnant (gris) et non collisionnant (rouge).	65
2.20	Iso-contours de densité eulérienne moyenne des gouttes pour une simulation de quatre jets qui se croisent (à gauche). Les gouttes issues de chaque injection sont d'une couleur distincte. Les iso-contours de densité moyenne de goutte en sortie du domaine dans le cas non collisionnant et collisionnant est représenté pour chaque famille de goutte (à droite).	66
2.21	Normales à la surface d'un cylindre immergé.	67
2.22	Algorithme de détection et de prise en charge de la collision des gouttes sur un corps immergé.	68
2.23	$K^+(\phi)$ et $V^+(\phi)$ pour différentes chimies.	73
2.24	$\kappa(\phi)$ et $\sqrt{\kappa(\phi)}$ pour différentes chimies.	74
2.25	κ réel (■) et κ modélisé (—) pour le CH_4 , C_2H_6 , C_3H_8 et C_7H_{16}	75
2.26	K^+ réel (■) et K^+ modélisé (—) pour le CH_4 , C_2H_6 , C_3H_8 et C_7H_{16}	76
2.27	Flammes triples pour plusieurs espèces, ainsi que pour $K = cste$ et iso-contour de richesse.	77
2.28	Configuration du domaine	81
2.29	Représentation des lignes de courant et des vecteurs vitesse du fluide et des gouttes autour du cylindre (gouttes n'ayant pas rebondi (→) et gouttes ayant rebondi (←)).	83
2.30	Vitesse de glissement moyenne des gouttes dans le domaine pour trois nombres de Stokes différents.	84
2.31	Représentation des trajectoires (lignes vertes) de deux gouttes de balistiques différentes ($St = 5.265 \cdot 10^{-1}$ à gauche ; $St = 2.632$ à droite). Les lignes de courant sont en lignes noires, les gouttes sont en bleu pour $St = 5.265 \cdot 10^{-1}$ et rouge pour $St = 2.632$	84
2.32	Fraction massique moyenne de fuel liquide dans le domaine pour trois nombres de Stokes différents.	85
2.33	Configuration du domaine	86
2.34	Densité moyenne de fuel liquide dans le domaine en fonction du nombre de Stokes des gouttes, ainsi que la distance analytique du front de gouttes au cylindre (disques blancs).	87
2.35	Taux moyen d'évaporation des gouttes dans le domaine pour trois nombres de Stokes différents.	89

2.36	Fraction massique moyenne de fuel gazeux dans le domaine en fonction du nombre de Stokes.	89
2.37	Fraction massique moyenne de fuel gazeux dans le domaine pour trois nombres de Stokes différents.	90
2.38	Taux de réaction moyen dans le domaine pour trois nombres de Stokes différents.	91
2.39	Taux de réaction instantané dans le domaine pour trois nombres de Stokes différents, $t = 12ms$	92
2.40	Liens de causalité entre les différents phénomènes	93
3.1	Modes de combustion de gouttes en fonction de leur nombre et de leur séparation.	95
3.2	Modes de combustion de gouttes en fonction de leur nombre de groupe G	96
3.3	Structures de flammes laminaires diphasiques.	97
3.4	Structures de flammes laminaires diphasiques dans un spray de gouttes au repos. Lignes rouges : flamme prémélangé, tirets bleus : flamme de diffusion.	97
3.5	Modes de combustion de gouttes en fonction de leur nombre de groupe G	98
3.6	Modes de combustion de gouttes en fonction de leur nombre, de leur séparation et de la richesse.	99
3.7	Profils de taux de réaction (- -) et de température (-) des flammes chaudes et froides de référence.	100
3.8	Profils de la fraction massique de fuel (-), d'oxydant (○) et de gaz brûlés (- -) des flammes chaudes et froides de référence.	101
3.9	Répartition initiale des gouttes dans le domaine	103
3.10	Configuration du domaine	103
3.11	Vitesse moyenne de la flamme 1D diphasique chaude en fonction de τ_v/τ_{fl} et de Φ .	105
3.12	Distance moyenne du front de flamme et du front d'évaporation des gouttes dans le cas de la flamme 1D diphasique chaude en fonction de τ_v/τ_{fl} et de Φ	106
3.13	Taux de réaction (ligne noire : positif pour le prémélange, négatif pour la diffusion), fraction massique de fuel normalisée (pointillés bleus) et fraction massique d'oxydant (pointillés verts).	107
3.14	Caractéristiques de la flamme 1D diphasique chaude en fonction de τ_v/τ_{fl} et de Φ . $\tau_v/\tau_{fl} = 5.59$ (×), $\tau_v/\tau_{fl} = 1$ (+) et $\tau_v/\tau_{fl} = 0.0294$ (○). La ligne continue correspond à la flamme gazeuse 1D de référence	108

3.15	Captures instantanées du taux de réaction normalisé (–), de la température normalisée (×), de la fraction massique de fuel normalisée (○), du taux d'évaporation en grandeur arbitraire (+) et des gouttes. $\tau_v/\tau_{fl} = 0.0294$: (a),(b),(c); $\tau_v/\tau_{fl} = 1.0$: (d),(e),(f) et $\tau_v/\tau_{fl} = 5.89$: (g),(h),(i); pour $\Phi = 0.6$: (a), (d), (g); $\Phi = 1.0$: (b), (e), (h) et $\Phi = 1.4$: (c), (f), (i)	109
3.16	Equilibre thermodynamique (–) et équilibre local (○). $\tau_v/\tau_{fl} = 0.0294$: (a),(b),(c); $\tau_v/\tau_{fl} = 1.0$: (d),(e),(f) et $\tau_v/\tau_{fl} = 5.89$: (g),(h),(i); pour $\Phi = 0.6$: (a), (d), (g); $\Phi = 1.0$: (b), (e), (h) et $\Phi = 1.4$: (c), (f), (i)	110
3.17	Taux de réaction en fonction de la variable de mélange. $\tau_v/\tau_{fl} = 0.0294$: (a),(b),(c); $\tau_v/\tau_{fl} = 1.0$: (d),(e),(f) et $\tau_v/\tau_{fl} = 5.89$: (g),(h),(i); pour $\Phi = 0.6$: (a), (d), (g); $\Phi = 1.0$: (b), (e), (h) et $\Phi = 1.4$: (c), (f), (i)	111
3.18	Taux de réaction moyen de la flamme de diffusion 1D diphasique en fonction de τ_v/τ_{fl} et de Φ	112
4.1	Apparition d'un δ -choc selon les modèles Eulériens utilisés.	119
4.2	Position des gouttes dans les simulations Lagrangiennes sans collision (en haut) et avec collision (bas) pour le cas monodisperse (gauche) et bi-disperse (droite).	125
4.3	Densité des gouttes pour une simulation de deux jets qui se croisent. Approche multi-fluides (gauche) et multi-vitesses (droite) pour un nombre de Stokes $St = 5.29$	127
4.4	Densité des gouttes pour une simulation de deux jets qui se croisent. Approche Lagrangienne projetée sur une grille Eulérienne (gauche) et modèle multi-fluides multi-vitesses (droite) pour un nombre de Stokes $St = 5.29$, avec collision.	131
4.5	Coupe verticale de la densité moyenne de goutte (U.A.) à l'abscisse $x = 6cm$. Méthode Eulérienne : pointillés noirs, méthode Lagrangienne : ligne rouge.	131
4.6	Vitesse moyenne des gouttes pour une simulation de deux jets qui se croisent. Approche Lagrangienne projetée sur une grille Eulérienne (gauche) et modèle multi-fluides multi-vitesses (droite) pour un nombre de Stokes $St = 5.29$, avec collision.	131
4.7	Vitesse moyenne des gouttes sur y pour une simulation de deux jets qui se croisent. Approche Lagrangienne projetée sur une grille Eulérienne (gauche) et modèle multi-fluides multi-vitesses (droite) pour un nombre de Stokes $St = 5.29$, avec collision.	132

4.8	Quantité de mouvement de gouttes pour la simulation de deux jets croisés bi-dispersés en utilisant l'approche DPS moyennée et projetée sur la grille Eulérienne. Les quantités de mouvement selon x sont en haut, selon y en bas. Le résultat obtenu par la méthode Lagrangienne est à gauche, par la méthode Eulérienne est présentée à droite.	133
4.9	Coupe verticale de la quantité de mouvement moyenne des gouttes (U.A.) à l'abscisse $x = 6cm$. La quantité de mouvement selon x est à gauche, selon y est à droite. Méthode Eulérienne : pointillés noirs, méthode Lagrangienne : ligne rouge.	134
4.10	Densité des gouttes Eulériennes de deux jets qui se croisent. Approche BGK avec le modèle multi-fluides multi-vitesses pour un nombre de Stokes $St = 5.29$, avec collision.	134
4.11	Masse de gouttes pour la simulation de deux jets croisés bi-dispersés en utilisant l'approche DPS moyennée et projetée sur la grille Eulérienne (a) et par la méthode multi-fluides multi-vitesses (b). Les gouttes d'un nombre de Stokes $St = 5.29$ sont sur le côté gauche, les gouttes de nombre de Stokes $St = 15.86$ sur le côté droit.	135
4.12	Méthode de couplage entre les codes Eulériens et Lagrangiens. <i>Muses3D</i> est un solveur Eulérien pour la phase disperse, tandis que <i>Asphodele</i> est un solveur Lagrangien pour le spray et Eulérien pour le gaz.	138
4.13	Densité de gouttes obtenue par la formulation Lagrangienne (à gauche) et Eulérienne (à droite) pour un nombre de Stokes $St = 0.2$ (en haut) et $St = 1$ (en bas) pour un temps suffisamment long pour que les tourbillons se retournent un grand nombre de fois, une fois que les gouttes ont atteint un équilibre dynamique.	143
4.14	Évolution temporelle de la moyenne (gauche) et de la RMS (droite) de la fraction massique de fuel gazeux des simulations Eulériennes (Y_f^E - symboles) et Lagrangiennes (Y_f^L - lignes), pour un nombre de Stokes $St = 0.2$ (\circ /lignes) et $St = 1$ (+/pointillés).	144
4.15	Fraction massique du fuel gazeux obtenu par la formulation Lagrangienne (Y_f^L - gauche) et Eulérienne (Y_f^E - droite) pour un nombre de Stokes $St = 0.2$ (en haut) et $St = 1$ (en bas), à un temps $t = 0.63ms$, soit la moitié du temps caractéristique d'évaporation.	145
4.16	Évolution du front de flamme obtenu par le calcul Lagrangien (gauche), Eulérien (droite), pour un nombre de Stokes $St = 1$ à $t = 0$ (ligne grasse), $t = 6ms$ (ligne pointillée) et $t = 12ms$ (ligne continue).	147

4.17	Évolution temporelle du rayon moyen de la flamme (gauche) et sa courbure (droite), pour la formulation Lagrangienne (lignes) et Eulérienne (symboles) pour un nombre de Stokes $St = 0.2$ (lignes et cercles) et $St = 1$ (ligne pointillée et +).	147
4.18	Zoom sur une interaction flamme/flamme conduisant à une extinction locale de celle-ci. Le taux de réaction est tracé avec les gouttes (gauche) et avec l'iso-contour de la densité Eulérienne (droite) pour un nombre de Stokes $St = 0.2$ à un temps $t = 4.67ms$.	148
4.19	Fraction massique de fuel gazeux obtenu par la formulation Lagrangienne (Y_f^L - gauche) et Eulérienne (Y_f^E - milieu) pour un nombre de Stokes $St = 0.2$ à $t = 6.3 ms$. Capture de l'iso-température/iso- Y_f (droite) montrant le développement de la flamme et des zones d'évaporation avec la description multi-fluides Eulérienne du spray à $t = 12.6 ms$.	149
4.20	Densité Eulérienne 2D de gouttes dans le cas Lagrangien (à gauche) et Eulérien (à droite) pour la deuxième section (en haut) ainsi que la huitième (en bas) au temps $t = 12.6 ms$.	152
4.21	Densité Eulérienne 3D de gouttes dans le cas Lagrangien (à gauche) et Eulérien (à droite) pour la deuxième section (en haut) ainsi que la huitième (en bas) au temps $t = 12.6 ms$.	153
4.22	Densité Eulérienne totale de gouttes dans le cas Lagrangien (à gauche) et Eulérien (à droite) dans le cas 2D (en haut) ainsi que dans le cas 3D (en bas) pris à $t = 12.6 ms$.	154
4.23	Évolution temporelle de l'écart type de la densité de gouttes dans le domaine pour plusieurs sections (section 2 ($St = 5.5 \cdot 10^{-2}$) en rouge, section 5 ($St = 0.495$) en noir et section 8 ($St = 1.37$) en bleu). La formulation Lagrangienne est en symboles, la formulations Eulérienne en lignes.	156
4.24	Fraction massique du fuel gazeux obtenu par la formulation Lagrangienne (Y_f^L - gauche) et Eulérienne (Y_f^E - droite) dans le cas 2D (en haut) et 3D (en bas), à un temps $t = 2.52 ms$.	157
4.25	Évolution du minimum, du maximum et de la moyenne de la fraction massique du fuel gazeux obtenu par la formulation Lagrangienne (symboles) et Eulérienne (lignes) au cours du temps.	157
4.26	Coupe horizontale de la fraction massique du fuel gazeux. La formulation Eulérienne est en pointillés rouges, la formulation Lagrangienne en lignes noires.	158

4.27	PDF de la fraction massique du fuel gazeux obtenu par la formulation Lagrangienne (lignes) et Eulérienne (pointillés).	159
4.28	Captures instantanées du taux de réaction dans le domaine $2D$ (en haut) dans le cas Lagrangien (à gauche) et Eulérien (à droite) pris à $t = 2.52 ms$; ainsi que les captures instantanées du taux de réaction dans le domaine $3D$ (en bas) dans le cas Lagrangien (à gauche) et Eulérien (à droite) pris à $t = 6.31 ms$.	162
4.29	Évolution temporelle du rayon équivalent de la flamme. Formulation Eulérienne (lignes) et Lagrangienne (cercles).	163
4.30	Captures instantanées des taux de réaction de prémélange (en rouge) et de diffusion (en bleu) à différents instants (croissant de haut en bas) pour la formulation Eulérienne (à gauche) et Lagrangienne (à droite). Les iso-contours de fraction massique de fuel gazeux sont en blanc.	164
6.1	Génération d'une onde de choc instationnaire	171
6.2	Diagramme (x, t) du système avec X_s la position du choc, x' la distance parcourue par une goutte initialement à x_0 et t' la durée de l'interaction de la goutte avec le choc.	174
6.3	Évolution de $\bar{\tau}_v/\tau_v^0$ en fonction de M_s .	175
6.4	Longueur du brouillard pré et post spray.	176
6.5	Distance initiale entre les gouttes	177
6.6	1-way	178
6.7	2-way	178
6.8	Trajectoire des gouttes au passage du choc en 1 et 2-way	178
6.9	Vitesse Eulérienne des gouttes en 1-way. Résultats numériques (\circ), théoriques ($-$) ainsi que leur majoration (u_g) pour différents diamètres. $t = 1.756ms$, $M_s = 1.1$, $u_g = 58.21m/s$.	181
6.10	Fraction volumique de gouttes en 1-way. Résultats numériques ($-$), théoriques ($-$) ainsi que leur minoration (τ_v^0) et majoration (τ_v^{max}) pour différents diamètres. $t = 1.756ms$.	183
6.11	Vitesse Eulérienne des gouttes en 2-way. Résultats numériques ($-$) ainsi que la vitesse moyenne du gaz post-choc \tilde{u}_g (Eq. 6.27) pour différents diamètres. $t = 1.756ms$.	185

6.12 Fraction volumique de gouttes en 2-way. Résultats numériques (–) ainsi que leur minoration (τ_v^0) et la densité moyenne des gouttes post-choc \tilde{u}_g (Eq. 6.27) pour différents diamètres. $t = 1.756ms$	186
--	-----

Liste des tableaux

2.1	Coefficients ν_F , A_l et A_r pour différentes espèces	74
2.2	Coefficients K_{st} pour différentes espèces.	77
2.3	Liste des configurations des simulations effectuées	81
3.1	Récapitulatif des paramètres de normalisation du code	100
3.2	Récapitulatif des caractéristiques des deux flammes de référence.	101
4.1	Récapitulatif du diamètre initial des gouttes de chaque section et de leur nombre de Stokes équivalent.	151
6.1	Caractéristiques du gaz pré et post choc.	171
6.2	Liste des diamètres d de goutte et temps caractéristique de relaxation τ_p équivalent.173	

Liste des symboles

Nombres adimensionnels

B_M Nombre de Spalding massique

Fr Nombre de Froude

Le Nombre de Lewis

M Nombre de Mach

Nu_c Nombre de Nusselt convectif

Pr Nombre de Prandtl

Re_p Nombre de Reynolds particulaire

Sc Nombre de Schmidt

Sh_c Nombre de Sherwood convectif

Lettres grecques

χ_k Fraction molaire de l'espèce k ($[SU]^1$)

Δt Pas de temps ($[s]$)

δ_T Couche limite de température ($[m]$)

δ_Y Couche limite de diffusion des espèces ($[m]$)

$\dot{\omega}_k$ Terme source chimique de l'espèce k ($[kg.m^{-3}.s^{-1}]$)

$\dot{\omega}_{es}$ Terme source chimique d'énergie ($[J.s^{-1}.m^{-3}]$)

η Viscosité de volume ($[kg.m^{-1}.s^{-1}]$)

λ Conductivité thermique ($[J.s^{-1}.m^{-1}.K^{-1}]$)

¹Sans Unité

μ	Viscosité dynamique ($[kg.m^{-1}.s^{-1}]$)
ν	Viscosité cinématique ($[m^2.s^{-2}]$)
ρ	Masse volumique ($[kg.m^{-3}]$)
$\tau[]$	Tenseur des contraintes visqueuses ($[Pa]$)
τ_h	Temps caractéristique d'évolution de température d'une goutte de diamètre a_0 ($[s]$)
τ_p	Temps caractéristique balistique d'une goutte de diamètre a_0 ($[s]$)
τ_v	Temps caractéristique d'évaporation d'une goutte de diamètre a_0 ($[s]$)
Π	Constante du modèle IAT ($[K^{-1}]$)

Indices et exposants

X^c	Termes correctifs
X_0	Variable de référence
X_d	Termes relatifs aux gouttes (lorsque nécessaire)
X_g	Termes relatifs au gaz (lorsque nécessaire)
X_i	Vecteur prit dans la direction i
X^+	Variabes normalisées
$X^{(n)}$	Variabes relatives au noeud (n)
$X^{(sat)}$	Variabes à la saturation
X_∞	Variabes relatives à un gaz de référence
X_b	Variabes relatives aux gaz brûlés
X_S	Variabes relatives à l'espèce dont est constituée la goutte
X_u	Variabes relatives aux gaz frais

Lettres latines

\mathcal{V}	Volume ($[m^3]$)
\mathbf{F}_B	Force de Basset ($[N]$)
\mathbf{F}_e	Force de Laplace ($[N]$)
\mathbf{F}_Ω	Force de Magnus ($[N]$)

$\mathbf{F}_{\mathbf{vm}}$	Force de correction ($[N]$)
\mathbf{g}	Accélération de la pesanteur ($[m.s^{-2}]$)
\mathbf{P}	Poids ($[N]$)
\mathbf{p}	Vecteur quantité de mouvement ($[kg.m.s^{-1}]$)
\mathbf{T}	Force de traînée ($[N]$)
\mathbf{V}	Vecteur vitesse ($[m.s^{-1}]$)
\mathbf{X}	Vecteur position ($[m]$)
a	Diamètre d'une goutte ($[m]$)
C_D	Coefficient de traînée ($[SU]$)
C_u	Facteur correctif du coefficient de traînée ($[SU]$)
$D_i^{+,max}, D_i^{-,max}$	Distances maximales utilisées pour la détection des plus proches voisins ($[m]$)
D_k	Diffusivité de l'espèce k ($[m^2.s^{-1}]$)
E_i	Correction de l'énergie selon la direction i ($[J.m.s^{-1}]$)
e_s	Énergie sensible [$J.kg^{-1}$]
f	PDF ²
f_N	NDF ³
H_c	Coefficient de convection ($[J.kg^{-1}]$)
$h_{S,k}$	Enthalpie de formation de l'espèce k ($[J.kg^{-1}]$)
L_v	Chaleur latente d'évaporation ($[J.kg^{-1}]$)
m	Masse ($[kg]$)
M_k	Masse molaire de l'espèce k ($[kg.mol^{-1}]$)
p	Pression($[Pa]$)
P_{ghost}	Point utilisé pour la résolution du PIP
Q_l	Capacité calorifique du liquide ($[J.K^{-1}.kg^{-1}]$)
R_S	Constante des gaz parfaits liée à l'espèce S ($[J.mol.K^{-1}]$)

²Probability Density Function

³Number Density Function

S	Surface d'une goutte ($[m^2]$)
T	Température ($[K]$)
t_h	Temps d'évolution de température d'une goutte ($[s]$)
t_p	Temps balistique d'une goutte ($[s]$)
t_v	Temps d'évaporation d'une goutte ($[s]$)
u_i	Vitesse selon la direction i ($[m.s^{-1}]$)
V_i	Vitesse selon la direction i ($[m.s^{-1}]$)
W_k	Masse molaire de l'espèce k ($[kg.mol^{-1}]$)
W_v	Taux d'évaporation ($[kg.s^{-1}]$)
Y_k	Fraction massique de l'espèce k ($[SU]$)
$\mathcal{M}[\]$	Masque utilisé pour les corps immergés
\mathcal{P}	Polygone quelconque

Fonctions et opérateurs

δ_{ij}	Symbole de Kronecker
Γ	Opérateur de collision
Q	Opérateur de Break-up

Remerciements

Une thèse ne se faisant jamais tout seul, il est normal que les personnes y ayant participé directement – ou moins directement – soient remerciées. Je tacherai cependant de ne pas en oublier, dans le cas contraire ne m'en portez pas rigueur.

Je tiens tout d'abord à remercier mon directeur de Thèse, Julien Réveillon, avec qui j'ai effectué cette thèse dans la continuité de mon Master 2, ainsi que Abdellah Hadjadj et Ashwin Chinnayya pour m'avoir permis d'explorer de nouvelles voies dans le domaine du diphasique et pour leur aide. Je tiens de même à remercier M. Boukhalfa, directeur du CORIA, pour m'avoir accueilli au sein de son laboratoire.

Je remercie aussi particulièrement Marc Massot et son équipe, en particulier Lucie Freret pour avoir en grande partie contribué à cette thèse, tant du point de vue scientifique que soutient moral par moment.

Ma compagne ainsi que ma famille, qui furent d'une présence sans faille : mes parents, le frangin, et tous les autres que je n'aurai malheureusement pas la place de citer mais qui se reconnaîtront.

Je souhaite aussi remercier tout ceux qui ont su soutenir une bonne ambiance de travail et me conseiller, i.e. les collègues (et/ou amis), qu'ils soient encore thésards (Beubeu, Mathias, Guimch, Pec, Jon, Nico, Fabien, Yann, Benji), ou déjà docteur (Eric, Zak, Thibaut, Yves, Guillaume, Jeremy, François, Arnaud, FX etc.).

A titre personnel, parce que leur nom mérite leur place ici, les amis, que je n'ai pas forcément pu voir fréquemment à cause du temps qui défile, mais que j'espère bien revoir au plus vite : JB, Alex, Tof, David (bon courage pour vos soutenances), Joss, Manu, Yanou, Nico.

J'en ai certainement oublié, j'en suis navré mais sachez que votre présence a été tout aussi importante.

Merci encore à tous, je ne pense pas que cette thèse aurait pu aboutir si vous n'aviez pas été là.

Chapitre 1

Introduction Générale

*En essayant continuellement, on finit par réussir
Donc, plus ça rate, plus on a de chance que ça marche*

Jacques Rouxel

La combustion permet d'extraire l'énergie chimique contenue dans le pétrole. Celui-ci étant une source d'énergie majeure, plusieurs types de moteurs ont été développés afin de convertir cette énergie chimique en énergie mécanique. Ces moteurs sont classés dans deux grandes catégories : les moteurs à réaction et les moteurs fournissant une énergie mécanique sur un arbre. Les applications industrielles de ces moteurs sont multiples (moteur à explosion pour les moteurs à combustion interne ; turboréacteur et moteurs fusée pour les moteurs à réaction). Le point commun entre tous ces moteurs est la présence de fuel injecté sous forme liquide. Sa maîtrise est donc un enjeu important pour l'optimisation du rendement et la réduction de pollution de ce type de moteur. En effet, dans un souci de préservation de l'environnement, les normes de pollution sont de plus en plus restrictives. Les normes EURO V et VI sont entrées en vigueur en janvier 2011 pour la première, septembre 2015 pour la seconde. Les graphiques 1.1a et 1.1b donnent la limite réglementaire d'émission de NOx et de CO pour les véhicules à essence et à diesel.

Ces réductions drastiques nécessitent un très bon rendement, ainsi que la compréhension des phénomènes pouvant entraîner l'émission de polluants. La maîtrise de l'injection, jusqu'à l'échappement, des phénomènes physiques est donc nécessaire.

Afin de comprendre et de maîtriser toute cette chaîne, il est indispensable d'appréhender chaque phénomène présent, ainsi que leurs interactions. Dans cette thèse nous nous intéresserons à la combustion de brouillards liquides. Toute la partie concernant l'injection ainsi que

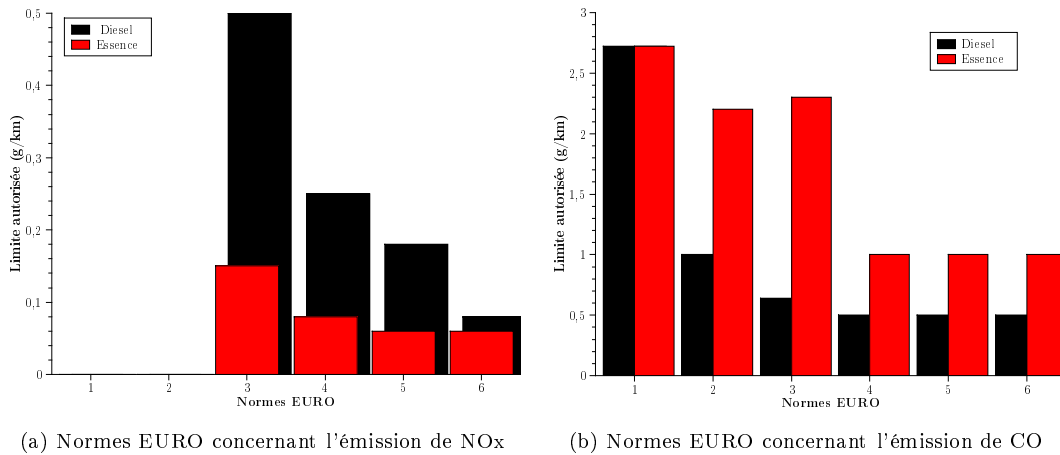


FIG. 1.1: Évolution des normes EURO pour les principaux polluants gazeux

l'atomisation ne sera pas traitée. Ces deux phénomènes n'en restent pas moins extrêmement intéressants et font aussi l'objet de nombreuses études.

La physique de la combustion de brouillard de gouttes est complexe. En effet, on observe la présence de turbulence, de chimie, de spray, voire d'ondes de choc. Ces phénomènes vont interagir entre eux, de la présence du brouillard jusqu'à sa combustion. Ces interactions sont représentées sur la figure 1.2, présentant les différentes étapes de la combustion turbulente diphasique, une fois le jet de carburant atomisé jusqu'à sa combustion.

Les quatre principaux phénomènes permettant de décrire ce type de combustion sont le spray, l'évaporation, le mélange et la combustion.

Le spray, issu de l'atomisation du jet de carburant, est caractérisé par le diamètre des gouttes, leur position, leur vitesse et leur température. Celui-ci va être emporté par la phase gazeuse dans laquelle il évolue. La température des gouttes du spray va aussi évoluer en fonction du gaz qui les entoure. Et finalement, si les gouttes s'évaporent, le spray va charger le gaz en fuel. Ces trois interactions constituent le couplage entre la phase gazeuse et la phase liquide. Les interactions entre les gouttes vont changer les vitesses, le diamètre et le nombre de gouttes. Les phénomènes de coalescence (fusion de plusieurs gouttes entre elles), de break-up (division d'une goutte en plusieurs gouttes plus petites) et les collisions entre les gouttes vont contribuer aux modifications des caractéristiques du spray. Finalement, un dernier phénomène pouvant apparaître est la collision entre les gouttes et un corps immergé. Les collisions peuvent produire des phénomènes très complexes (création d'un film d'eau par exemple). Dans cette thèse nous ferons en sorte que les collisions soient suffisamment peu violentes pour qu'elles puissent être considérées comme élastiques.

L'évaporation du spray. Elle va dépendre des caractéristiques du spray. La topologie de

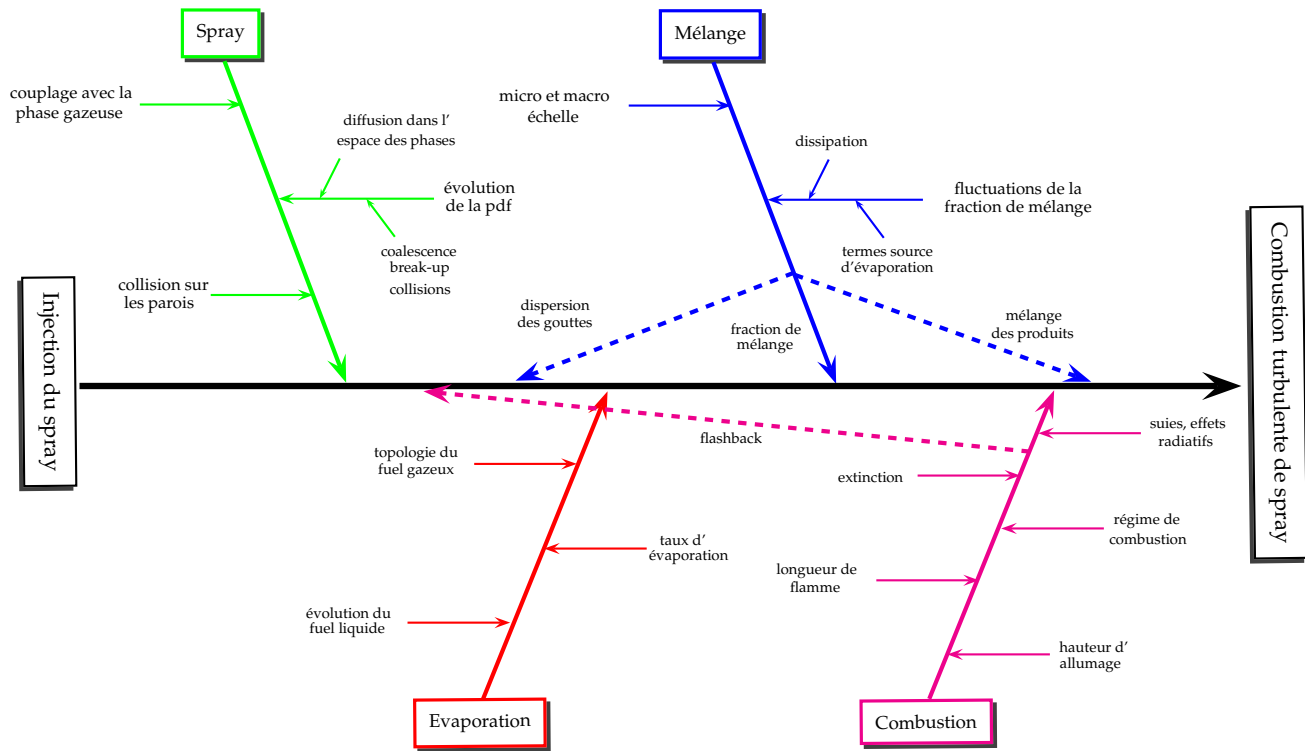


FIG. 1.2: Interactions entre les différents phénomènes, de la présence du spray jusqu'à sa combustion.

la densité de gouttes va impacter directement sur la topologie du fuel gazeux. L'évaporation du spray va directement dépendre de la température du gaz qui l'entoure, ainsi que de la pression et de la fraction massique de fuel gazeux présent. Ces paramètres vont permettre de déterminer les conditions de saturation autour des gouttes. Via le couplage entre le spray et le gaz, l'évaporation va dépendre des paramètres physiques locaux. En effet, l'évaporation va augmenter la masse de fuel autour des gouttes du spray, et va modifier les conditions de saturation, qui va modifier la vitesse d'évaporation.

Le **mélange** du fuel gazeux issu de l'évaporation du spray, va être lié à plusieurs phénomènes. Par diffusion, le fuel va se mélanger au gaz porteur. Ensuite, le mélange à micro-échelle qui est dû à la diffusion turbulente. Les plus petits tourbillons de l'écoulement vont transporter le fuel évaporé. A grande échelle, les plus grosses structures de l'écoulement vont déplacer de grandes quantités de fuel gazeux sur des longueurs plus grandes. C'est un mélange que l'on peut qualifier de macro-échelle. Ce mélange va changer la topologie du fuel gazeux, celle de la saturation locale de fuel, et donc la vitesse d'évaporation du spray.

Finalement, **la combustion**, qui va transformer le fuel gazeux et l'oxydant en produits de combustion. Plusieurs régimes de combustion peuvent être présents. Le régime prémélangé, lorsque le fuel et l'oxydant sont déjà mélangés, non-prémélangés, lorsque ces deux composants

sont séparés, le mélange ne se produisant que par diffusion entre ces deux milieux, et partiellement prémélangé. Chacun de ces régimes a sa particularité. D'autres phénomènes peuvent apparaître, tels que l'extinction locale ou globale de flamme, pulsation de flamme, retour de flamme, pénétration d'une flamme dans un spray etc.

Tous ces phénomènes font apparaître des grandeurs difficilement mesurables dans le cadre expérimental (mesure de pression non intrusive, mesure de la masse de fuel gazeux par exemple). C'est pourquoi les outils numériques sont aujourd'hui très sollicités car ceux-ci permettent d'accéder à ces grandeurs plus facilement. De plus, la combustion turbulente est un domaine actuellement bien compris et relativement bien maîtrisé. Cette maîtrise devient beaucoup plus complexe lors de la présence d'un spray. Par exemple, lors de l'évaporation, des termes sources très locaux apparaissent [1], et induisent des phénomènes qui n'existent pas dans le cas de la combustion monophasique. Même les caractéristiques de la turbulence sont différentes dans le cas diphasique, puisque dans le sillage des gouttes, de toutes petites structures peuvent apparaître.

Afin de comprendre ces interactions dans plusieurs cas de combustion diphasique turbulente, l'utilisation d'un code de simulation numérique DNS¹ pour la CFD² nommé *Asphodele* a permis l'accès aux grandeurs physiques les plus petites. Un des objectifs de cette thèse a été de développer des modules numériques pour le solveur *Asphodele* permettant des études poussées de la combustion de sprays. Cependant, la prise en compte de tous les phénomènes apparaissant sur la figure 1 ne pourront être étudiés, ni même simulés, leur modélisation et implémentation étant relativement complexe (break-up, coalescence, pertes radiatives...). Les configurations étudiées seront donc faites de façon à ce que ces phénomènes non pris en compte puissent être négligeables. De plus, l'inconvénient majeur de la DNS est l'impossibilité d'utiliser cette méthode sur des systèmes à échelle industrielle. Le développement de méthodes Eulériennes pour la prise en charge du spray sont donc actuellement à l'étude. Afin de valider ces modèles, plusieurs configurations test ont été mises en place en DNS pour comparer le comportement de ces nouveaux modèles dans plusieurs cas distincts.

Cette thèse se décompose en quatre parties. La première partie décrit des équations résolues dans ce code numérique, ainsi que les principaux algorithmes. La deuxième partie porte sur l'étude de la combustion diphasique laminaire. Nous verrons l'impact de la vitesse d'évaporation des gouttes d'un spray sur une flamme s'y propageant. La troisième partie porte sur la combustion turbulente diphasique. Ce chapitre portera sur la comparaison entre la gestion La-

¹Direct Numerical Simulation

²Computational Fluid Dynamics

grangienne des gouttes et d'une nouvelle méthode de prise en charge Eulérienne du spray. Trois parties ont été abordées dans ce chapitre. Le premier concerne la comparaison entre les deux formalismes dans le cas de sprays se collisionnant. Le deuxième concerne la comparaison entre prise en charge Eulérienne et Lagrangienne dans le cas de sprays initialement monodispersé en milieu turbulent. La ségrégation obtenue par chaque méthode sera comparée, ainsi que le mélange lorsque le spray s'évapore, et enfin la structure d'un front de flamme se propageant dans ce milieu. Finalement, cette étude sera étendue au cas où le spray est initialement polydispersé.

Chapitre 2

Développements numériques

DE GUICHE : Il est des plus experts.
Il vous corrigera seulement quelques vers...
CYRANO : Impossible, Monsieur ; mon sang se coagule
En pensant qu'on y peut changer une virgule.

Edmond Rostand

2.1 Introduction

L'évolution très rapide des moyens de calculs numériques a permis, depuis quelques années, une très forte augmentation du nombre d'outils DNS. En effet, les solveurs DNS, qui permettent la simulation des plus petites échelles de turbulence, ont une résolution telle que les maillages utilisés ont une taille extrêmement importante. Cependant, un équilibre est nécessaire afin que les moyens de calcul dont nous disposons permettent – en un temps raisonnable – d'effectuer des simulations de domaines de taille macroscopique pendant des temps suffisamment longs pour que des statistiques significatives puissent être effectuées. Ainsi, les phénomènes dont les temps caractéristiques sont trop faibles doivent être négligés. Le principal phénomène restrictif pour les temps de simulation d'écoulements gazeux sont les phénomènes acoustiques, dont la vitesse de propagation nécessite des pas de temps très faibles. Le solveur que nous allons décrire dans ce chapitre utilise l'approximation LMN ¹, autrement dit les nombres de Mach mis en jeu sont suffisamment faibles pour que la compressibilité du gaz puisse être négligée. Cette approximation reste valable jusqu'à des nombres de Mach de l'ordre de $M = 0.3$.

¹Low Mach Number

Le fluide gazeux porteur est modélisé par les équations classiques de Navier-Stokes. La thermodynamique est basée sur la relation des gaz parfaits en multi-espèces. Afin de gagner en précision, ces équations seront normalisées par la suite. La description de ces équations, ainsi que leur normalisation et l'approximation LMN sont décrites dans la section 2.2.1 (page 25). La chimie est estimée par une loi d'Arrhenius. La méthode numérique utilisée pour déterminer ce terme permet d'utiliser une cinétique simple dans des mélanges à richesse variable, comme nous le verrons dans la section 2.4.3.2 (page 70), consacrée à la chimie. En ce qui concerne le spray, il existe deux principales méthodes permettant de le modéliser : un suivi Lagrangien ou un suivi Eulérien. Les avantages et inconvénients de chaque méthode dépendent fortement des formalités et des outils de calculs. Le solveur mis en oeuvre dans ces travaux utilise une approche Lagrangienne des gouttes, un second solveur (*Muses3D²*) utilisant une approche Eulérienne, développé au laboratoire EM2C-ECP par l'équipe de Marc Massot, a été couplé avec ce solveur. Cela permet des études comparatives des modèles de dispersion. Les lois utilisées pour l'évolution Lagrangienne du spray, ainsi que son interaction avec le gaz sont décrites dans la section 2.3.1 (page 32). Leurs équivalentes Eulériennes seront décrites dans la section 2.2.3 (page 31).

2.2 Équations résolues

2.2.1 Aérodynamique

Les équations gouvernant le gaz sont les équations de Navier-Stokes, auxquelles ont été effectuées une approximation LMN, ainsi qu'une normalisation pour augmenter la précision de leur résolution. Ces équations comportent :


- une équation de transport de quantité de mouvement par direction,
- une équation de transport par espèce,
- une équation de transport de l'énergie.

Pour fermer ces équations, la thermodynamique des gaz parfaits sera utilisée.

²Multi-fluid Solver for Eulerian Spray


Transport de la quantité de mouvement

L'équation de transport de la quantité de mouvement dans la direction i s'écrit

– Évolution de u_i 

$$\frac{\partial \rho u_i}{\partial t} + \frac{\partial \rho u_i u_j}{\partial x_j} = -\frac{\partial p}{\partial x_i} + \frac{\partial \tau_{ij}}{\partial x_j} \quad (2.1)$$

– Convection 

– Pression 

– Cisaillement 

avec ρ la masse volumique du gaz [$kg.m^{-3}$], p la pression [Pa], u_i [$m.s^{-1}$], la vitesse du gaz dans la direction i et τ_{ij} le tenseur des contraintes visqueuses. Ce tenseur est déterminé en utilisant les hypothèses de Newton ³. Soit :

$$\tau_{ij} = \mu \left[\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right] + \eta \frac{\partial u_l}{\partial x_l} \delta_{ij} , \quad (2.2)$$

avec μ la viscosité dynamique du fluide [$kg.m^{-1}.s^{-1}$], et η la viscosité de volume [$kg.m^{-1}.s^{-1}$].

A l'hypothèse de Newton on ajoute l'hypothèse de Stokes [2], qui suppose que $3\eta + 2\mu = 0$, ce qui nous donne


$$\tau_{ij} = \mu \left[\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right] - \frac{2\mu}{3} \frac{\partial u_l}{\partial x_l} \delta_{ij} . \quad (2.3)$$


Transport des espèces


Afin de pouvoir résoudre un fluide multi-espèces, il est nécessaire de transporter la fraction massique, notée Y_k pour l'espèce k . Les fractions massiques respectent l'équation de la masse, en supposant que toutes les espèces présentes soient considérées : $\sum_k Y_k = 1$.


³Cette hypothèse suppose que le tenseur des contraintes visqueuses est proportionnel à la partie symétrique du tenseur des taux de déformations.

L'équation de transport de l'espèce k est donnée par

– Évolution de Y_k  $\frac{\partial \rho Y_k}{\partial t} + \frac{\partial \rho(u_i + V_i^C)Y_k}{\partial x_i} = \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\rho D_k \frac{\partial Y_k}{\partial x_i} \right) + \dot{\omega}_k$ (2.4)

– Convection et correction 

– Diffusion 

– Terme source 

où V_i^C est une vitesse de correction [$m.s^{-1}$], D_k est la diffusivité de l'espèce k [$m^2.s^{-1}$] et $\dot{\omega}_k$ un terme source de l'espèce k , chimique, ou d'évaporation par exemple [$kg.m^{-3}.s^{-1}$].


La vitesse de correction est estimée par :

$$V_i^C = \sum_k D_k \frac{\partial Y_k}{\partial x_i}, \quad (2.5)$$


afin de respecter le fait que la somme des flux diffusifs est nulle [3].

Transport de l'énergie sensible


L'énergie sensible e_s est l'énergie volumique du fluide [$J.kg^{-1}$]. Elle est transportée par l'équation suivante :

– Évolution de e_s  $\frac{\partial \rho e_s}{\partial t} + \frac{\partial \rho u_i e_s}{\partial x_i} = \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\lambda \frac{\partial T}{\partial x_i} + E_i^C \right) + \frac{\partial \rho u_i}{\partial x_i} + \frac{\partial \tau_{ij} u_i}{\partial x_j} + \dot{\omega}_{es}$ (2.6)

– Convection 

– Conduction + correction 

– Terme de pression 

– Production visqueuse 

– Terme source 

avec E_i^C la correction de l'énergie sensible [$J.s^{-1}.m$], λ la conductivité thermique du milieu [$W.m^{-1}.K^{-1}$] et $\dot{\omega}_{es}$ le terme source d'énergie [$J.s^{-1}.m^{-3}$].

Cette correction est estimée par

$$E_i^C = \rho \sum_k h_{S,k} D_k \frac{\partial Y_k}{\partial x_i}, \quad (2.7)$$

avec $h_{S,k}$ l'enthalpie de formation de l'espèce k [$J.kg^{-1}$].

Les équations aérodynamiques ayant été exposées dans ce chapitre, nous allons maintenant décrire les équations permettant de prendre en compte les gouttes.

2.2.2 Équations cinétiques

Le suivi Eulérien des gouttes est inspiré des équations cinétiques des gaz. Ces équations sont une approche probabiliste de l'agitation moléculaire et de la détermination des caractéristiques d'un gaz. Par extension, ce modèle a, par la suite, été utilisé pour le suivi Eulérien de gouttes, qui peuvent être vues comme des particules subissant une agitation. Nous allons voir que l'analogie entre les propriétés d'un gaz, régies par les équations cinétiques de ses molécules et les propriétés d'un spray régies par les mêmes équations cinétiques, est très prononcée [4].

Cette approche suppose qu'un gaz peut être décrit localement par une fonction de densité de probabilité (PDF ⁴). Cette fonction décrit toutes les propriétés statistiques du gaz, et exprime pour chaque gamme de paramètres (vitesse, position, propriétés physique des particules) leur probabilité de présence. Un spray en phase disperse peut également être décrit par cette méthode. En effet, si les gouttes sont considérées comme sphériques, sans break-up ni coalescence, il est moins difficile d'estimer ses propriétés ainsi que son interaction avec le gaz porteur. Les paramètres pertinents pour toute la suite de cette étude sont relatifs à la géométrie (diamètre a , surface S ou volume \mathcal{V}) de ces gouttes, leur position \mathbf{X} , leur vitesse \mathbf{V} et leur température T . Il a été démontré [5] que la formulation par la surface est le paramètre le plus pertinent pour utiliser un modèle cinétique.

La PDF, dépendante du temps, dépendra donc de toutes ces variables et se note $f(t, \mathbf{X}, \mathbf{V}, S, T)$. On peut, à partir de cette fonction, déterminer la probabilité $f(t, \mathbf{X}, \mathbf{V}, S, T) d\mathbf{X} d\mathbf{V} dS dT$ qu'une goutte ait une position dans $[\mathbf{X}, \mathbf{X} + d\mathbf{X}]$, avec une vitesse appartenant à $[\mathbf{V}, \mathbf{V} + d\mathbf{V}]$, avec une surface S entre $[S, S + dS]$ et une température entre $[T, T + dT]$. Il est nécessaire d'insister sur la distinction entre la PDF et la NDF ⁵. La première, notée f , indique la probabilité d'existence d'une particule de paramètres fixés ; la seconde, notée f_N , est le nombre de particules ayant ces paramètres. On a donc :

$$\int_{S=0}^{+\infty} \int_{x=-\infty}^{+\infty} \int_{u=-\infty}^{+\infty} \int_{T=0}^{+\infty} f dS dx du dT = 1 , \quad (2.8)$$

et


$$\int_{S=0}^{+\infty} \int_{x=-\infty}^{+\infty} \int_{u=-\infty}^{+\infty} \int_{T=0}^{+\infty} f_N dS dx du dT = N , \quad (2.9)$$

⁴Probability Density Function


⁵Number Density Function


avec N le nombre total de particules.


L'évolution de cette fonction est proposée pour la première fois par Williams [6] :


– Évolution de f 


$$\frac{\partial f}{\partial t} + \frac{\partial u_i f}{\partial x_i} + \frac{\partial F_i f}{\partial u_i} - \frac{\partial R_s f}{\partial S} + \frac{\partial E f}{\partial T} = \Gamma + Q \quad (2.10)$$


– Transport  → $\frac{\partial u_i f}{\partial x_i}$

– Forces  → $\frac{\partial F_i f}{\partial u_i}$

– Évolution de la section  → $-\frac{\partial R_s f}{\partial S}$

– Évolution de la température  → $\frac{\partial E f}{\partial T}$

– Terme de collision  → Γ

– Break-up  → Q

où

- \mathbf{F} est la force massique appliquée sur les particules : $\mathbf{F} = d\mathbf{u}/dt$,
- R_s est le taux d'évolution de la surface des gouttes : $R_s = -dS/dt$,
- E est l'énergie thermique transférée aux gouttes : $E = dT/dt$,
- Γ est un opérateur de collision
- Q est un opérateur de rupture

Ces termes ont des origines physiquement connues et des modèles existent dans des cas simples. Nous allons les détailler par la suite.

2.2.2.1 Force massique

Ce terme source de vitesse peut avoir plusieurs origines : la gravité, la traînée, la force de Magnus, la force de Basset, la déviation par un champ électromagnétique de particules chargées etc. Cette force est estimée par :

$$\mathbf{F} = \frac{1}{m_d} (\mathbf{P} + \mathbf{T} + \mathbf{F}_\Omega + \mathbf{F}_{vm} + \mathbf{F}_B + \mathbf{F}_e) , \quad (2.11)$$

à laquelle une force de correction \mathbf{F}_{vm} a été ajoutée.

- \mathbf{P} est la force due à la gravité : le poids ($m_d \mathbf{g}$) et la poussée d'Archimède ($-\rho_g \mathcal{V}_d \mathbf{g}$), avec \mathbf{g} l'accélération de la pesanteur [$m.s^{-2}$], m_d la masse de la particule [kg], \mathcal{V}_d son volume [m^3] et ρ_g la masse volumique du gaz porteur [$kg.m^{-3}$],
- \mathbf{T} est la force de traînée. Cette force peut être estimée de plusieurs manières qui sont décrites dans le paragraphe 2.3.1 (page 32),
- \mathbf{F}_Ω est la force de Magnus, due à l'apparition d'un gradient de pression à la surface d'une


- goutte en rotation. Cette force s'exprime par $\mathbf{F}_\Omega = \mathcal{M}\Omega \wedge \mathbf{V}$, avec Ω son vecteur rotation (en $[rad.s^{-1}]$), \mathbf{V} sa vitesse $[m.s^{-1}]$ et \mathcal{M} un coefficient en $[kg.rad^{-1}]$,
- \mathbf{F}_e est une force due à l'application d'un champ électromagnétique sur une particule chargée. Cette force est estimée par la force de Laplace $\mathbf{F}_e = q_p(\mathbf{V} \wedge \mathbf{B} + \mathbf{E})$, avec q_d la charge de la particule $[C]$, \mathbf{V} sa vitesse $[m.s^{-1}]$, \mathbf{E} le champ électrique $[V.m^{-1}]$ et \mathbf{B} le champ magnétique $[T]$,
- \mathbf{F}_{vm} est une force de correction due à l'accélération du gaz autour de la particule,
- \mathbf{F}_B la force de Basset, qui est due au délai nécessaire pour que la couche limite s'adapte à la nouvelle vitesse de la particule.

Dans cette étude, on ne s'intéressera pas à l'effet éventuel d'un champ électromagnétique sur des particules chargées. De plus, les forces \mathbf{F}_{vm} et \mathbf{F}_B sont incompatibles avec la théorie cinétique [7]. On considère enfin que les gouttes ne tournent pas sur elles-mêmes. Ces approximations sont en accord avec Dufour [8], qui estime que seules les forces de gravité et de traînée ne sont pas à négliger.


De ces deux forces, l'une est négligeable (en ordre de grandeur) : la gravité. En effet, le poids est proportionnel à a^3 , la force de traînée est proportionnelle à a^2 . Or, comme le diamètre a de la particule est très faible, le rapport $\|\mathbf{P}\| \ll \|\mathbf{T}\|$ tend à être négligeable. Le seul terme modélisé ici sera donc la force de traînée \mathbf{T} .


2.2.2.2 Taux d'évolution de la surface des gouttes

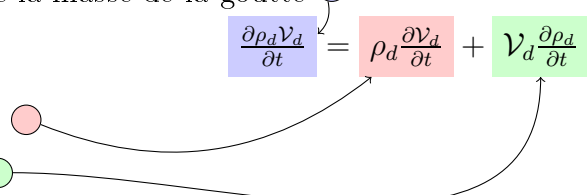
Deux phénomènes majeurs sont à l'origine d'une modification de la surface d'une particule. Le premier est l'évaporation du liquide composant la goutte. Le second est la dilatation due à l'évolution de la température de la particule :

– Évolution de la masse de la goutte 

$$\frac{\partial \rho_d \mathcal{V}_d}{\partial t} = \rho_d \frac{\partial \mathcal{V}_d}{\partial t} + \mathcal{V}_d \frac{\partial \rho_d}{\partial t} \tag{2.12}$$

– Évaporation 

– Dilatation 



Le volume $\mathcal{V}_d(S)$ de la goutte est égal à $S^{3/2}/(6\sqrt{\pi})$. Dans cette étude, on considère ρ_d constant, donc seule l'évaporation est en cause dans l'évolution du rayon des particules.

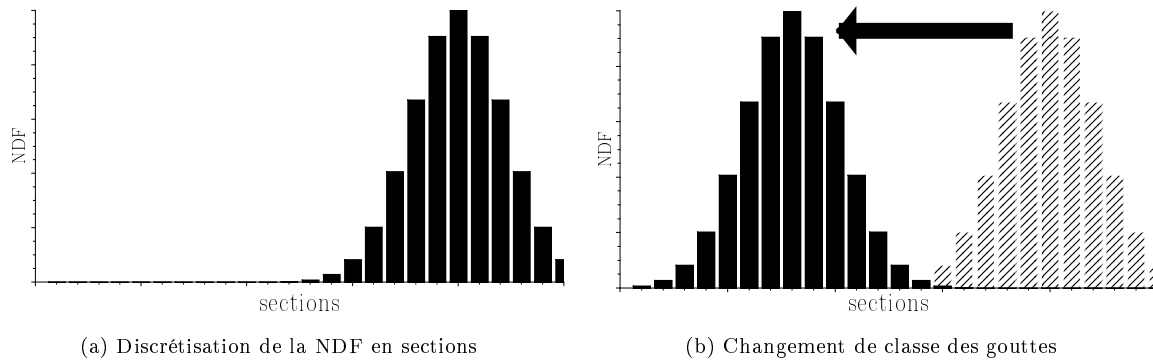


FIG. 2.1: NDF et évolution de celle-ci dans le cas d'une évaporation

2.2.2.3 Transfert thermique

L'évolution de la température des gouttes est principalement due aux transferts thermiques avec le gaz environnant. Les effets radiatifs sont des causes plausibles lors de la présence de gaz très chauds. Les modèles utilisés pour prendre en compte ces phénomènes radiatifs sont décrits dans [9]. Nous considérons ici que seuls les transferts par conduction existent, la température des gaz que nous considérons n'étant pas suffisamment élevée pour que le rayonnement ait un impact significatif sur les gouttes. Les modèles permettant d'estimer ce terme sont expliqués dans la section 2.3.1 (page 32).

2.2.3 Méthode multi-fluides pour la simulation Eulérienne de sprays

La méthode multi-fluides, initiée par Greenberg, Silverman et Tambour [10] et développée en 2001 par Laurent et Massot [11] propose de discrétiser la PDF f ou la NDF f_N en fonction du paramètre géométrique des gouttes (rayon, surface ou volume). Chaque section ainsi définie possède des propriétés considérées comme identiques : vitesse, taille etc. Dans ces travaux, la fonction sera discrétisée en fonction du diamètre des gouttes a . La NDF discrétisée en fonction de ces sections est représentée par la figure 2.1a. Notons qu'une évaporation du spray revient à effectuer un changement de classe des gouttes, comme représenté par la figure 2.1b. Ce type de configuration nécessite une bonne modélisation de plusieurs phénomènes : le transport des gouttes [12, 13] et leur évaporation [14], y compris en milieu réactif [15]. Ces méthodes ont été validées [16] dans le cas d'une flamme diphasique dans une THI.

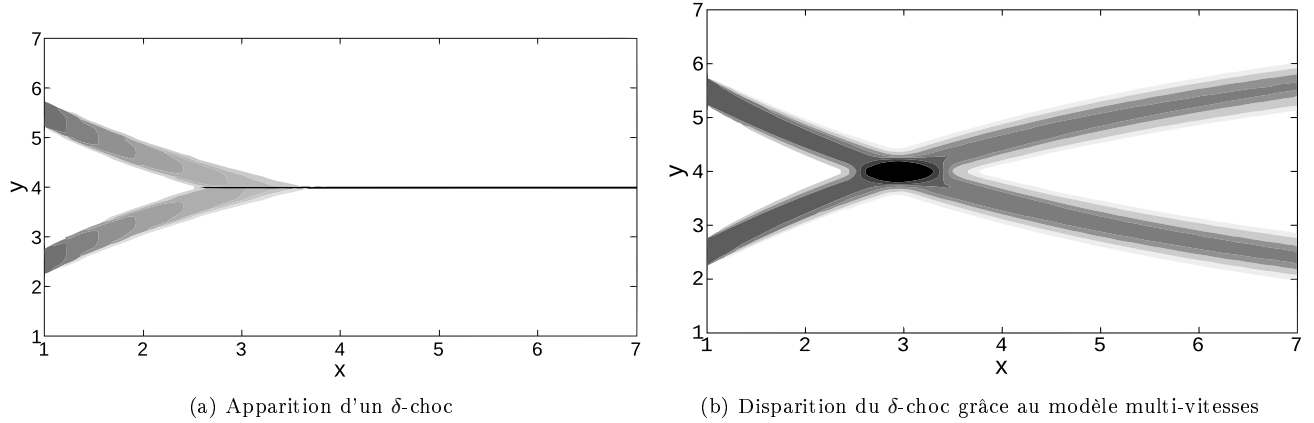
2.3 Code Asphodele

Le code *Asphodele*, développé au CORIA, permet la simulation de fluides diphasiques en phase disperse. Le modèle Lagrangien de spray a été implémenté dans ce code. Il a été couplé avec le solveur Eulérien de spray développé par l'équipe de Marc Massot, à l'École Centrale Paris (EM2C). Ce code se nomme *Muses3D*. Dans la mesure où les phénomènes acoustiques ne sont pas pris en compte au cours de ces travaux, l'approximation bas nombre de Mach (LMN) est utile et sera appliquée ici. En effet, les phénomènes compressibles sont à l'origine de phénomènes acoustiques dont les temps caractéristiques sont très faibles. Afin de garantir la stabilité du modèle de résolution, il est nécessaire d'intégrer selon des pas de temps d'autant plus petits que ces temps caractéristiques sont faibles. L'approximation LMN ignore donc les phénomènes acoustiques, mais n'est valable que pour de faibles nombres de Mach.

2.3.1 Évolution du spray Lagrangien

La spécificité du code *Asphodele* est de prendre en compte l'évolution d'un spray en phase disperse. Deux types de description de ce spray existent : la description Eulérienne et la description Lagrangienne. La description Eulérienne a été décrite dans le chapitre précédent (section 2.2.2, page 28). Cette formulation consiste à transporter les caractéristiques de ces gouttes moyennée dans chaque section de chaque maille. Un inconvénient majeur de cette méthode intervient lorsque les caractéristiques physiques des gouttes ne sont plus identiques dans chaque maille. Prenons l'exemple de deux paquets de gouttes qui se croisent. Dans ce cas, dans une même maille, il existe deux paquets de gouttes dont les vitesses sont différentes. Considérer cette caractéristique constante pour toutes les gouttes de la maille conduit à la formation de δ -chocs⁶, comme représenté sur la figure 2.2a. De nombreux modèles ont été développés [17] afin de prendre en compte les zones où les gouttes possèdent une grande diversité de vitesse (par exemple lors d'un croisement de jets), comme nous pouvons le voir sur la figure 2.2b. Des modèles de collision de gouttes ont aussi été mis en place, mais cela nécessite un traitement numérique souvent rédhibitoire [18]. De plus, un suivi Eulérien reste un suivi statistique, il n'est donc pas possible d'avoir la même précision que par un suivi Lagrangien où les gouttes sont considérées individuellement, ou par paquet de gouttes ayant les mêmes caractéristiques. Afin de valider ces nouveaux modèles Eulériens, une référence est nécessaire. Cette référence généralement utilisée est la formulation Lagrangienne, car elle est déterministe. Nous détaillerons ici la manière dont les gouttes sont prises en charge, ainsi que les lois régissant leur comportement.

⁶ δ -chocs = accumulation de densité de goutte dans les zones de croisement de celles-ci


 FIG. 2.2: Apparition d'un δ -choc selon les modèles Eulériens utilisés.

2.3.1.1 Loi d'évolution du mouvement

De part leur faible taille, l'interaction du fluide sur la vitesse des gouttes (et réciproquement) est à prendre en compte. Pour ce faire, on détermine la force de traînée de la goutte due à son environnement, puis en appliquant la première loi de Newton, on détermine sa vitesse.

Pour déterminer la manière dont la goutte va évoluer dans le liquide, nous utilisons la somme des forces qu'exerce un fluide de vitesse $\mathbf{u}(\mathbf{X}, t)$ sur une goutte se situant en \mathbf{X} , de vitesse $\mathbf{V}(t)$ et de section $S = \pi a^2$, avec a le diamètre de la goutte.

La forme générale de l'équation du mouvement est déduite du principe fondamental de la dynamique :

$$m_d \frac{d\mathbf{V}}{dt} = \sum \mathbf{F} , \quad (2.13)$$

avec $m_d = \pi \rho_d a^3 / 6$ la masse de la goutte.

Seul le terme de traînée intervient dans cette équation, les autres forces sont négligées car leur ordre de grandeur est minime. La traînée est définie par :

$$\mathbf{T} = \frac{\pi}{8} \rho a^2 C_D \|\mathbf{u}(\mathbf{X}) - \mathbf{V}\| (\mathbf{u}(\mathbf{X}) - \mathbf{V}) , \quad (2.14)$$

avec $\mathbf{u}(\mathbf{X})$, la vitesse du gaz à la position de la goutte, et C_D le coefficient de traînée de la goutte, défini par :

$$C_D = \frac{24}{Re_p} Cu , \quad (2.15)$$

avec Cu un facteur correctif dû à l'accélération du gaz autour de la goutte. Plusieurs formulations empiriques existent pour ce coefficient [19]. Sauf spécification, ce coefficient sera pris en

compte et sera égal à :

$$Cu = 1 + \frac{Re_p^{2/3}}{6} \quad , \quad Re_p = \frac{\rho ||\mathbf{u}(\mathbf{X}) - \mathbf{V}|| a}{\mu} Re . \quad (2.16)$$

Re_p est le nombre de Reynolds particulaire, lié à l'écoulement autour de la goutte et à l'interaction de celle-ci avec cet écoulement.

On obtient donc l'équation du mouvement :

$$\frac{d\mathbf{V}}{dt} = \frac{\mathbf{u}(\mathbf{X}) - \mathbf{V}}{t_p} \quad , \quad \text{avec } t_p = \frac{\rho_d a^2}{18Cu\mu} . \quad (2.17)$$

2.3.1.2 Lois d'évaporation

La modélisation de l'évaporation des gouttes peut suivre plusieurs lois. Des lois de plus en plus complexes mais plus précises ont été développées.

La première est la loi dite en “ d^2 ”, stipule que l'évaporation des gouttes est constante et ne dépend en rien de son environnement.

La seconde – plus précise – stipule que leur évaporation ne dépend que de la température de leur environnement.

Enfin la troisième prend en compte la température, la pression et le niveau de vapeur du milieu environnant. Afin de déterminer le taux d'évaporation de la goutte, il est nécessaire de résoudre les équations de la mécanique des fluides permettant de connaître le profil des couches limites de vapeur et de température à la surface de la goutte. Dans un premier temps, on considérera le diamètre de la goutte comme constant (par exemple expérimentalement en alimentant le centre de la goutte en combustible) afin de déterminer les lois d'évaporation quasi-stationnaire. On définit les rayons des couches limites de température et de diffusion des espèces, respectivement par δ_T et δ_Y . Notons qu'un Lewis unitaire implique $\delta_T = \delta_Y$.

On considérera les propriétés des champs Y_F et T comme étant égales à leur valeur à l'infini (i.e. loin de la goutte) : $Y_F(\delta_Y) = [Y_F]_\infty$ et $T(\delta_T) = [T]_\infty$. Un mouvement convectif autour de la goutte peut être considéré en introduisant deux nombres sans dimension :

– Le nombre de Sherwood convectif est défini par

$$Sh_c = 2 \frac{\delta_Y}{\delta_Y - \delta} \quad ,$$

avec $\delta = a/2$ le rayon de la goutte. Dans une atmosphère au repos, c'est à dire sans convection, on a $\delta_Y \rightarrow \infty$, donc $Sh_c \rightarrow 2$.

– Le nombre de Nusselt convectif est défini par

$$Nu_c = 2 \frac{\delta_T}{\delta_T - \delta} .$$

Lui aussi tend vers 2 quand $\delta_T \rightarrow \infty$.

2.3.1.3 Détermination du transfert de masse

On écrit l'évolution de la fraction massique de l'espèce S de la goutte à son alentour. On ré-écrit pour cela les équations de transport en coordonnées sphériques :

$$\rho U_r r^2 \frac{dY_S}{dr} = \frac{d}{dr} \left(\rho r^2 D \frac{dY_S}{dr} \right) . \quad (2.18)$$

Sachant de plus que la conservation de la masse implique :

$$4\pi\rho U_r r^2 = 4\pi\rho(\delta)U_r(\delta)\delta^2 = \text{constante}. \quad (2.19)$$

On a les conditions limites suivantes :

$$\left\{ \begin{array}{ll} Y_S = Y_{S,\infty} & \text{pour } r = \delta_Y , \\ Y_S = Y_{S,\delta} & \text{pour } r = \delta , \\ \rho_\delta U_r(\delta) = -\rho_\delta D_\delta \left(\frac{dY_S}{dr} \right)_\delta + \rho_\delta U_r(\delta) Y_{S,\delta} & \text{pour } r = \delta . \end{array} \right. \quad (2.20)$$

Le nombre de Spalding massique noté B_M est défini par :

$$B_M = \frac{Y_S^{(sat)} - Y_S(\mathbf{X})}{1 - Y_S^{(sat)}} . \quad (2.21)$$

Après intégration, on obtient la loi d'évaporation :

$$\delta U_r(\delta) = \frac{1}{2} Sh_c D \ln(b_\infty - b_\delta + 1) = \frac{1}{2} Sh_c D \ln(1 + B_M).$$

Le temps caractéristique d'évaporation de la goutte, noté t_v est donné par la relation suivante :

$$\begin{aligned} t_v &= \frac{\rho_d \delta^2}{2\rho(\delta)\delta U_r(\delta)} \\ &= \frac{\rho_d S_c \delta^2}{Sh_c \mu \ln(1 + B_M)} . \end{aligned} \quad (2.22)$$

L'évolution de la surface de la goutte est finalement donnée par

$$\frac{da^2}{dt} = -\frac{a^2}{t_v} . \quad (2.23)$$

Loi du d^2

Les équations de transfert d'énergie et de transfert de masse sont coûteuses à intégrer en temps (de part la présence de logarithmes). C'est pourquoi de nombreux modèles de sprays sont basés sur la loi dite "du d^2 ". Cette loi suppose que la surface de la goutte évolue linéairement en temps. Cette loi est valable dans des écoulements où la saturation est quasi-constante.

Dans ce contexte, la loi d'évolution de la masse de la goutte est constante. On utilise la relation 2.23. On obtient :

$$\frac{da^3}{dt} = -\frac{6}{\pi\rho_d} \pi\rho_d a Sh_c D \ln(1 + B_M) ,$$

ou bien

$$\frac{da^2}{dt} = -\frac{4Sh_c\mu}{Sc\rho_d} \ln(1 + B_M) ,$$

qui donne, une fois intégrée et sachant qu'à l'instant initial ($t = 0$), le diamètre de la goutte est a_0 :

$$a^2(t) = -\frac{4Sh_c\mu}{Sc\rho_d} \ln(1 + B_M)t + a_0 .$$

Le temps caractéristique d'évaporation de la goutte, noté τ_v dans le cas de la loi en d^2 est donc :

$$\tau_v = \frac{\rho_d S_c a_0^2}{4Sh_c\mu \ln(1 + B_M)} . \quad (2.24)$$

Loi dépendante de la température, de la pression et de la saturation par la relation de Clausius-Clapeyron (Saturation Full Droplet : SFD)

La relation de Clausius-Clapeyron dans le cas d'un changement de phase permet de calculer le nombre de Spalding. Cette relation est valable lorsque, dans le diagramme des phases, on se situe loin de l'état critique. On suppose la goutte constituée d'un liquide d'espèce S . Les

variables caractéristiques de la saturation seront notées $X^{(sat)}$. Cette relation est la suivante :

$$\frac{dP_k^{(sat)}}{P_k^{(sat)}} \simeq \frac{L_v dT}{R_S T^2}, \quad (2.25)$$

où L_v est la chaleur latente du liquide de la goutte, R_S est la constante des gaz parfaits liée à l'espèce S . En intégrant cette relation relativement à un état de référence ($P_{k,0}$ et $T_{k,0}$), on obtient

$$\ln \left(\frac{P_k^{(sat)}}{P_{k,0}} \right) = -\frac{L_v}{R_S} \left(\frac{1}{T_k^{(sat)}} - \frac{1}{T_{k,0}} \right).$$

Puis, on obtient

$$P_k^{(sat)} = P_{k,0} \exp \left(-\frac{L_v}{R_S} \left(\frac{1}{T_k^{(sat)}} - \frac{1}{T_{k,0}} \right) \right). \quad (2.26)$$

La température de référence utilisée est la température d'ébullition du liquide de la goutte à pression de référence égale à $P_{k,0} = 101133 \text{ Pa}$. D'autre part, la fraction massique de l'espèce S est définie par

$$Y_S = \frac{\chi_S M_S}{\sum_i \chi_i M_i}, \quad (2.27)$$

avec M_i la masse molaire de l'espèce i , et χ_i la fraction molaire de l'espèce i , égale à sa pression partielle divisée par la pression totale. On a donc :

$$\chi_S^{(sat)} = \frac{P_S^{(sat)}}{P(\mathbf{X})}. \quad (2.28)$$

On obtient

$$Y_S^{(sat)} = \left(1 + \frac{1}{\chi_F^{(sat)}} \sum_{i \neq S} \frac{\chi_i M_i}{M_S} \right)^{-1}. \quad (2.29)$$

Et finalement :

$$Y_S^{(sat)} = \left(1 + \frac{P(\mathbf{X})}{P_S^{(sat)}} \sum_{i \neq S} \frac{\chi_i M_i}{M_S} \right)^{-1}. \quad (2.30)$$

Grâce à la relation 2.21, cela nous permet de remonter directement au nombre de Spalding.

Loi dépendante de la température en utilisant l' Indexation Artificielle de Température (IAT)

Dans le paragraphe précédent, nous avons pu déterminer les paramètres de saturation à la surface de la goutte en fonction de la pression, de la fraction massique de l'espèce S et de la température. Cependant, dans un cas simplifié où l'espèce S est relativement diluée, on se situe dans une tranche de fraction massique généralement comprise entre $0 < Y_S < 0.2$. De plus,

la pression du domaine variant peu, on en déduit que ces paramètres de saturation peuvent s'exprimer uniquement en fonction de la température. Le nombre de transfert $B_M(T, Y_S, P)$ peut donc s'exprimer indépendamment de Y_S et de P , ce qui revient à déterminer $B_M(T)$.

En première approximation, on peut considérer la valeur de B_M comme linéaire en fonction de T . Le modèle IAT peut donc être défini par :

$$B_M(T) = \Pi (T(\mathbf{X}) - T_u) ,$$

avec Π une constante. Dans ce cas, la goutte est considérée comme étant toujours à son état de saturation à sa surface mais avec un seul paramètre externe : la température du gaz $T(\mathbf{X})$. Le paramètre Π peut être déterminé à partir de l'équation du temps caractéristique d'évaporation de la goutte τ_v (équation 2.24). Cette relation est basée sur un nombre de Spalding constant, donc dans le modèle DSL. On peut donc en déduire un nombre de Spalding théorique $B_{M,0}$ basé sur le temps caractéristique d'évaporation τ_v désiré :

$$B_{M,0} = \exp\left(\frac{Sc \rho_d a_0^2}{4Sh_c \mu \tau_v}\right) - 1 ,$$

avec a_0 le diamètre initial des gouttes.

Le coefficient Π est basé sur l'écart de température entre gaz brûlés (T_b) et gaz frais (T_u).

$$\Pi = \frac{1}{T_b - T_u} B_{M,0} .$$

Finalement, on obtient :

$$\Pi = \frac{1}{T_b - T_u} \left[\exp\left(\frac{Sc \rho_d a_0^2}{4Sh_c \mu \tau_v}\right) - 1 \right] ,$$

d'où :

$$B_M = \frac{1}{T_b - T_u} \left[\exp\left(\frac{Sc \rho_d a_0^2}{4Sh_c \mu \tau_v}\right) - 1 \right] (T(\mathbf{X}) - T_u) . \quad (2.31)$$

Le temps caractéristique d'évaporation de la goutte, noté τ_v dans le cas de la loi IAT est donc :

$$\tau_v = \frac{\rho_d Sc a_0}{4Sh_c \mu \ln(1 + B_M)} .$$

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

2.3.1.4 Détermination du transfert d'énergie

De manière similaire, on peut écrire l'équation de diffusion de la chaleur à partir de la surface de la goutte :

$$\rho(\delta)U_r(\delta)r^2\frac{dC_pT}{dr} = \frac{d}{dr} \left(r^2\lambda\frac{dT}{dr} \right) . \quad (2.32)$$

Les conditions limites de la température pour la goutte sont les suivantes :

$$\left\{ \begin{array}{ll} T = T_\infty & \text{pour } r = \delta_T , \\ T = T_\delta & \text{pour } r = \delta , \\ \lambda \left[\frac{dT}{dr} \right]_\delta = h_c(T_\infty - T_{k,\delta}) = \rho(\delta)U_r(\delta)L_v + \frac{Q_l}{\pi d_p^2} & \text{pour } r = \delta , \end{array} \right. \quad (2.33)$$

avec L_v la chaleur latente du liquide dont est constituée la goutte, et Q_l sa capacité calorifique. Une partie de la chaleur qui atteint la goutte va servir à évaporer le liquide à sa surface (L_v), l'autre partie va servir à la chauffer (Q_l). Afin de fermer ce système d'équations, on utilise la conservation de la masse donnée par :

$$4\pi\rho U_r r^2 = 4\pi\rho(\delta)U_r(\delta)\delta^2 = \text{constante} . \quad (2.34)$$

Le taux d'évaporation W_v ($[kg.s^{-1}]$) de la goutte est défini par

$$\frac{dm_d}{dt} = -W_v , \quad (2.35)$$

où

$$W_v = 4\pi\rho(\delta)U_r(\delta)\delta^2 ,$$

avec $m_d = \pi\rho_d a^3/6$ la masse de la goutte. Il est maintenant possible d'expliciter l'équation de la température de la goutte :

$$\frac{dm_d C_p d T_d}{dt} = W_v (H_c - L_v - T_d C_p) , \quad (2.36)$$

avec

$$\left\{ \begin{array}{ll} T_d & \text{la température de la goutte,} \\ Cp_d & \text{la chaleur spécifique de la goutte,} \\ H_c & \text{le coefficient de convection en surface de la goutte,} \\ L_v & \text{la chaleur latente du liquide dont est constituée la goutte,} \\ T_d Cp_d & \text{l'énergie thermique de la goutte,} \\ W_v & \text{l'évolution temporelle de la masse de la goutte } -\dot{m}_d. \end{array} \right.$$

On obtient, en utilisant la relation 2.35

$$m_d \frac{dCp_d T_d}{dt} = W_v (H_c - L_v) . \quad (2.37)$$

Le coefficient de convection H_c à la surface de la goutte, repérée par sa position \vec{X}_p s'exprime par

$$H_c = \frac{C_p (T(\vec{X}_d) - T_d)}{B_T} .$$

Les coefficients L_v et Cp_d sont ici supposés constants.

On obtient finalement :

$$\frac{dT_d}{dt} = \frac{W_v}{m_d Cp_d} (H_c - L_v) = \frac{W_v}{m_d Cp_d} \frac{Cp}{B_T} \left(T(\mathbf{X}) - T_d - \frac{L_v B_T}{Cp} \right) .$$

La température $T(\mathbf{X})$ est obtenue par interpolation de la phase porteuse à la position de la goutte. Finalement,

$$\frac{dT_d}{dt} = \frac{6\mu Nu_c}{\rho_d a^2} \frac{Cp}{Cp_d} \frac{\ln(1 + B_T)}{B_T} \left(T(\mathbf{X}) - T_d - \frac{L_v B_T}{Cp} \right) = \frac{T(\mathbf{X}) - T_d - \frac{L_v B_T}{Cp}}{t_h} .$$

Le temps caractéristique de l'évolution de température de la goutte k , noté t_h est donc donné par la relation suivante :

$$t_h = \frac{Pr}{6Nu_c} \frac{Cp_d}{Cp} \frac{\rho_d a_k^2}{\mu} \frac{B_T}{\ln(1 + B_T)} . \quad (2.38)$$

2.3.1.5 Méthode 2-way pour le spray

L'action du gaz sur les gouttes vient d'être expliquée en détail. Cependant, les gouttes agissent aussi sur le gaz. Cette interaction doit aussi être prise en compte.

La méthode utilisée ici consiste en la répartition des termes sources sur les noeuds Eulériens

voisins de la goutte k . Cette répartition est faite de sorte qu'elle soit plus importante pour les noeuds les plus proches.

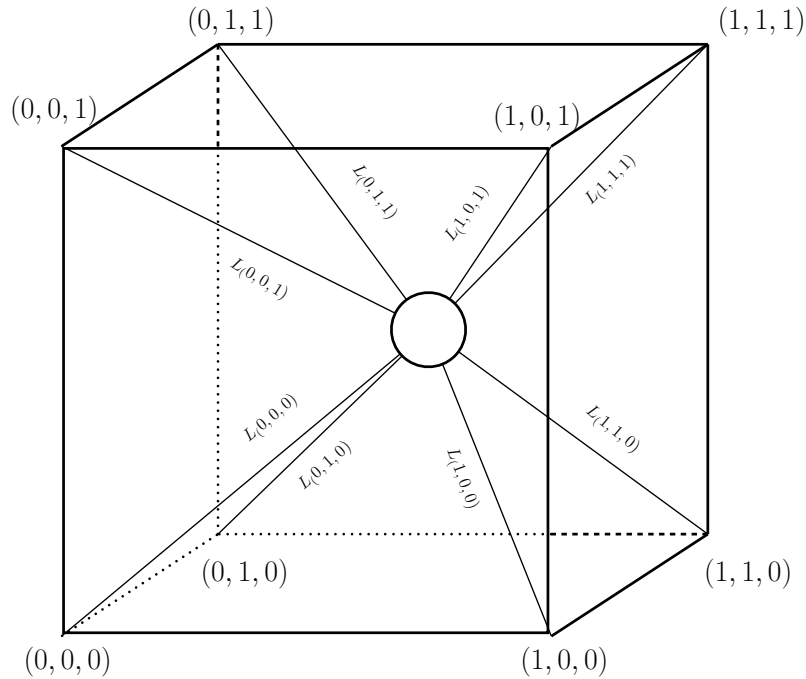


FIG. 2.3: Répartition des termes sources issus d'une goutte

Pour chaque noeud (n) situé autour de la goutte, on définit un coefficient $\alpha_k^{(n)} \in [0, 1]^3$ qui représente le coefficient de répartition du terme source de la goutte k sur le noeud (n). On a nécessairement $\sum_{(n)} \alpha_k^{(n)} = 1$.

Rétroaction 2-way de la masse

De part la conservation de la masse, l'évaporation de la goutte implique une augmentation de la masse gazeuse du composé de la goutte. L'évolution de la masse d'une goutte est donnée par l'équation 2.23.

$$\frac{da_k^2}{dt} = -\frac{a_k^2}{\tau_v} \text{ et } m_{d,k} = \frac{\pi a_k^3}{6} \rho_d . \quad (2.39)$$

Par conséquent, on obtient

$$\frac{dm_{d,k}}{dt} = -\frac{\pi \rho_d a_k^3}{4\tau_v} . \quad (2.40)$$

On obtient la masse évaporée sur chaque noeud :

$$\frac{dm_s^{(n)}}{dt} = -\sum_k \frac{\pi \rho_d a_k^3}{4\tau_v} \alpha_k^{(n)} , \quad (2.41)$$

avec m_s la masse gazeuse de l'espèce s dont est constitué la goutte sur le noeud (n).

A ce stade, il existe deux méthodes de prise en charge de la masse dans le domaine :

- soit on rajoute la masse dans le champ gazeux, ce qui revient à modifier ρ ,
- soit on modifie les fractions massiques de sorte que le mélange reste le même que dans le premier cas, mais en imposant une masse volumique constante durant l'évaporation.

Rétroaction 2-way de la quantité de mouvement

La variation temporelle de la quantité de mouvement $\mathbf{p}_k = m_{d,k} \mathbf{V}_k$ de la goutte s'écrit :

$$\frac{d\mathbf{p}_k}{dt} = m_{d,k} \frac{d\mathbf{V}_k}{dt} + \mathbf{V}_k \frac{dm_{d,k}}{dt}, \quad (2.42)$$

où $\frac{d\mathbf{V}_k}{dt}$ nous est donné par l'équation 2.17.

La répartition des termes sources pour la quantité de mouvement du fluide est donnée par :

$$\frac{d\rho\mathbf{u}}{dt} = - \sum_k \alpha_k^{(n)} \frac{m_{d,k}}{\mathcal{V}} \frac{d\mathbf{V}_k}{dt}, \quad (2.43)$$

où \mathcal{V} est le volume de la maille où se trouve la goutte.

Rétroaction 2-way de la quantité de l'énergie

L'énergie calorifique d'une goutte k est donnée par $e_k = m_{d,k}(C_p T_k + L_v)$. Sa variation d'énergie est donc :

$$\frac{de_k}{dt} = \frac{dm_{d,k}(C_p T_k + L_v)}{dt}. \quad (2.44)$$

La variation de l'énergie sensible de la maille est donc :

$$\frac{de_k}{dt} = - \frac{1}{\mathcal{V}} \sum_k \alpha_k^{(n)} \frac{dm_{d,k}(C_p T_k + L_v)}{dt}. \quad (2.45)$$

2.3.2 Base LMN

Afin de gagner en rapidité de résolution, les équations décrites dans la section précédente sont approximées de sorte que les phénomènes acoustiques ne puissent plus apparaître. En effet, la vitesse de propagation de ces phénomènes est telle que les pas de temps de simulation deviennent très faibles. En appliquant cette approximation, les seules restrictions de pas de temps d'intégration temporelle sont données par la convection, la diffusion et la chimie.

Les variables de normalisation seront notées X_0 ; ce sont les grandeurs de référence. Les

variables normalisées sont notées X^+ , elles sont toutes sans dimension. Il est aussi utile d'utiliser les caractéristiques thermodynamiques d'un gaz de référence. Ces caractéristiques sont notées X_∞ .

Afin de normaliser ces équations, on introduit plusieurs nombres adimensionnels qui nous permettront de généraliser les termes présents dans les équations résolues.

Ces nombres sont les suivants :

$$\left\{ \begin{array}{ll} Re_0 = \frac{L_0 U_0}{\nu_\infty} & \text{nombre de Reynolds ,} \\ Fr_0 = \frac{U_0^2}{L_0 g} & \text{nombre de Froude ,} \\ Sc_{k,0} = \frac{\mu}{\rho D_k} & \text{nombre de Schmidt de l'espèce } k \text{ ,} \\ Pr_0 = \frac{\mu C_p}{\lambda} & \text{nombre de Prandtl ,} \\ Le_{k,0} = \frac{D_T}{D_k} = \frac{Sc_k}{Pr} & \text{nombre de Lewis ,} \\ M_0 = \frac{u_0}{\sqrt{\gamma_\infty R T_\infty / W_\infty}} & \text{nombre de Mach .} \end{array} \right. \quad (2.46)$$

Par souci de simplicité d'écriture, il est utile d'introduire les grandeurs suivantes :

$$\left\{ \begin{array}{ll} \lambda^\bullet = \frac{C_p^+ \mu^+}{Re Pr} & \text{diffusion thermique adimensionnée,} \\ D_k^\bullet = \frac{\mu^+}{\rho^+ Re Sc_k} & \text{diffusion de l'espèce } k \text{ adimensionnée,} \\ \mu^\bullet = \frac{\mu^+}{Re} & \text{viscosité adimensionnée,} \\ \dot{\omega}_k = \frac{u_0 \rho_\infty}{L_0} \dot{\omega}_k^+ & \text{terme source d'espèce adimensionnée,} \\ \dot{\omega}_{es} = \frac{\rho_\infty u_0^3}{L_0} \frac{1}{M^2 (\gamma_\infty - 1)} \dot{\omega}_{es}^+ & \text{terme source d'énergie adimensionnée.} \end{array} \right. \quad (2.47)$$

La normalisation de ces équations est détaillée dans l'annexe 6.2. Les équations normalisées sont les suivantes :

– la loi d'état des gaz parfaits :

$$p^+ = \rho^+ \frac{T^+}{W^+} , \quad (2.48)$$

– la vitesse de correction des espèces :

$$V_i^C = u_0 \sum_{k=1}^{N_S} D_k^\bullet \frac{\partial Y_k}{\partial x_i^+} = u_0 V_i^{C+} \quad \text{avec} \quad V_i^{C+} = \sum_{k=1}^{N_S} D_k^\bullet \frac{\partial Y_k}{\partial x_i^+} , \quad (2.49)$$

– la vitesse de correction de l'énergie :

$$E_i^C = \frac{u_0^3 \rho_\infty}{M^2 (\gamma_\infty - 1)} E_i^{C+} , \quad (2.50)$$

– la conservation de la masse :

$$\frac{\partial \rho^+}{\partial t^+} + \frac{\partial \rho^+ u_i^+}{\partial x_i^+} = 0 , \quad (2.51)$$

– l'évolution de la quantité de mouvement :

$$\frac{\partial \rho u_j^+}{\partial t^+} + \frac{\partial \rho^+ u_i^+ u_j^+}{\partial x_i^+} = -\frac{1}{\gamma M^2} \frac{\partial p^+}{\partial x_j^+} + \frac{\partial \tau_{ij}^+}{\partial x_i^+} , \quad (2.52)$$

– l'évolution de la masse :

$$\frac{\partial \rho^+ Y_k}{\partial t^+} + \frac{\partial \rho^+ (u_i^+ + V_{k,i}^+) Y_k}{\partial x_i^+} = \frac{\partial}{\partial x_i^+} \left[\rho D^\bullet \frac{\partial Y_k}{\partial x_i^+} \right] + \dot{\omega}_k^+ , \quad \text{avec} \quad \dot{\omega}_k = \frac{\rho_\infty u_0}{x_0} \dot{\omega}_k^+ , \quad (2.53)$$

– l'évolution de l'énergie :

$$\frac{\partial \rho^+ e_{su}^+}{\partial t^+} + \frac{\partial \rho^+ u_i^+ e_{su}^+}{\partial x_i^+} = \frac{\partial}{\partial x_i^+} \left(\lambda^\bullet \frac{\partial T^+}{\partial x_i^+} + E_i^{C+} \right) - \frac{\gamma_\infty - 1}{\gamma_\infty} \frac{\partial p^+ u_i^+}{\partial x_i^+} \quad (2.54)$$

$$+ M^2(\gamma_\infty - 1) \frac{\partial \tau_{ij}^+ u_i^+}{\partial x_j^+} + \dot{\omega}_{es}^+, \text{ avec } \dot{\omega}_{es}^+ = \frac{x_0}{\rho_\infty u_0^3} M^2(\gamma_\infty - 1) \dot{\omega}_{es}. \quad (2.55)$$

2.3.2.1 Approximation Low Mach Number

L'approximation LMN permet de ne pas prendre en compte la propagation d'ondes acoustiques, car ce phénomène possède des temps de propagation très faibles, ce qui réduit drastiquement les pas de temps de simulation. La méthode que nous avons utilisée ici est celle proposée par Majda et Sethian [20] appliquée à la chimie. Plusieurs approches existent dans la littérature [21, 22]. Une étude mathématique a été menée pour déterminer le domaine de stabilité de cette approximation, pour une très grande plage de valeur de fluctuation de température et de conductivité thermique [23]. D'autres études ont démontré que les solutions des écoulements déterminés à partir de l'approximation LMN sont aussi solutions des équations de Navier-Stokes incompressibles [24]. Cette approximation a même été étendue aux fluides supercritiques [25], ainsi que dans des conditions de simulation extrêmes [26, 27, 28].

Posons $\epsilon = \gamma M^2$. Si l'on suppose un faible nombre de Mach faible, alors $M \ll 1$ et donc $\epsilon \ll 1$. Il est alors possible de développer les variables de transport en séries de Taylor au premier ordre : $F = F^{(0)} + \epsilon F^{(1)}$. Dans le cas présent, seuls les termes d'ordre 0 sont conservés car $\epsilon \approx 0$.

Les équations de Navier-Stokes et la loi des gaz parfaits régissant le système adimensionné donné précédemment peuvent alors être modifiées pour obtenir leur forme Low Mach finale. Concernant l'équation de conservation de la masse, d'évolution des espèces et d'évolution de l'énergie sensible, celles-ci restent inchangées :

$$\frac{\partial \rho^+}{\partial t^+} + \frac{\partial \rho^+ u_i^+}{\partial x_i^+} = 0, \quad (2.56)$$

$$\frac{\partial \rho^+ Y_k}{\partial t^+} + \frac{\partial \rho^+ (u_i^+ + V_{k,i}^+) Y_k}{\partial x_i^+} = \frac{\partial}{\partial x_i^+} \left[\rho D^\bullet \frac{\partial Y}{\partial x_i^+} \right] + \dot{\omega}_k^+, \quad (2.57)$$

$$\frac{\partial \rho^+ e_{su}^+}{\partial t^+} + \frac{\partial \rho^+ u_i^+ e_{su}^+}{\partial x_i^+} = \frac{\partial}{\partial x_i^+} \left(\lambda \frac{\partial T^+}{\partial x_i^+} + E_i^{C+} \right) - \frac{\gamma_\infty - 1}{\gamma_\infty} \frac{\partial p^+ u_i^+}{\partial x_i^+} + \dot{\omega}_{es}^+, \quad (2.58)$$

$$p^{+(0)} = \rho^+ T^+. \quad (2.59)$$

Il est à noter que le développement de la pression donne lieu à l'apparition de deux termes bien distincts. $p^{(0)}$ est la pression thermodynamique constante en espace, grâce à la propagation instantanée des phénomènes acoustiques, mais variable en temps. $p^{(1)}$ est la pression dynamique générée par l'écoulement, variable en espace et en temps.

Le développement de l'équation de conservation de la quantité de mouvement requiert une manipulation particulière à l'ordre (1).

$$\frac{\partial \rho u_j^{+(0)}}{\partial t^+} + \cancel{\epsilon \frac{\partial \rho u_j^{+(1)}}{\partial t^+}} + \frac{\partial \rho^+ u_i^+ u_j^{+(0)}}{\partial x_i^+} + \cancel{\epsilon \frac{\partial \rho^+ u_i^+ u_j^{+(1)}}{\partial x_i^+}} = -\frac{1}{\gamma M^2} \frac{\partial p^{+(0)}}{\partial x_j^+} - \cancel{\frac{\epsilon}{\gamma M^2} \frac{\partial p^{+(1)}}{\partial x_j^+}} + \frac{\partial \tau_{ij}^{+(0)}}{\partial x_i^+} + \cancel{\epsilon \frac{\partial \tau_{ij}^{+(1)}}{\partial x_i^+}}. \quad (2.60)$$

Par conséquent, nous obtenons

$$\frac{\partial \rho u_j^{+(0)}}{\partial t^+} + \frac{\partial \rho^+ u_i^+ u_j^{+(0)}}{\partial x_i^+} = -\frac{\partial p^{+(1)}}{\partial x_j^+} + \frac{\partial \tau_{ij}^{+(0)}}{\partial x_i^+}. \quad (2.61)$$

2.3.3 Méthodes de parallélisation

Depuis quelques années, la puissance individuelle des processeurs évolue peu. Plusieurs méthodes ont été trouvées pour accélérer le traitement des données. Outre l'accélération de communication entre les différents composants des ordinateurs, l'intégration de plusieurs coeurs de calculs dans le même processeur est apparue. L'industrie informatique s'est donc tournée vers le traitement parallèle. Au lieu de traiter un système sur un seul processeur, celui-ci est décomposé de sorte que plusieurs processeurs puissent faire le traitement des tâches indépendamment les uns des autres. Ce découpage est représenté par la figure 2.4. Généralement, les domaines ainsi découpés nécessitent des interactions entre eux, par exemple pour calculer les dérivées, ou résoudre l'équation de Poisson.

Un outil numérique spécialisé dans le traitement de ces communications, appelé MPI ⁷ a été utilisé. Le code *Asphodele* a donc été parallélisé grâce à cette méthode. Nous décrirons dans les deux prochaines sections la méthode utilisée pour la parallélisation du traitement du gaz, puis la parallélisation du traitement des gouttes Lagrangiennes.

⁷Message Passing Interface

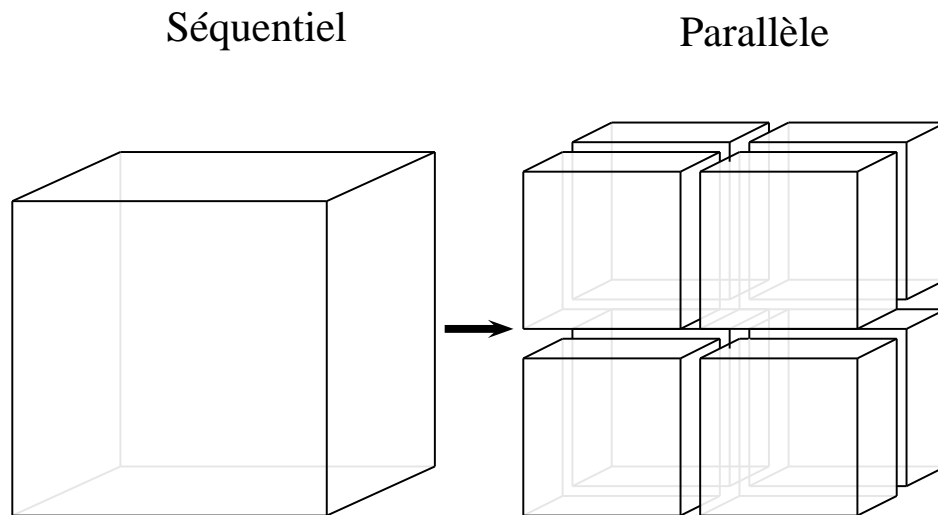


FIG. 2.4: Découpage d'un domaine afin de paralléliser son traitement

2.3.3.1 Parallélisation Eulérienne

Le domaine est découpé en sous-domaines contigus. Chaque processus s'occupe du traitement d'un seul sous-domaine.

Afin de concevoir les communications inter-processus, il est nécessaire de connaître l'intégralité des interactions possibles entre deux domaines contigus :

- le calcul des dérivées premières et secondes nécessitent, au bord de chaque sous-domaine, de connaître la valeur des champs considérés sur le sous-domaine voisin,
- la résolution de l'équation de Poisson nécessite la connaissance des conditions limites globales, dont dépendront la résolution de la pression sur chaque sous-domaine,
- le pas de temps d'intégration doit être le même sur tous les domaines,
- les conditions de sortie du domaine nécessitent la connaissance de la vitesse moyenne de sortie (donc intégré sur tous les sous-domaines placés en sortie) afin d'appliquer une règle convective.

Le calcul d'une dérivée par une méthode DF4⁸ nécessite en chaque point la connaissance d'un stencil de 5 points (voir la figure 2.5a). Afin que chaque sous-domaine connaisse la valeur du champ des sous-domaines adjacents, avant chaque itération, on copie la valeur des bords de chaque sous-domaine sur des bords virtuels (par la suite nommés "ghosts") de ses voisins. Cette copie est symbolisée sur la figure 2.5b. Cet échange de données est nécessaire pour l'estimation des dérivées, déterminées par une différence finie d'ordre 4. Concernant la résolution de l'équation de Poisson, elle se fait grâce à un solveur parallèle. Le champ de pression est pré-

⁸Différence Finie d'ordre 4

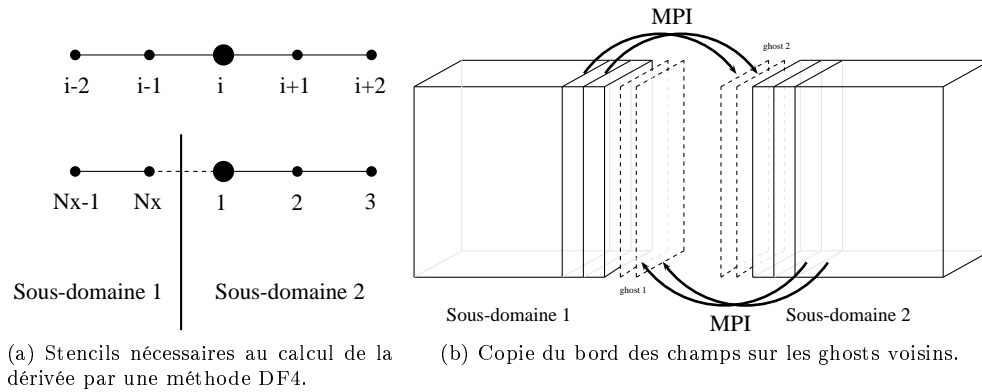


FIG. 2.5: Stencils et communications nécessaires à l'estimation des dérivées.

conditionné grâce à un BiCGStab [29], dont le pré-conditionneur est un Geometric Multigrid [30]. Ces méthodes ont été parallélisées. En ce qui concerne le pas de temps d'intégration, il suffit de trouver la plus grande restriction CFL^9 sur tout le domaine et trouver le pas de temps correspondant. Tous les processus intégreront ensuite selon ce même pas de temps. Enfin, les conditions de sorties convectives nécessitent l'intégration de la valeur de la vitesse en sortie du domaine. Chaque sous-domaine concerné va intégrer sa sortie, le cumul de ces intégrales sera utilisé comme vitesse moyenne de référence à utiliser pour la loi de sortie convective.

2.3.3.2 Parallélisation Lagrangienne

La parallélisation Eulérienne dans le cas d'un domaine structuré reste fixe. Dans le cas de gouttes qui bougent la gestion doit être différente. De part la méthode de suivi Lagrangien qui veut que les gouttes soient une structure de données contenant les paramètres de chaque goutte, il faut décomposer cette structure pour chaque domaine. Lorsque des gouttes passent d'un domaine à l'autre, il faut mettre à jour ces structures de sorte que ces gouttes soient prises en charge dans le nouveau sous-domaine. Le passage d'une goutte entre deux sous-domaines est représenté par la figure 2.6. De plus, si les gouttes sont simulées en two-way, elles interagissent avec le gaz. Cela se traduit par un terme source dans les équations résolues. Ces termes sources sont répartis sur les noeuds entourant la goutte. Par conséquent, si la goutte se trouve "entre" deux sous-domaines, les termes sources doivent être répartis sur ces deux sous-domaines simultanément.

Parallélisation des gouttes en one-way

Sachant que les propriétés du gaz doivent être interpolées à l'emplacement des gouttes, ces

⁹Courant-Friedrichs-Lewy condition

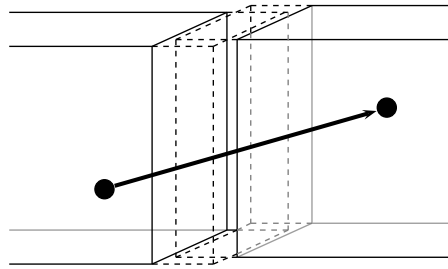


FIG. 2.6: Passage d'une goutte d'un sous-domaine à l'autre

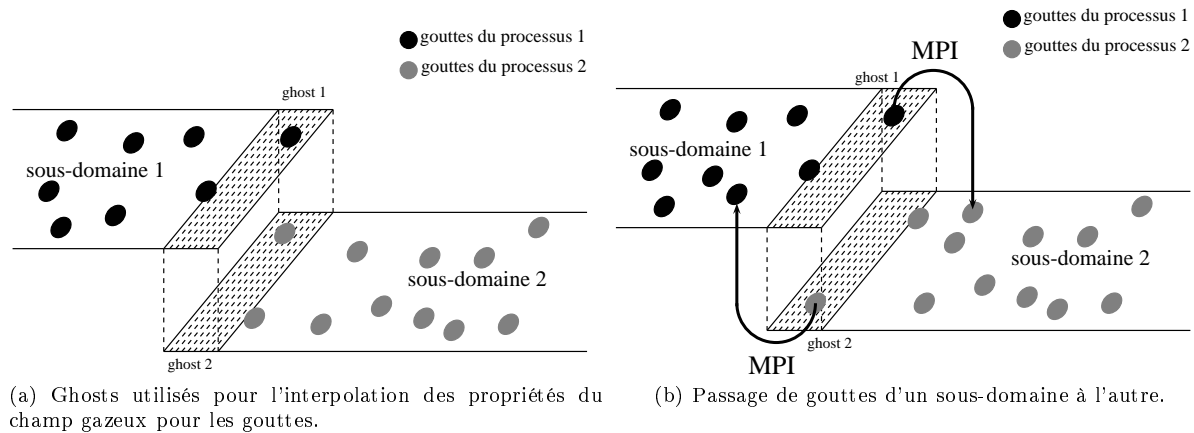


FIG. 2.7: Ghosts utilisés et passage de gouttes d'un processus MPI à l'autre pour la phase disperse

gouttes doivent connaître ces propriétés sur tous les noeuds l'avoisinant. Pour les gouttes se trouvant entre deux processeurs, un ghost est donc nécessaire pour chaque sous-domaine. Ce ghost est représenté sur la figure 2.7a.

Les gouttes qui sortent du ghost du sous-domaine auquel elles sont attribuées sont envoyées sur le sous-domaine voisin, comme représenté par la figure 2.7b.

On voit qu'en appliquant cette méthode, toutes les gouttes connaissent à chaque instant les propriétés du gaz à tous les noeuds voisins.

Parallélisation des gouttes en two-way

La difficulté supplémentaire liée à la présence d'interaction two-way est la mutualisation des termes sources des gouttes entre les sous-domaines. Comme les extrémités des ghosts correspondent aux mailles gérées par le sous-domaine voisin, il faut ajouter les termes sources de ces ghosts aux mailles concernées du sous-domaine voisin. Sur la figure 2.8 nous voyons la répartition des termes sources sur les ghosts ainsi que les communications à effectuer pour que les termes sources soient appliqués au bon endroit. La méthode qui a été utilisée ici, afin d'optimiser les communications, se résume en trois étapes :

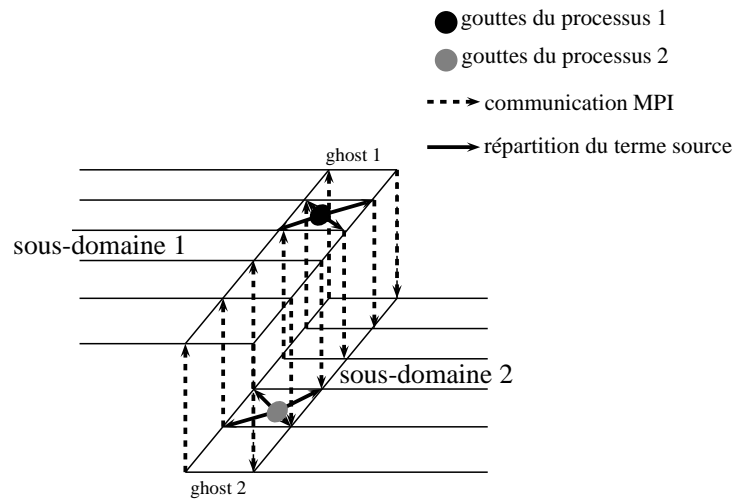


FIG. 2.8: Répartition et envoi des termes sources entre les sous-domaines

1. la première consiste à répartir les termes sources des gouttes sur les ghosts où elles sont situées, comme décrit par la figure 2.9a et expliqué dans le chapitre 2.3.1.5 (page 40),
2. ensuite, les ghosts sont échangés entre les sous-domaines, comme représenté sur la figure 2.9b,
3. enfin, les nouveaux termes sources de chaque sous-domaine sont ajoutés aux termes sources déjà existants à leur extrémité, comme indiqué sur la figure 2.9c.

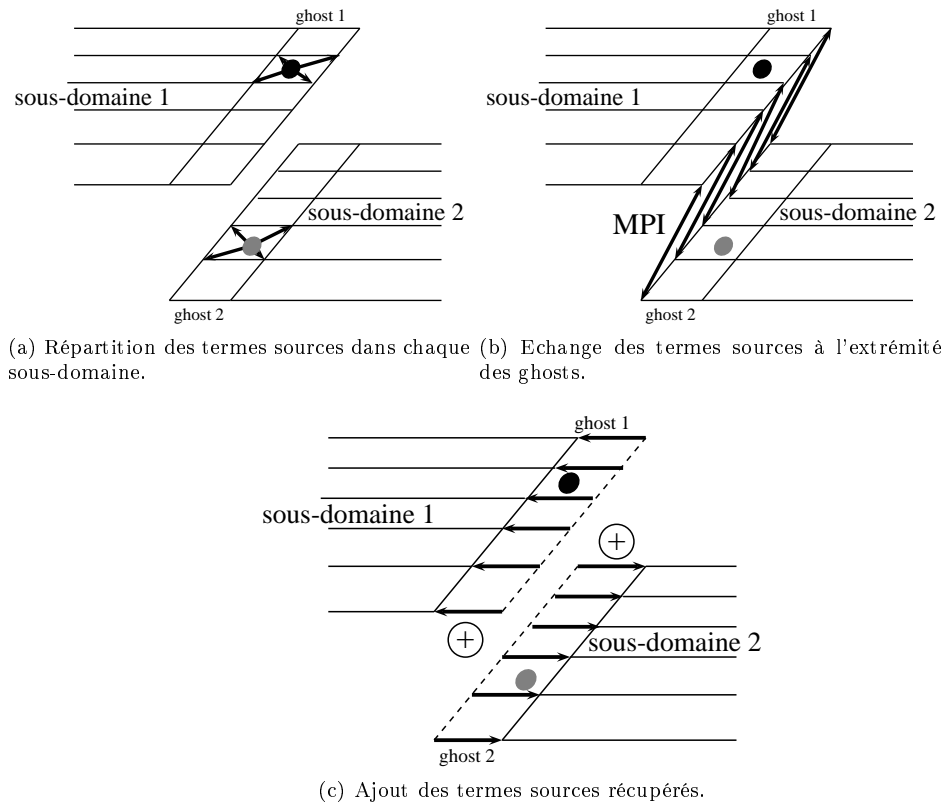


FIG. 2.9: Méthode utilisée pour la parallélisation des termes sources Lagrangiens.

2.4 Outils développés

2.4.1 Corps immergés

L'introduction de frontières immergées dans la simulation numérique de fluides a été effectuée pour la première fois en 1982 par Peskin [31]. L'extension de cette méthode a été effectuée en 1989 par Briscolini et Stangelo [32]. Cette méthode consistait en la superposition d'un masque binaire sur le fluide. Les équations résolues n'impliquaient pas de variation des caractéristiques du fluide là où le masque était nul. Cette méthode a été développée par la suite pour permettre la prise en compte de frontières immergées, c'est à dire une frontière qui passe entre les noeuds du maillage [32] dans le cas où celui-ci n'est pas conforme. Dans ce cas, une interpolation du fluide sur cette frontière est nécessaire pour déterminer son influence. Cette méthode a ensuite pu être extrapolée dans le cas de corps immergés mobiles et/ou élastiques [33]. Une extension a même été effectuée afin de disposer d'une grille pour le gaz et d'une grille pour le corps immergé [34]. Finalement, la gestion des corps immergés dans le fluide a permis de les adapter à des maillages évoluant temporellement.

Une autre problématique induite par ces méthodes est la prise en compte de la présence d'un corps immergé sur la turbulence, en particulier dans le cas LES¹⁰ où les modèles de sous-maille ont dû être adaptés [35, 36, 37].

Dans notre cas précis, les simulations effectuées sont en DNS, par conséquent il n'y a pas de termes de sous-maille. De plus, les maillages utilisés dans cette thèse sont réguliers, et les corps immergés sont immobiles. Nous nous sommes donc tournés vers la méthode originale de Briscolini et Stangelo, celle-ci étant justifiée dans notre cas et étant peu gourmande en mémoire et en temps de calcul.

L'introduction de corps immergés dans le solveur *Asphodele* a permis l'étude de l'impact de la présence d'un cylindre ou de surfaces rugueuses sur la ségrégation de gouttes, sur l'écoulement ainsi que sur l'accrochage de flamme. La méthode utilisée ici est simple : en tout point du domaine, on définit un masque \mathcal{M} dont les valeurs appartiennent à l'intervalle $[0, 1]$. Ce masque sera multiplié par le terme d'évolution de chacune des grandeurs résolue par le solveur (vitesses, énergie, fractions massiques, termes sources chimiques etc.). Ainsi, là où le masque est nul, ces grandeurs n'évoluent plus. Pour la vitesse par exemple, on obtient donc :

$$\frac{\partial \rho u_j}{\partial t} = \mathcal{M} \left[-\frac{\partial \rho u_i u_j}{\partial x_i} - \frac{\partial p}{\partial x_j} + \frac{\partial \tau_{ij}}{\partial x_i} \right]. \quad (2.62)$$

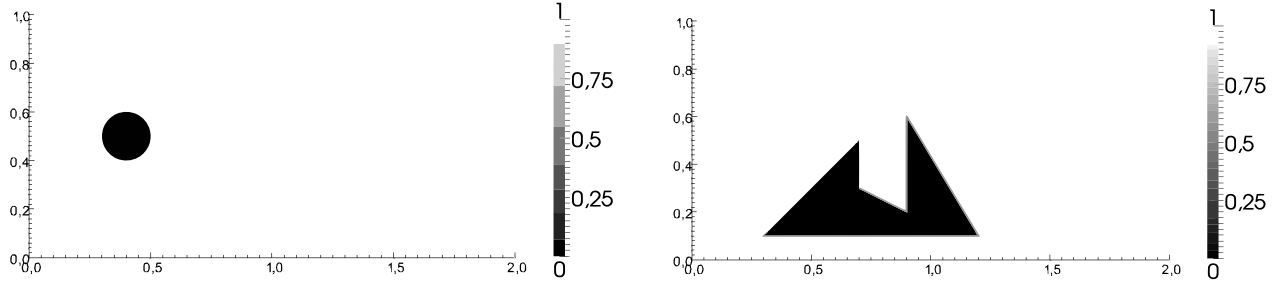
Cependant, dans la section 2.4.2.2 (page 64), nous verrons que la collision des gouttes avec les corps immergés nécessite le calcul du gradient de \mathcal{M} . Par conséquent, il est nécessaire que le bord du corps immergé passe progressivement de 1 à 0. Dans le cas contraire, les normales à la surface prendront des orientations préférentiellement sur (Ox) , (Oy) ou (Oz) . La méthode de Bresenham [38, 39] qui consiste à créer un masque binaire (0 ou 1) est donc inapplicable ici.

Afin de générer des masques permettant un calcul des normales à sa surface, il faut que le masque passe progressivement de 0 à 1, donc que le bord du corps immergé soit sur plusieurs mailles. Dans ce cas, afin de ne pas générer des phénomènes non interprétables physiquement, il faut que l'épaisseur du bord du corps immergé soit inférieure à l'épaisseur de la couche limite qui se développera autour de celui-ci.

Deux méthodes ont été développées pour créer des corps immergés circulaires ou polygonaux quelconques, respectant cette condition.

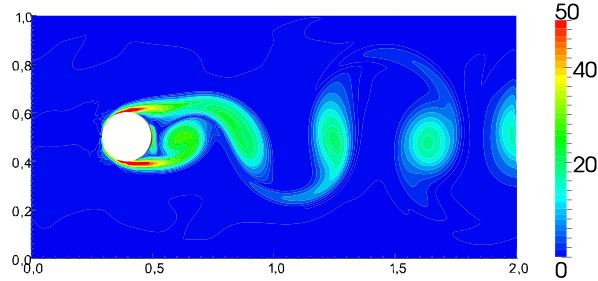
La création de ce masque est unique et ne se fait que lors de l'initialisation des simulations, le corps immergé étant considéré fixe. Par la suite, nous pourrions affecter une température à ces corps immergés en imposant l'enthalpie correspondant à cette température et au mélange

¹⁰Large Eddy Simulation



(a) Masque \mathcal{M} d'un cylindre immergé.

(b) Masque \mathcal{M} d'un polygone concave immergé.



(c) Champ de vorticité instantané d'un écoulement en présence d'un cylindre immergé.

FIG. 2.10: Masques utilisés pour les cylindres et les polygones immergés, ainsi que l'écoulement résultant autour d'un cylindre immergé.

(fictif) présent dans le corps.

2.4.1.1 Génération de disques immergés

Afin de générer le masque d'un cylindre, il nous faut plusieurs paramètres : son centre M , le rayon du disque R , ainsi qu'une épaisseur de bord h . En passant dans le repaire polaire centré sur le cylindre, il est possible en chaque point P du domaine, de définir la valeur du masque en appliquant un profil dépendant de sa distance au centre $d = MP$. Le profil utilisé est le suivant :

$$\mathcal{P}(d, R, h) = \frac{1}{2} \left(1 + \tanh \left[3 \frac{d - 2R}{h} \right] \right) . \quad (2.63)$$

Un profil obtenu par cette méthode est représenté sur la figure 2.10a. Un exemple est donné figure 2.10c, où l'on voit des tourbillons de Von-Karman se former en aval d'un cylindre immergé.

2.4.1.2 Génération de polygones immergés quelconques

L'algorithme développé ici a permis la mise en place de polygones quelconques dans l'écoulement. Par extension, il est possible de simuler un fluide dans un coude, en présence de rugosité

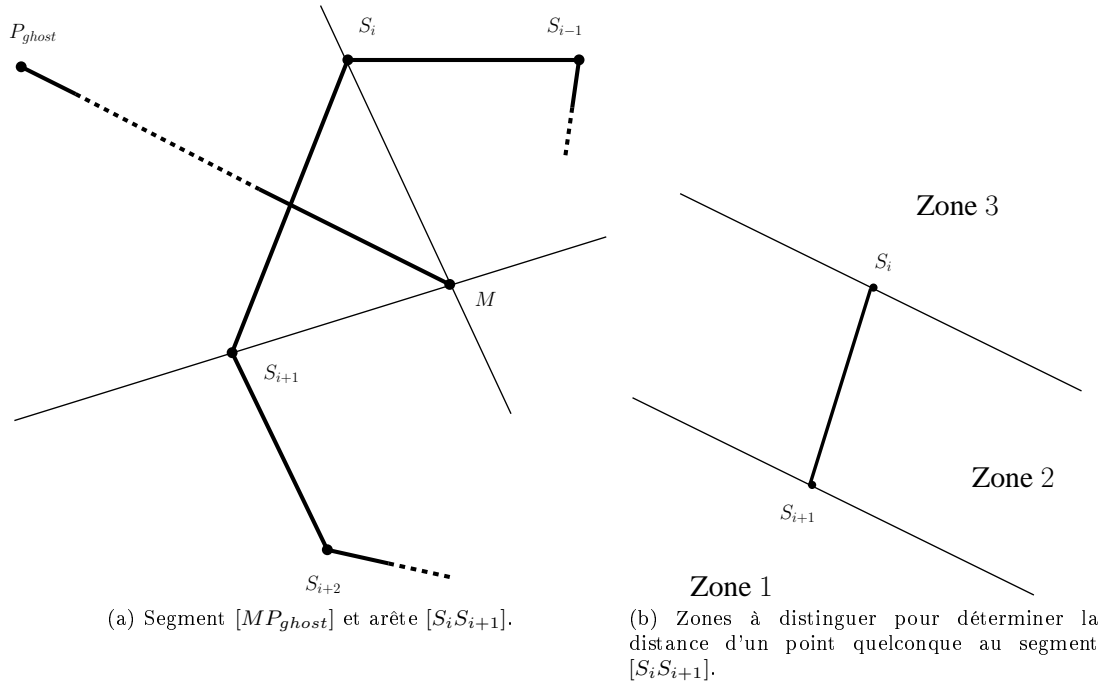


FIG. 2.11: Description de la méthode utilisée pour créer le masque de polygones immergés.

etc.

Considérons un polygone quelconque \mathcal{P} défini par ses N_s sommets $(S_1, S_2, \dots, S_{N_s})$. L'objectif est de savoir si le noeud de maillage considéré est situé à l'intérieur ou à l'extérieur du polygone, puis de connaître sa plus courte distance aux bords du polygone pour ensuite appliquer le profil donné par l'équation 2.63 (pris avec $R = 0$).

Le problème de savoir si un point quelconque se trouve à l'intérieur ou à l'extérieur d'un polygone dont on connaît les arêtes est un problème récurrent dans les traitements d'image. Ce problème s'appelle le Point-In-Polygone (PIP).

Considérons tout d'abord un point quelconque extérieur au domaine et à tout polygone. Ce point sera noté P_{ghost} . Savoir si un point M se trouve dans le polygone ou non revient à savoir combien de fois le segment $[MP_{ghost}]$ coupe les arêtes du polygone \mathcal{P} (figure 2.11b). En effet, on démontre [40] que s'il coupe un nombre de fois impair les arêtes du polygone, alors le point M se trouve à l'intérieur. Dans le cas contraire, il se trouve à l'extérieur. L'intérêt de cette méthode est d'être capable d'introduire des polygones concaves sans difficulté par la suite.

Pour savoir combien d'arêtes du polygone $([S_1 S_2], [S_2 S_3], \dots, [S_{N_s-1} S_{N_s}], [S_{N_s} S_1])$ coupent le segment $[MP_{ghost}]$, la technique utilisée ici est la suivante. La figure 2.11a représente l'arête $[S_i S_{i+1}]$ ainsi que le segment $[MP_{ghost}]$. On voit que le segment $[MP_{ghost}]$ coupe le segment $[S_i S_{i+1}]$ si :

- P_{ghost} est du même côté de $[MS_i]$ que S_{i+1} ,

- P_{ghost} est du même côté de $[MS_{i+1}]$ que S_i et
- P_{ghost} n'est pas du même côté de $[S_iS_{i+1}]$ que M .

Si ces trois conditions sont réunies, alors le segment $[MP_{ghost}]$ coupe le segment $[S_iS_{i+1}]$, sinon ce n'est pas le cas.

La traduction mathématique de ces trois conditions peut s'exprimer en terme de produit vectoriel :

- $(\mathbf{S}_i\mathbf{S}_{i+1} \wedge \mathbf{S}_{i+1}\mathbf{M})_z \cdot (\mathbf{S}_i\mathbf{S}_{i+1} \wedge \mathbf{S}_{i+1}\mathbf{P}_{ghost})_z < 0$,
- $(\mathbf{MS}_{i+1} \wedge \mathbf{MP}_{ghost})_z \cdot (\mathbf{MS}_{i+1} \wedge \mathbf{MS}_i)_z > 0$ et
- $(\mathbf{MS}_i \wedge \mathbf{MP}_{ghost})_z \cdot (\mathbf{MS}_i \wedge \mathbf{MS}_{i+1})_z > 0$.

A partir du nombre de segments que $[MP_{ghost}]$ croise, on sait pour n'importe quel point M s'il est dans le polygone ou non.

Maintenant, il s'agit de trouver la plus petite distance $d = MP$ du point M aux bords du polygone. Pour y parvenir, il faut calculer la plus petite distance du point à chaque segment du polygone, puis nous prendrons la plus petite de ces distances. Afin de déterminer la distance du point M à un segment $[S_iS_{i+1}]$, il faut distinguer trois cas, représentés par la figure 2.11b.

Il est possible de savoir dans quelle zone se trouve M selon ces trois conditions :

- si $\mathbf{S}_{i+1}\mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_{i+1}\mathbf{M} < 0$, alors M est dans la zone 1. Dans ce cas $d = \|\mathbf{MS}_{i+1}\|$,
- si $\mathbf{S}_i\mathbf{S}_{i+1} \cdot \mathbf{S}_i\mathbf{M} < 0$, alors M est dans la zone 3. Dans ce cas $d = \|\mathbf{MS}_i\|$,
- sinon M se trouve dans la zone 2, auquel cas $d = \|\mathbf{S}_{i+1}\mathbf{S}_i \wedge \mathbf{S}_{i+1}\mathbf{M}\|/\|\mathbf{S}_i\mathbf{S}_{i+1}\|$.

La distance étant connue, on définit une variable $r = d$ si M est hors du polygone, sinon $r = -d$.

La valeur appliquée au masque au point M est définie par :

$$\mathcal{P}_2(r, h) = \frac{1}{2} \left(1 + \tanh \left[3 \frac{r}{h} \right] \right) . \quad (2.64)$$

Cet algorithme est synthétisé par la figure 2.12. Un exemple de masque d'un polygone concave est représenté par la figure 2.10b.

2.4.2 Collisions

Comme nous l'avons vu dans les chapitres précédents, les interactions entre les gouttes et le gaz peuvent être prises en compte dans le code *Asphodele*. Ces interactions ont un effet important, par exemple lors de gouttes qui s'évaporent. Deux autres types d'interactions existent et ne sont pas négligeables dans certains cas particuliers : une grande densité de gouttes et/ou la présence d'un corps immergé. Dans le premier cas, les interactions gouttes/gouttes doivent être prises en compte, dans le second les collisions entre les gouttes et le corps immergé. Une

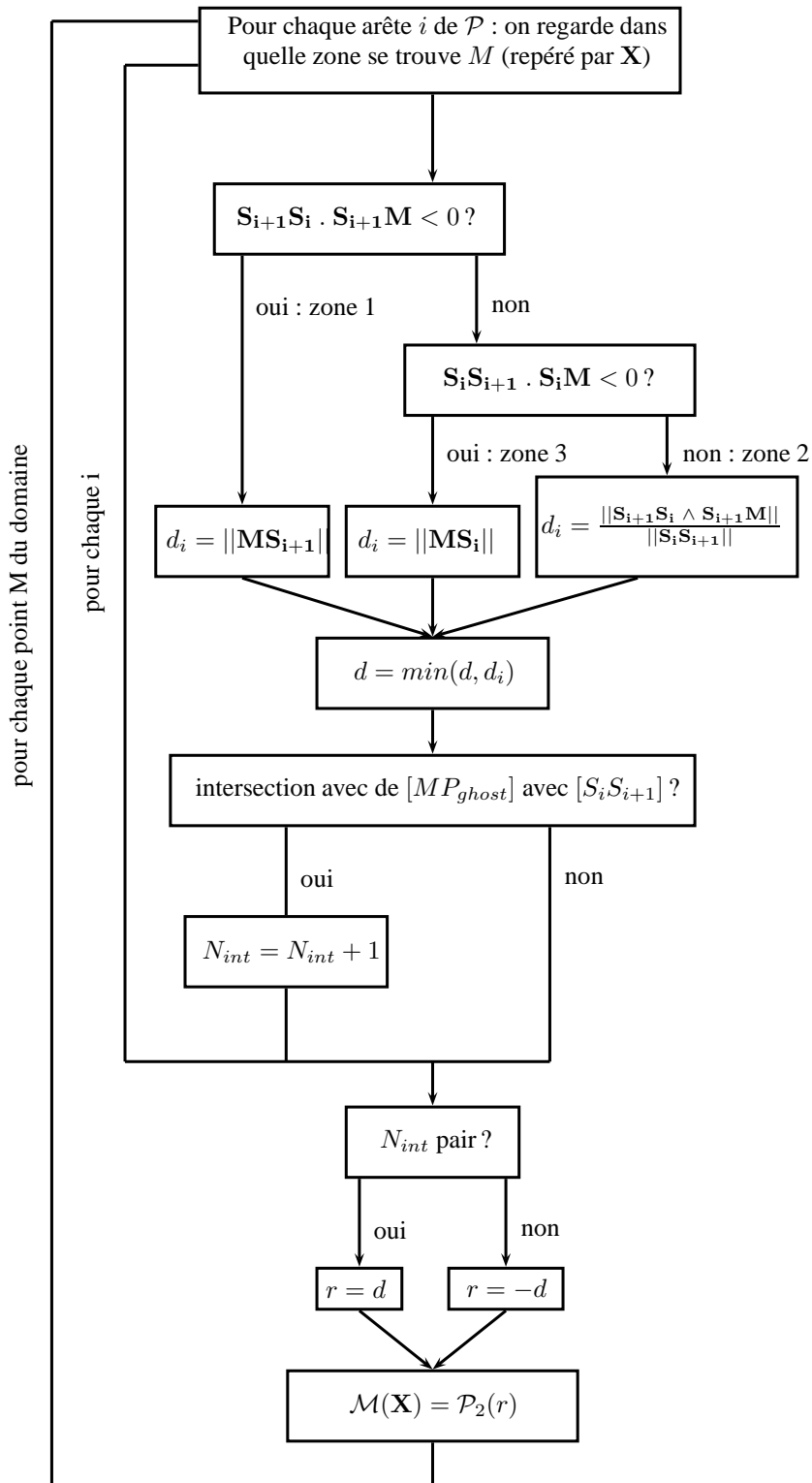


FIG. 2.12: Algorithme de création d'un masque pour un polygone \mathcal{P} quelconque.

méthode particulière doit être développée dans chaque cas. Ces méthodes vont être détaillées dans les sections suivantes.

2.4.2.1 Collisions entre les gouttes

La prise en charge des collisions entre les gouttes peut être utile dans certains cas particuliers où un nuage dense de gouttes en croise un autre par exemple. En effet, dans ce cas, les collisions entre les gouttes auront un impact sur la dispersion de celles-ci qui ne pourra plus être négligé. La prise en charge de ces collisions est complexe et nécessite un très grand temps de calcul. La partie qui prend le plus de temps est la considération de tous les couples potentiels de collision. C'est pourquoi on restreint au maximum les couples pouvant collisionner.

La prise en charge des collisions se décompose donc en trois parties :

1. détermination de tous les couples de gouttes pouvant potentiellement collisionner,
2. détermination, parmi ces couples, des particules qui collisionnent,
3. prise en charge des collisions.

Détermination des couples potentiels de collision

La méthode habituellement utilisée est la répartition des gouttes sur une matrice. Cet artifice permet de trouver immédiatement les plus proches voisins d'une goutte quelconque. Cette méthode est représentée par la figure 2.13.

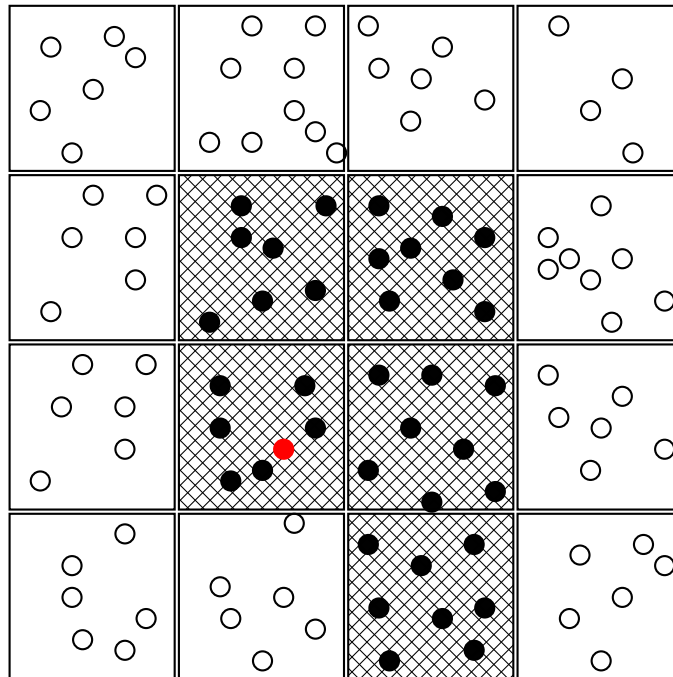


FIG. 2.13: Découpage du domaine afin de chercher les partenaires potentiels de collision. ● : goutte dont on cherche les partenaires potentiels de collision, ○ : gouttes que l'on ignore, ● : partenaires potentiels de collision.

Lors de l'intégration temporelle du système, on considère des pas de temps Δt . Cette méthode

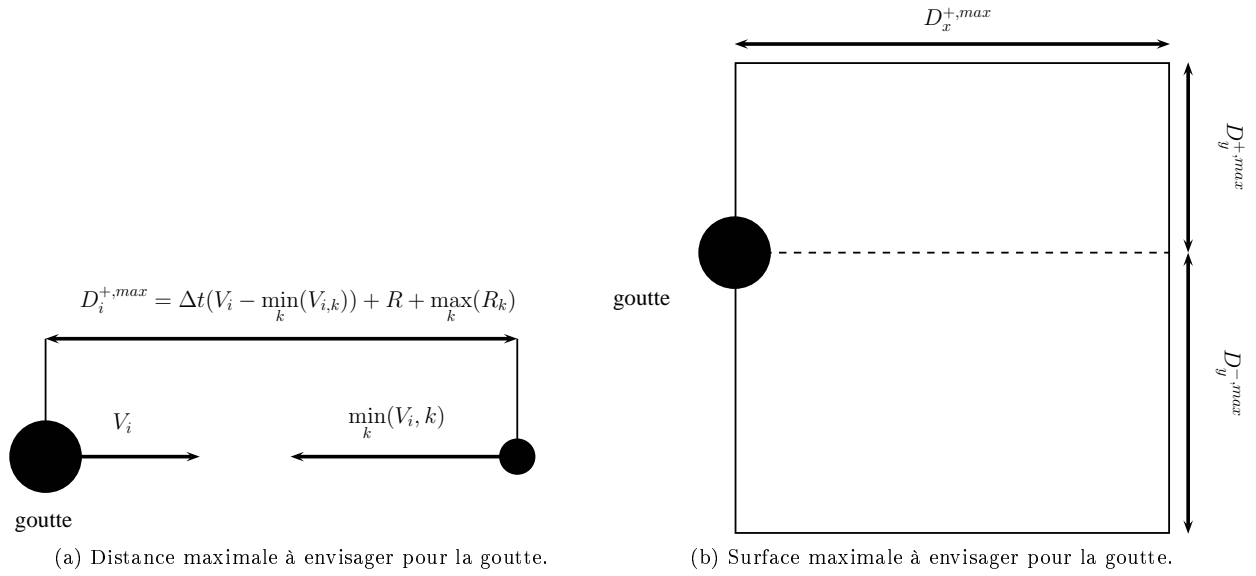


FIG. 2.14: Distance et surface équivalente maximale à envisager pour la détection des collisions

possède tout de même plusieurs inconvénients. En effet, la goutte que l'on considère possède une position quelconque dans la maille où elle se trouve. Par conséquent, afin de pouvoir certifier la détection des collisions, la largeur d'une maille sur la direction i de cette matrice doit être strictement supérieure à une valeur qui est $(\max_k(V_{i,k}) - \min_k(V_{i,k}))\Delta t + \max_k(a_k)$, avec $V_{i,k}$ la vitesse sur i de la goutte k , et a_k le diamètre de la goutte k . Le volume à explorer est donc de :

$$S_{ini} = \prod_i^{n_{dim}} \left(\Delta t(\max_k(V_{i,k}) - \min_k(V_{i,k})) + \max_k(a_k) \right) . \quad (2.65)$$

Un des premiers problèmes de cette méthode est que cette matrice devient très grande si la vitesse des gouttes tend à être la même pour toutes et que leur rayon tend à être très faible.

Nous allons montrer ici comment diminuer cette surface d'exploration. En effet, de part la complexité de l'algorithme de recherche de collision (en N^2), il est nécessaire de diminuer le plus possible cette surface. Une première méthode a été utilisée [41].

Connaissant les caractéristiques des gouttes (position, vitesse etc.), on peut anticiper leur trajectoire et tenter de déterminer les zones dans lesquelles ces gouttes resteront pendant ce pas de temps.

Sur l'axe X_i , la distance maximale où peut se trouver une goutte qui peut collisionner avec la goutte que nous considérons. Cette distance est représentée par la figure 2.14a. $\max_k a_k$ est le plus grand diamètre de goutte dans le domaine. On pose la distance maximale à droite et à

gauche sur i :

$$\begin{cases} D_i^{+,max} = \frac{1}{2}(a + \max_k(a_k)) + \Delta t(V_i - \min_k(V_{i,k})) & \text{à droite ,} \\ D_i^{-,max} = \frac{1}{2}(a + \max_k(a_k)) + \Delta t(\max_k(V_{i,k}) - V_i) & \text{à gauche .} \end{cases} \quad (2.66)$$

La surface maximale à explorer est représentée par la figure 2.14b. Afin de trouver le plus rapidement possible les gouttes se trouvant dans cette surface, les abscisses des gouttes sont triées afin d'accéder directement aux gouttes dont l'abscisse appartient à $[x, x + D_x^{+,max}]$, avec x l'abscisse de la goutte considérée. Parmi ces gouttes, nous ne sélectionnerons que les gouttes dont l'ordonnée appartient à $[y - D_y^{-,max}, y + D_y^{+,max}]$.

Malgré le temps passé à considérer toutes les gouttes se trouvant sur la tranche du domaine $[x, x + D_x^{+,max}]$, avant de ne sélectionner que celles étant dans la surface décrite par la figure 2.14b, le nombre de couples potentiels considéré ici est beaucoup plus faible que celui décrit par l'équation 2.65.

Une méthode hybride a donc été développée, permettant de trouver très rapidement les gouttes proches de n'importe quelle goutte que l'on considère.

La disposition des gouttes sur un arbre permet de retrouver directement – pour chaque goutte g_r – les voisins des cellules voisines. Ces arbres étant binaires, le découpage du domaine sur une direction est donc nécessairement une puissance de 2. De plus, la discrétisation spatiale doit être faite de sorte que la distance de découpage $D_x = L_x 2^{-k}$ soit supérieure à la distance maximale d'interaction inter-particulaire $D_x^{+,max}$. Dans le cas extrême, le volume d'exploration induit par cette méthode est 8 fois supérieur au volume idéal à explorer, ce qui engendre 64 fois plus de couples à examiner. Cette méthode consiste en la décomposition du domaine, non plus par un arbre binaire (ce qui nécessite 2^k mailles par direction), mais par un arbre de dimension localement variable. Pour cela, on détermine la segmentation idéale du domaine dans chaque direction : $N_x = L_x / D_x^{+,max}$. Le but va être d'effectuer la décomposition de N_x en facteurs premiers, inférieurs ou égaux à 11 afin de limiter la mémoire nécessaire. Ces facteurs sont donc $\mathcal{P} = [2, 3, 5, 7, 11]$. Or, comme N_x n'est pas nécessairement décomposable en ces facteurs, il va falloir trouver le nombre N_x^\bullet inférieur à N_x qui est décomposable dans la base variable \mathcal{P} . Soit $[p_k] = [p_1, \dots, p_N]$ la décomposition de N_x^\bullet dans \mathcal{P} . Par exemple, si $N_x^\bullet = 90$, on a la décomposition $[p_1 = 2, p_2 = 3, p_3 = 3, p_4 = 5]$.

On va donc créer un arbre hiérarchique dont chaque étage possède un nombre variable de branches, comme symbolisé par la figure 2.15a. N'importe quel nombre entier i_x appartenant à

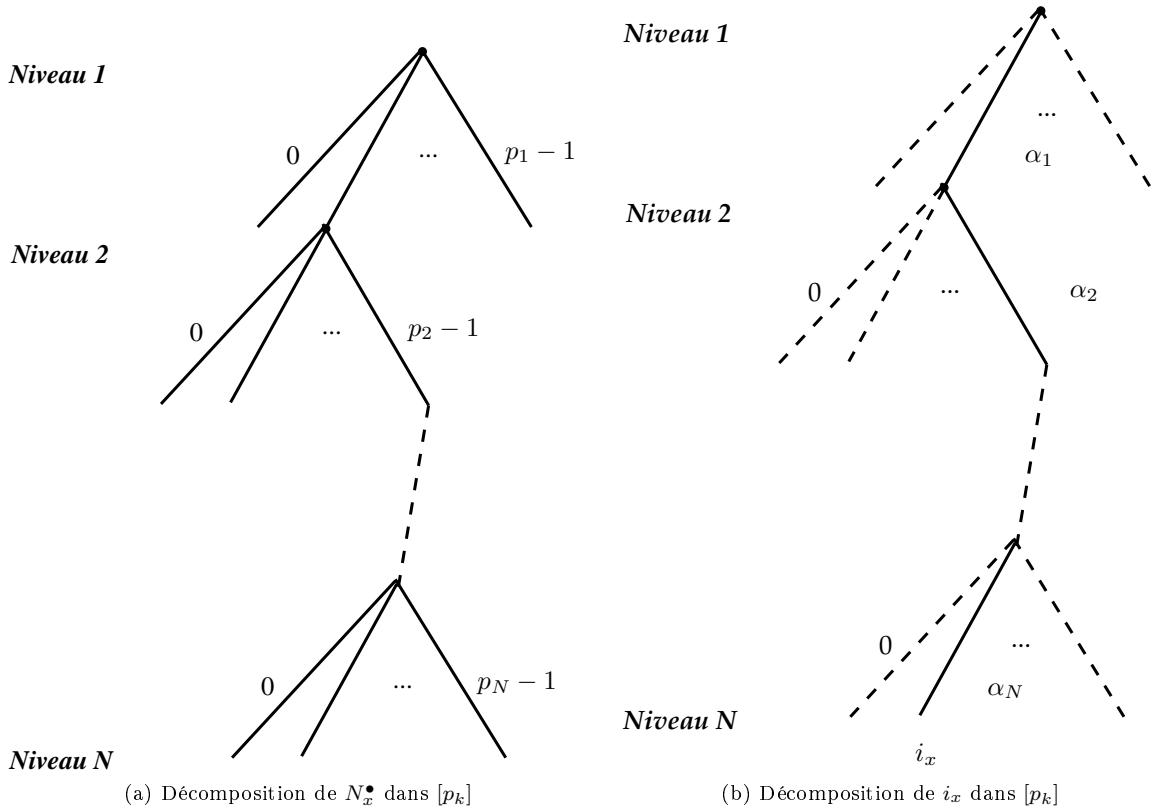


FIG. 2.15: Création de l'arbre et parcours sur celui-ci

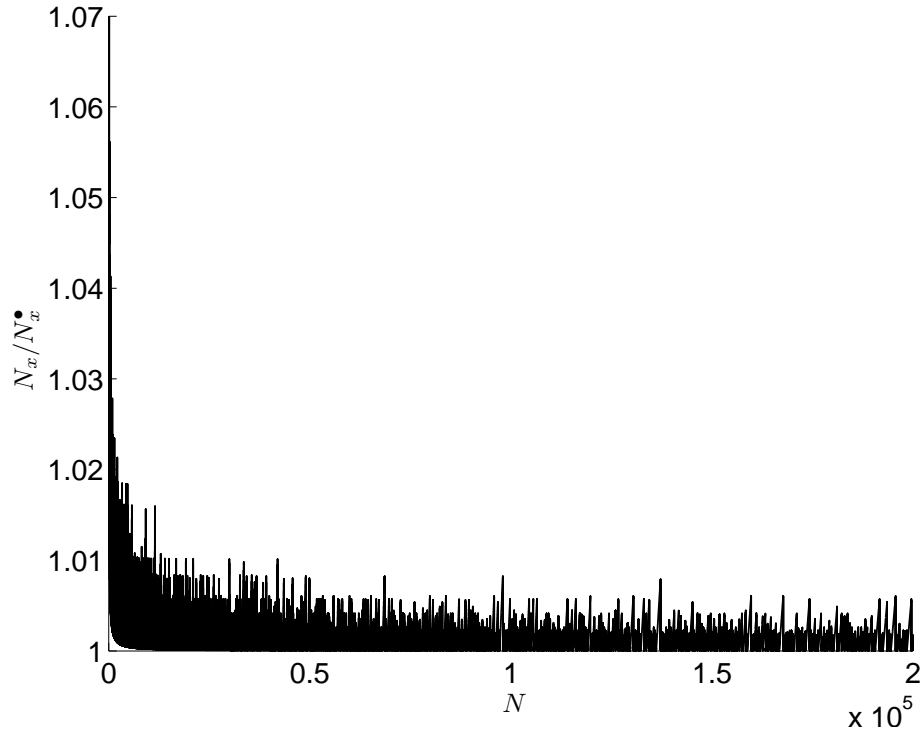
$[0, N_x^\bullet]$ peut donc s'écrire comme :

$$i_x = \sum_{k=1}^N \alpha_k \prod_{j=1}^{k-1} p_j, \quad (2.67)$$

les α_k étant la décomposition de i_x dans $[p_k]$. Afin de les déterminer, on procède de manière récursive :

$$\alpha_k = R_k [F_{N^\bullet}(k)] \text{ avec } R_{k+1} = \left\lfloor \frac{R_k}{F_{N^\bullet}(k)} \right\rfloor \text{ et } R_1 = i_x. \quad (2.68)$$

Cette méthode de décomposition permet donc d'accéder immédiatement aux gouttes dans la maille voisine, et de plus, de minimiser le volume de décomposition du domaine très près du volume idéal d'exploration. En effet, la figure 2.16 nous donne l'écart relatif entre N_x^\bullet et N_x . Cet écart nous donne le taux de surestimation de la surface explorée avec cette méthode. On montre que le volume maximal ne dépasse pas 1.01^3 fois le volume idéal, ce qui revient à effectuer 1.01^6 fois le nombre idéal de couples, soit 0.0615 fois le volume idéal, quelque soit la configuration du domaine. Cela est bien moins que le nombre de couples testés par la méthode habituelle, qui sont jusqu'à 64 fois plus importants que le nombre de couples le plus faible. La décomposition de i_x dans cette base nous donne le parcours à effectuer dans cet arbre. Un exemple est donné

FIG. 2.16: Ecart relatif de N_x^\bullet et N_x .

par la figure 2.15b. La méthode de détection des plus proches voisins est la première étape dans la prise en charge des collisions. Il s'agit maintenant de tester parmi tous les couples de gouttes lesquels vont collisionner.

Détermination des collisions

Pour chaque couple de gouttes que nous nommerons g_r et g_s , il faut déterminer pendant le pas de temps Δt si elles vont collisionner ou pas. Toutes les valeurs annotées de r et s sont les grandeurs relatives aux la gouttes g_r et g_s respectivement. La distance entre ces deux gouttes en fonction du temps – à l'ordre 1 – est :

$$L_{r,s}(t) = \|\mathbf{X}_r(t) - \mathbf{X}_s(t)\| = \sqrt{\sum_i (\mathbf{X}_{i,r}(t) - \mathbf{X}_{i,s}(t))^2} = \sqrt{\sum_i (\mathbf{X}_{i,r} - \mathbf{X}_{i,s} + t(\mathbf{V}_{i,r} - \mathbf{V}_{i,s}))^2} . \quad (2.69)$$

On cherche à connaître le temps τ tel que $L_{r,s}(\tau) = \frac{1}{2}(a_r + a_s)$. Cela revient à résoudre le

trinôme suivant :

$$\alpha\tau^2 + \beta\tau + \gamma = 0 \text{ avec } \begin{cases} \alpha = \sum_i (\mathbf{V}_{i,r} - \mathbf{V}_{i,s})^2, \\ \beta = 2 \sum_i (\mathbf{V}_{i,r} - \mathbf{V}_{i,s})(\mathbf{X}_{i,r} - \mathbf{X}_{i,s}), \\ \gamma = \sum_i (\mathbf{X}_{i,r} - \mathbf{X}_{i,s})^2 - \left(\frac{1}{2}(a_r + a_s)\right)^2. \end{cases} \quad (2.70)$$

Afin de savoir s'il y a collision durant le pas de temps $[0, \Delta t[$, il faut que :

- $\Delta = \beta^2 - 4\alpha\gamma \geq 0$, pour que $\tau \in \mathbb{R}$,
- auquel cas, on détermine τ et on regarde si $\tau \in [0, \Delta t[$.

Si ces deux conditions sont respectées, on prend :

$$\tau = \frac{-\beta + \sqrt{\beta^2 - 4\alpha\gamma}}{2\alpha}. \quad (2.71)$$

De plus, on voit que $\alpha \geq 0$. Dans le cas où $\alpha = 0$, alors $\mathbf{X}_r = \mathbf{X}_s$: les gouttes r et s ne peuvent pas collisionner. γ est positif, puisque la distance entre deux gouttes est toujours supérieure à la somme de leur rayon. Finalement, on peut montrer que $\tau > 0 \Leftrightarrow \beta < 0$. Il reste à prendre en charge la collision entre la goutte g_r et la goutte g_s .

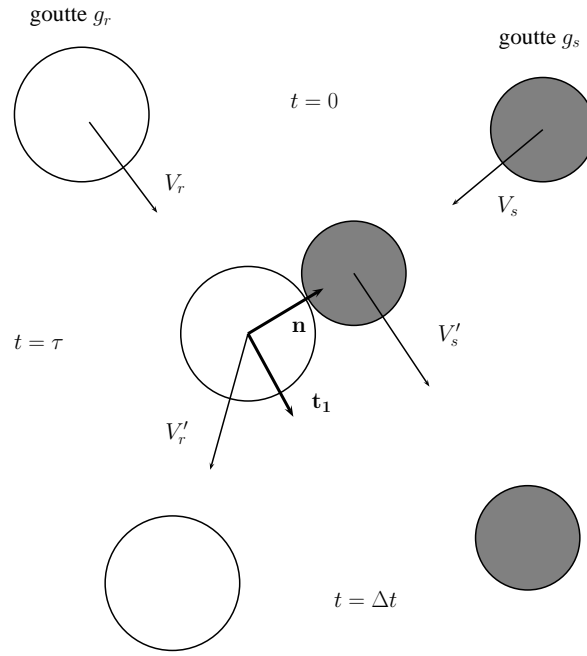
Prise en charge de la collision

Lorsque l'on connaît tous les couples $\{g_r, g_s\}$ de particules qui vont collisionner, on procède de la manière suivante :

- on crée un repère $\mathcal{R} = \{\mathbf{n}, \mathbf{t}_1, \mathbf{t}_2\}$ spécifique à la collision, comme représenté par la figure 2.17,
- on projette les vitesses de g_r et g_s sur ce repère,
- on applique la collision, en considérant qu'elle est élastique,
- on projette les vitesses obtenues dans le repère initial,
- on détermine leurs nouvelles positions.

Le repère orthonormé spécifique à la collision est créé à partir de la position des gouttes à l'instant τ où elles se touchent. On a :

$$\mathbf{n} = \frac{\mathbf{X}_r(\tau) - \mathbf{X}_s(\tau)}{\frac{1}{2}(a_r + a_s)}, \quad \mathbf{t}_1 = \frac{1}{\sqrt{n_x^2 + n_y^2}} \begin{pmatrix} n_x \\ -n_y \\ 0 \end{pmatrix}, \quad \mathbf{t}_2 = \mathbf{n} \wedge \mathbf{t}_1. \quad (2.72)$$


 FIG. 2.17: Repère $[\mathbf{n}, \mathbf{t}_1]$ utilisé lors d'une collision se produisant dans le plan XY .

La projection des vecteurs vitesse des gouttes \mathbf{V}_r et \mathbf{V}_s dans le repère \mathcal{R} est effectuée par :

$$\mathbf{V}_r^{\mathcal{R}} = \begin{pmatrix} \mathbf{V}_r \cdot \mathbf{n} \\ \mathbf{V}_r \cdot \mathbf{t}_1 \\ \mathbf{V}_r \cdot \mathbf{t}_2 \end{pmatrix} \text{ et } \mathbf{V}_s^{\mathcal{R}} = \begin{pmatrix} \mathbf{V}_s \cdot \mathbf{n} \\ \mathbf{V}_s \cdot \mathbf{t}_1 \\ \mathbf{V}_s \cdot \mathbf{t}_2 \end{pmatrix}. \quad (2.73)$$

Dans ce repère, on peut considérer que la quantité de mouvement \mathbf{p} du système $\{g_r, g_s\}$ sur \mathbf{t}_1 et \mathbf{t}_2 est constante, la collision se produisant sur \mathbf{n} . De plus, la collision étant élastique, l'énergie cinétique du système est invariant lors de la collision. Soient \mathbf{V}'_r et \mathbf{V}'_s la vitesse des gouttes g_r et g_s après la collision.

On a donc :

$$\begin{cases} \mathbf{p}_{\mathbf{n}}^{\mathcal{R}} = m_r \mathbf{V}_r^{\mathcal{R}} + m_s \mathbf{V}_s^{\mathcal{R}} = cste = m_r \mathbf{V}'_r + m_s \mathbf{V}'_s, \\ E_{\mathbf{n}} = \frac{1}{2} m_r (\mathbf{V}_{\mathbf{n},r}^{\mathcal{R}})^2 + \frac{1}{2} m_s (\mathbf{V}_{\mathbf{n},s}^{\mathcal{R}})^2 = \frac{1}{2} m_r (\mathbf{V}'_{\mathbf{n},r})^2 + \frac{1}{2} m_s (\mathbf{V}'_{\mathbf{n},s})^2. \end{cases} \quad (2.74)$$

En résolvant ce système, on trouve :

$$\mathbf{V}'_{\mathbf{n},s} = \frac{\mathbf{p}_{\mathbf{n}}^{\mathcal{R}} + \sqrt{(\mathbf{p}_{\mathbf{n}}^{\mathcal{R}})^2 - \frac{m_r^2}{\mu} \left(\frac{(\mathbf{p}_{\mathbf{n}}^{\mathcal{R}})^2}{m_r} - 2E_{\mathbf{n}} \right)}}{m_r + m_s}, \mathbf{V}'_{\mathbf{n},r} = \frac{\mathbf{p}_{\mathbf{n}}^{\mathcal{R}} - m_s \mathbf{V}'_{\mathbf{n},s}}{m_r}. \quad (2.75)$$

Une fois les deux nouvelles vitesses déterminées, on les projette inversement dans le repère de

la simulation :

$$\begin{cases} \mathbf{V}'_{s,i} = \mathbf{V}'_{\mathbf{n},s}\mathcal{R}\mathbf{n}_i + \mathbf{V}'_{\mathbf{n},s}\mathcal{R}\mathbf{t}_{1i} + \mathbf{V}'_{\mathbf{n},s}\mathcal{R}\mathbf{t}_{2i} , \\ \mathbf{V}'_{r,i} = \mathbf{V}'_{\mathbf{n},r}\mathcal{R}\mathbf{n}_i + \mathbf{V}'_{\mathbf{n},r}\mathcal{R}\mathbf{t}_{1i} + \mathbf{V}'_{\mathbf{n},r}\mathcal{R}\mathbf{t}_{2i} . \end{cases} \quad (2.76)$$

Sachant que les vitesses des gouttes g_r et g_s pendant l'intervalle de temps $[0, \tau]$ sont \mathbf{V}_r et \mathbf{V}_s , que pendant l'intervalle de temps $[\tau, \Delta t]$ elles sont de \mathbf{V}'_r et \mathbf{V}'_s , on détermine la position de ces gouttes à la fin du pas de temps :

$$\begin{cases} \mathbf{X}_s^{t+\Delta t} = \mathbf{X}_s^t + \mathbf{V}_s\tau + \mathbf{V}'_s(\Delta t - \tau) , \\ \mathbf{X}_r^{t+\Delta t} = \mathbf{X}_r^t + \mathbf{V}_r\tau + \mathbf{V}'_r(\Delta t - \tau) . \end{cases} \quad (2.77)$$

Cette méthode a permis d'effectuer plusieurs tests, en particulier le cas de quatre jets de gouttes se collisionnant dans un écoulement à vitesse constante, dans un domaine en 3 dimensions. Une capture instantanée des gouttes dans le domaine est représenté par la figure 2.18. Cette figure nous montre un bon comportement de cette méthode dans le cas tri-dimensionnel.

Afin d'observer plus en détail les caractéristiques de la densité eulérienne de goutte résultant, la densité moyenne du spray a été déterminée. La figure 2.19 nous montre la densité moyenne de goutte obtenue dans le cas non collisionnant (iso-contour rouge) et dans le cas collisionnant (iso-contour gris). Nous voyons l'impact très important des collisions dans un cas dense tel que celui présenté ici. De plus, le système simulé ici étant symétrique, la densité de goutte obtenue en sortie de domaine se doit d'être symétrique elle aussi. C'est pourquoi les gouttes ont été distinguées en familles distinctes (rouge, noire, bleue, jaune) selon l'injecteur d'où elles ont été injectées. Les iso-contour de la densité de ces gouttes selon leur famille est représentée sur la figure 2.20aa, ainsi que les iso-contours de cette densité en sortie du domaine, sur la figure 2.20bb. Les iso-contour de la densité sans collision sont les plus petits cercles centraux, les iso-contours de la densité avec collision sont les patatoïdes. Nous voyons très clairement une symétrie des densités obtenues, ce qui nous permet de montrer que la méthode utilisée ici pour gérer les collisions n'admet aucune préférence directionnelle pour leur prise en charge. De plus, il est important de remarquer que les collisions ici ont permis de maintenir les gouttes du côté où elles sont injectées.

2.4.2.2 Collisions entre les gouttes et les corps immergés

La méthode de prise en charge d'un corps immergé, vue dans la section 2.4.1 (page 51), implique l'existence d'un masque dont les valeurs appartiennent à $[0, 1]$. Ce champ permet de

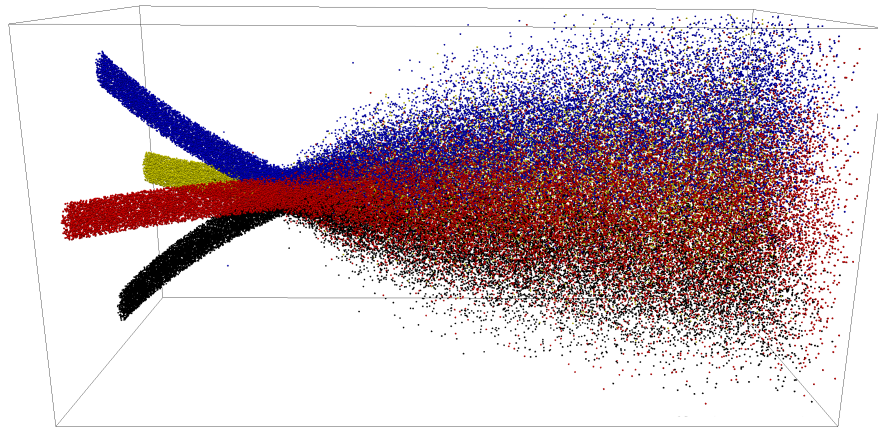


FIG. 2.18: Capture instantanée des gouttes entrant en collision.

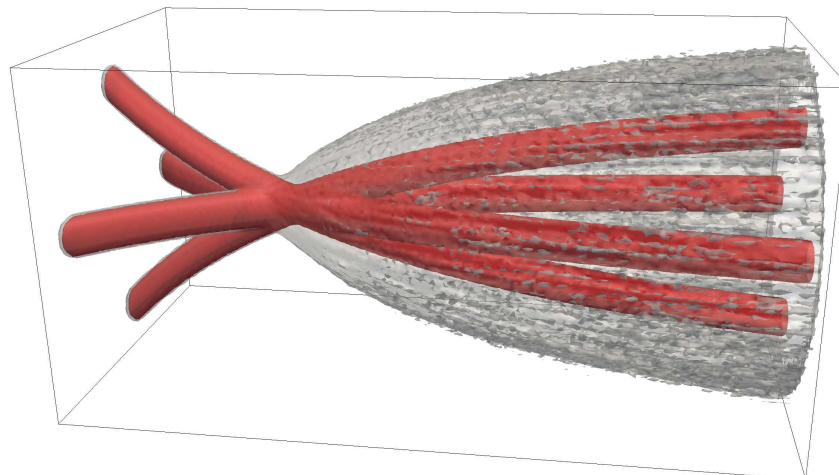


FIG. 2.19: Iso-contour de la densité de gouttes obtenue dans le cas collisionnant (gris) et non collisionnant (rouge).

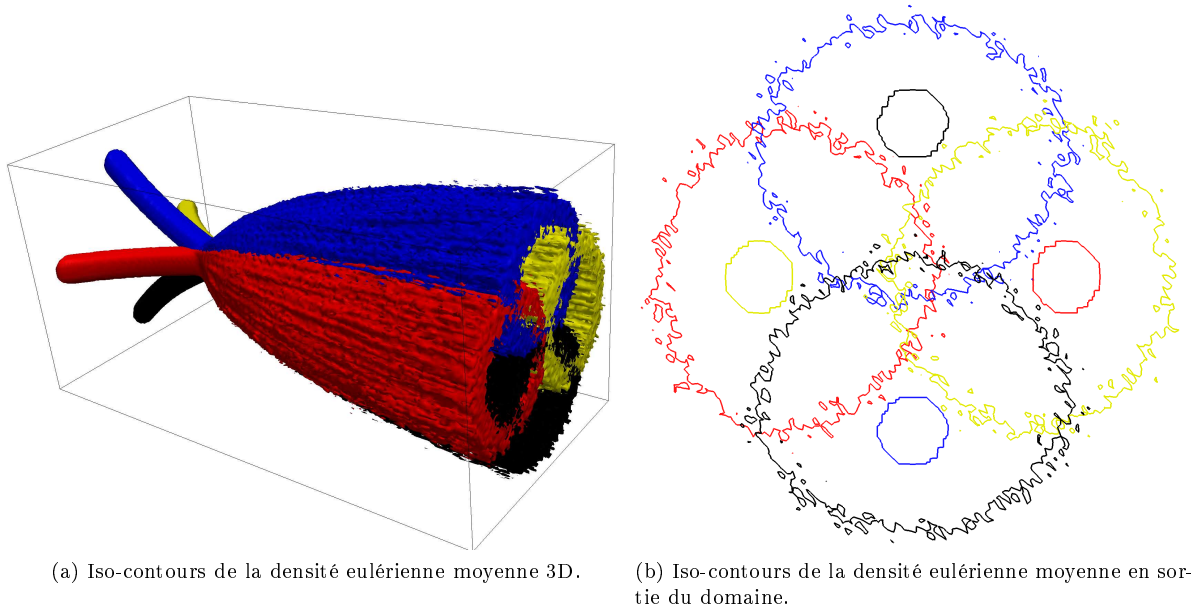


FIG. 2.20: Iso-contours de densité eulérienne moyenne des gouttes pour une simulation de quatre jets qui se croisent (à gauche). Les gouttes issues de chaque injection sont d'une couleur distincte. Les iso-contours de densité moyenne de goutte en sortie du domaine dans le cas non collisionnant et collisionnant est représenté pour chaque famille de goutte (à droite).

détecter localement la présence d'un corps immergé. Connaissant la position d'une goutte à l'instant t , notée \mathbf{X}^t , on estime sa position à la fin du pas de temps par une approximation au premier ordre : $\mathbf{X}^{t+\Delta t} = \mathbf{X}^t + \mathbf{V}^t \Delta t$. La valeur du masque en ces deux positions est déduite par interpolation. On note \mathcal{M}^t la valeur du masque à la position de la goutte à l'instant t et $\mathcal{M}^{t+\Delta t}$ à la position de la goutte à l'instant $t + \Delta t$. On considère que la collision est effective si $\mathcal{M}^{t+\Delta t} < 0.8$, où 0.8 est une valeur arbitraire.

Si la collision est effective, on détermine la normale à la surface estimée à la position de la goutte par $\mathbf{n} = \mathbf{grad}(\mathcal{M})^t / \|\mathbf{grad}(\mathcal{M})^t\|$, interpolée à la position de la goutte à l'instant t . Un champ de normales est représenté sur la figure 2.21. Cette normale nous permet de créer un repère orthonormé (\mathbf{n}, \mathbf{t}) spécifique à la goutte. Le vecteur \mathbf{t} est déterminé de sorte que $\mathbf{t} \cdot \mathbf{n} = 0$. La projection du vecteur vitesse dans ce repère est déterminée par :

$$\begin{cases} \mathbf{V}_n^t = \mathbf{V}^t \cdot \mathbf{n} , \\ \mathbf{V}_t^t = \mathbf{V}^t \cdot \mathbf{t} . \end{cases} \quad (2.78)$$

La vitesse de la goutte \mathbf{V} est projetée dans ce repère. A ce stade, il est important de souligner que le vecteur vitesse de la goutte projeté sur \mathbf{n} : \mathbf{V}_n est nécessairement négatif car la goutte vient de l'extérieur du corps vers l'intérieur. Le rebond sera considéré comme une collision

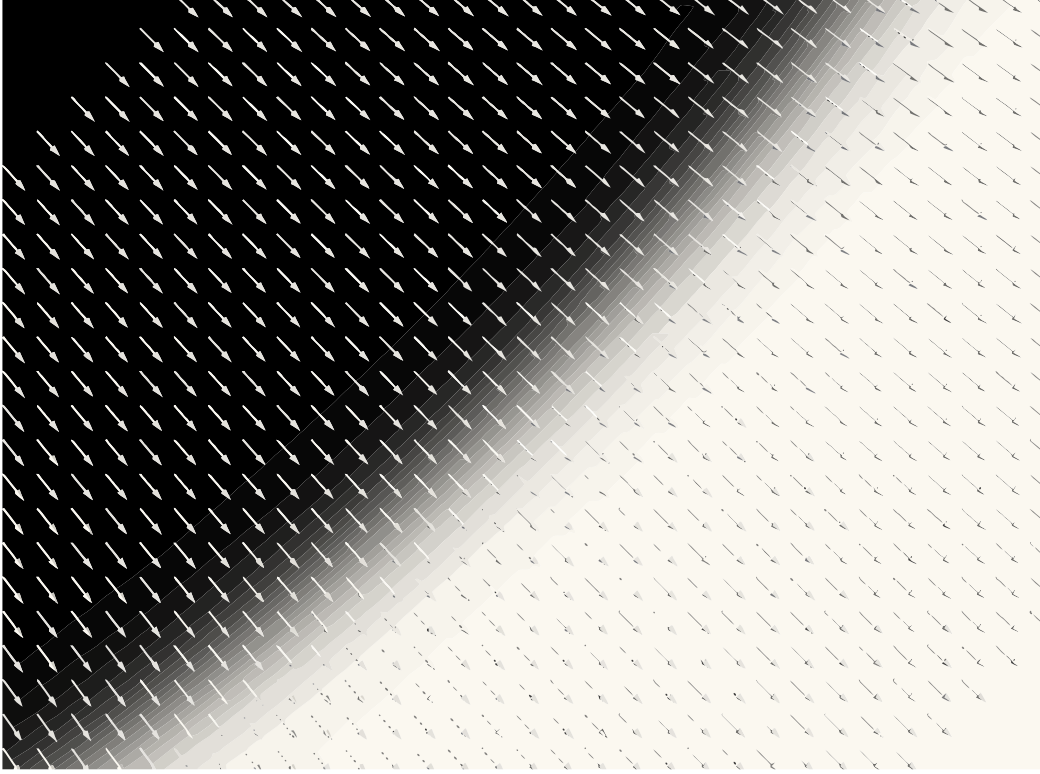


FIG. 2.21: Normales à la surface d'un cylindre immergé.

élastique avec un corps de masse infinie, ce qui revient à inverser la composante \mathbf{V}_n .

On obtient ainsi les nouvelles composantes du vecteur vitesse dans ce repère en fonction de la vitesse avant la collision :

$$\begin{cases} V_n^{t+\Delta t} = |V_n^t| , \\ V_t^{t+\Delta t} = V_t^t . \end{cases} \quad (2.79)$$

Cette nouvelle vitesse est projetée inversement dans le repère de la simulation :

$$\mathbf{V}^{t+\Delta t} = V_n^{t+\Delta t} \mathbf{n} + V_t^{t+\Delta t} \mathbf{t} . \quad (2.80)$$

La position de la goutte à la fin du pas de temps est estimée en utilisant cette nouvelle vitesse :

$$\mathbf{X}^{t+\Delta t} = \mathbf{X}^t + \mathbf{V}^{t+\Delta t} \Delta t . \quad (2.81)$$

Cet algorithme est synthétisé par la figure 2.22.

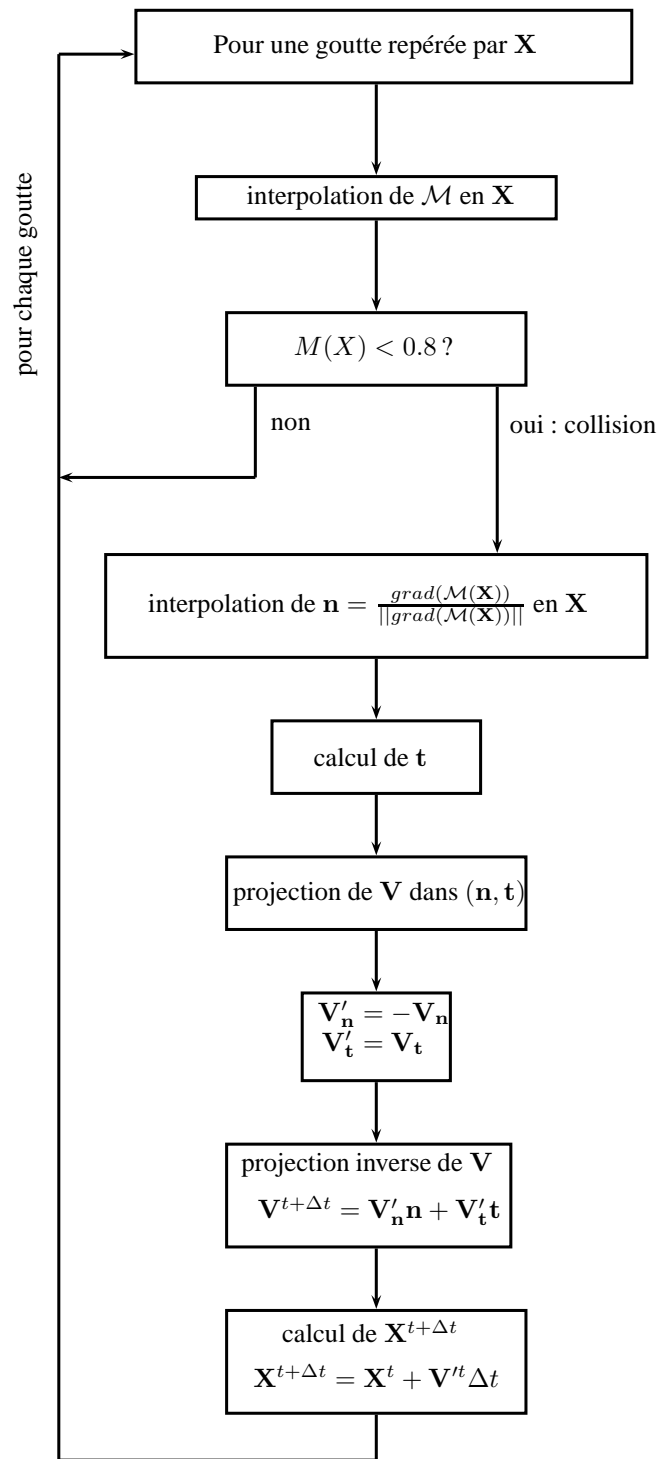


FIG. 2.22: Algorithme de détection et de prise en charge de la collision des gouttes sur un corps immergé.

2.4.3 Méthodes utilisées pour la chimie

2.4.3.1 Loi d'Arrhenius

Une grande quantité de travaux analytiques et numériques ont été dédiés à la détermination d'une loi pour ω_R [3]. Plusieurs simplifications ont été proposées afin de déterminer ce terme.

L'utilisation d'une fonction d'Heavyside a été proposée par Echehki et Chen [42]. La méthode que nous utiliserons ci-dessous a été développée et décrite dans la thèse de Cannevière [43]. Nous nous proposons de développer encore cette méthode.

Il paraît normal de tenter d'appliquer la loi d'Arrhenius à une chimie à une étape. La loi d'Arrhenius est basée sur le produit entre une fonction exponentielle et une fonction pré-exponentielle. En utilisant les mêmes notations que précédemment, on a :

$$\dot{\omega}_R = K \rho^{\nu_\rho} Y_F^{\nu_F} Y_O^{\nu_O} \exp(-T_a/T) . \quad (2.82)$$

K est un facteur préexponentiel constant. Il est possible de ré-écrire le terme exponentiel en introduisant α un coefficient thermique et β permettant de mesurer la température d'activation du mélange T_a . En définissant T_b la température des gaz brûlés d'un mélange à la stoechiométrie et T_u la température des gaz frais, on définit α et β par l'équation 2.83.

$$\alpha = \frac{T_b - T_u}{T_b} \quad \text{et} \quad \beta = \alpha \frac{T_a}{T_b} . \quad (2.83)$$

A la température T normalisée par la température T_u , la loi d'Arrhenius s'écrit en fonction de α et β sous la forme de l'équation 2.84.

$$\dot{\omega}_R = K \rho^{\nu_\rho} Y_F^{\nu_F} Y_O^{\nu_O} \exp\left(\frac{\beta}{\alpha} - \frac{\beta}{\alpha(1-\alpha)T}\right) . \quad (2.84)$$

Les facteurs exponentiels ν_F et ν_O ne sont pas nécessairement égaux à ν_F et ν_O , et n_ρ est défini par $\nu_\rho = \nu_F + \nu_O$. Les résultats présentés ici ont comme paramètres α et β , dont les valeurs habituellement utilisées sont : $\alpha = 0.8$ et $\beta = 8.0$. Cela nous donne une température normalisée de flamme $T_b = 5$.

L'équation 2.84 nous permet la simulation d'une réaction à une étape. Cependant, une grande quantité de problèmes physiques et numériques peuvent apparaître. Comme l'ont montré Poinot et Veynante [3], avec des facteurs exponentiels ν_F et ν_O de l'ordre de l'unité, les estimations asymptotiques et numériques de la vitesse de flamme en fonction du rapport d'équivalence Φ donnent de très bonnes approximations du côté pauvre ($\phi < 1$) mais demeurent erronées du côté riche ($\phi > 1$). En fait, on constate une augmentation de la vitesse de flamme au-delà de $\phi = 1$ alors qu'elle devrait être maximale pour cette valeur. Ce problème est directement lié au facteur pré-exponentiel défini par l'équation 2.85 et l'équation 2.86.

$$P_e(Y_F, Y_O, \nu_F, \nu_O) = Y_F^{\nu_F} Y_O^{\nu_O} , \quad (2.85)$$

$$P_e(\phi, p, \nu_F, \nu_O) = \left(\frac{\Phi_s(p-1) + \phi(p + \Phi_s)}{\phi\Phi_s + \Phi_s^2 + \Phi_s + \phi} \right)^{\nu_F} \left(\frac{\Phi_s \Phi_s p + \phi(p-1) + 1}{\phi\Phi_s + \Phi_s^2 + \Phi_s + \phi} \right)^{\nu_O}. \quad (2.86)$$

p est défini par $p = Y_F + Y_O$. Si nous recherchons la valeur maximale de cette fonction pré-exponentielle P_e en faisant varier la richesse Φ le long d'une ligne iso- p ($\partial P_e / \partial \Phi = 0$), il est possible de montrer que ν_F et ν_O sont directement reliés par l'équation 2.87.

$$\frac{\nu_O}{\nu_F} = \Phi_s \frac{\Phi_s p + \phi(p-1) + 1}{\Phi_s(p-1) + \phi(p + \Phi_s)}. \quad (2.87)$$

Afin d'obtenir la plus grande valeur de P_e à la stoechiométrie ($\phi = 1$), le rapport entre ν_O et ν_F est imposé par l'équation 2.88.

$$\frac{\nu_O}{\nu_F} = \Phi_s \quad (2.88)$$

Pour la combustion des fuels les plus fréquemment utilisés (méthane, propane, hydrocarbures...) avec de l'air, le coefficient stoechiométrique devient rapidement supérieur à 10 (souvent proche de 15) à cause du nombre d'atomes de carbone présents dans chaque molécule de fuel. Dans ce cas, des exposants entre 0.0625 et 0.1 apparaissent dans la fonction pré-exponentielle P_e . Par exemple, si $\nu_F = 0.0625$ et $\nu_O = 0.9375$, alors le bruit numérique peut impliquer l'existence de termes sources significatifs là où physiquement il n'y en a pas ($((1.10^{-14})^{0.0625} = 0.13)$). Pour cette raison, il n'est pas forcément possible d'appliquer $\nu_O/\nu_F = \Phi_s$.

Des études analytiques ont montré que ces inconvénients peuvent être contournés en utilisant une chimie irréaliste de telle sorte que $\Phi_s = 1$ [3, 44] (page 54). Dans ce cas, on a $\nu_F/\nu_O = 1$, et la valeur maximale de la vitesse de flamme est obtenue pour $\phi = 1$.

2.4.3.2 Méthode KGKAS

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

- **remapping** : La première étape consiste à modifier l'expression du facteur pré-exponentiel de telle sorte que la nouvelle fonction soit maximale pour $\Phi = 1$, et ce quelle que soit la valeur de Φ_s .
- **scaling** : Un facteur correctif dépendant de ϕ est introduit dans la loi d'Arrhenius afin que le résultat numérique corresponde avec les courbes expérimentales.

Remapping

Comme il a été mentionné dans la première section, travailler avec une fonction pré-exponentielle

définie avec $\Phi_s = 1$ conduit à un rapport $\nu_F/\nu_O = 1$. Cela conduit à l'expression suivante :

$$P_e(Y_F, Y_O, n) = Y_F^n Y_O^n , \quad (2.89)$$

avec n un exposant commun à Y_F et Y_O . Cette fonction pré-exponentielle est numériquement stable et rapide à calculer dans le cas particulier où $n = 1$. Cependant notre objectif est de travailler pour de plus grandes valeurs de Φ_s . Par conséquent, nous suggérons de projeter la fonction de l'équation 2.89 définie par $\Phi_s = 1$ dans l'espace des phases Φ_s .

Tout d'abord, les fractions massiques projetées Y_F^M et Y_O^M doivent être définies de telle sorte que la nouvelle fonction pré-exponentielle soit écrite :

$$P_e^M = Y_F^M Y_O^M .$$

Afin de trouver la transformation permettant de passer de (Y_F, Y_O) à (Y_F^M, Y_O^M) , un nouveau changement de coordonnées doit être effectué. Définissons tout d'abord le facteur de pente ζ des lignes $\mathcal{L}(Y_F, Y_O)$ issues de l'origine de l'espace des espèces ($Y_F = Y_O = 0$) et passant par le couple quelconque (Y_F, Y_O) .

$$\frac{Y_O}{Y_F} = \frac{\Phi_s}{\zeta} .$$

Pour une droite définie par un angle Φ_s , ζ correspond au rapport des pentes entre cette droite et une droite quelconque $\mathcal{L}(Y_F, Y_O)$. La projection se doit de préserver ce facteur ($\zeta = \zeta^M$) avec $\zeta^M = Y_F^M/Y_O^M$. Nous en déduisons une première relation donnée par l'équation 2.90 :

$$\frac{Y_F^M}{Y_O^M} = \Phi_s \frac{Y_F}{Y_O} . \quad (2.90)$$

Cela implique une projection des paramètres de la fonction P_e^M dans le plan défini par Y_F et Y_O . La dernière équation (Eq. 2.90) nous donne l'angle de la droite dans l'espace (Y_F, Y_O) où les données (Y_F^M, Y_O^M) ont été projetées. Il reste un dernier paramètre à déterminer : la distance du point considéré à l'origine, représentée par p . Cette distance se doit d'être constante dans les deux espaces. Par conséquent, on a une dernière relation entre (Y_F, Y_O) et (Y_F^M, Y_O^M) donnée par l'équation 2.91 :

$$Y_F^M + Y_O^M = Y_F + Y_O . \quad (2.91)$$

Nous en déduisons directement Y_F^M et Y_O^M par l'équation 2.92 :

$$Y_F^M = Y_F \frac{\Phi_s(Y_F+Y_O)}{\Phi_s Y_F + Y_O} , \quad (2.92)$$

$$Y_O^M = Y_O \frac{Y_F+Y_O}{\Phi_s Y_F + Y_O} .$$

Par conséquent, le nouveau facteur pré-exponentiel nous est donné par l'équation 2.93 :

$$P_e^M = Y_F Y_O \frac{\Phi_s(Y_F + Y_O)^2}{(\Phi_s Y_F + Y_O)^2} . \quad (2.93)$$

Scaling

Si les coefficients exponentiels ν_F et ν_O ont été choisis de telle sorte que $\nu_O/\nu_F = \Phi_s$ et $\nu_O + \nu_F = 1$, la nouvelle loi d'Arrhenius peut s'écrire sous la forme :

$$\dot{\omega}_R = K(\phi) \rho Y_F Y_O \frac{\Phi_s(Y_F + Y_O)^2}{(\Phi_s Y_F + Y_O)^2} \exp\left(\frac{\beta}{\alpha} - \frac{\beta}{\alpha(1-\alpha)T}\right) , \quad (2.94)$$

où $K(\phi)$ est une constante permettant de faire correspondre exactement la vitesse de flamme obtenue numériquement aux vitesses de flamme obtenues expérimentalement. Ce facteur ne dépend que de ϕ .

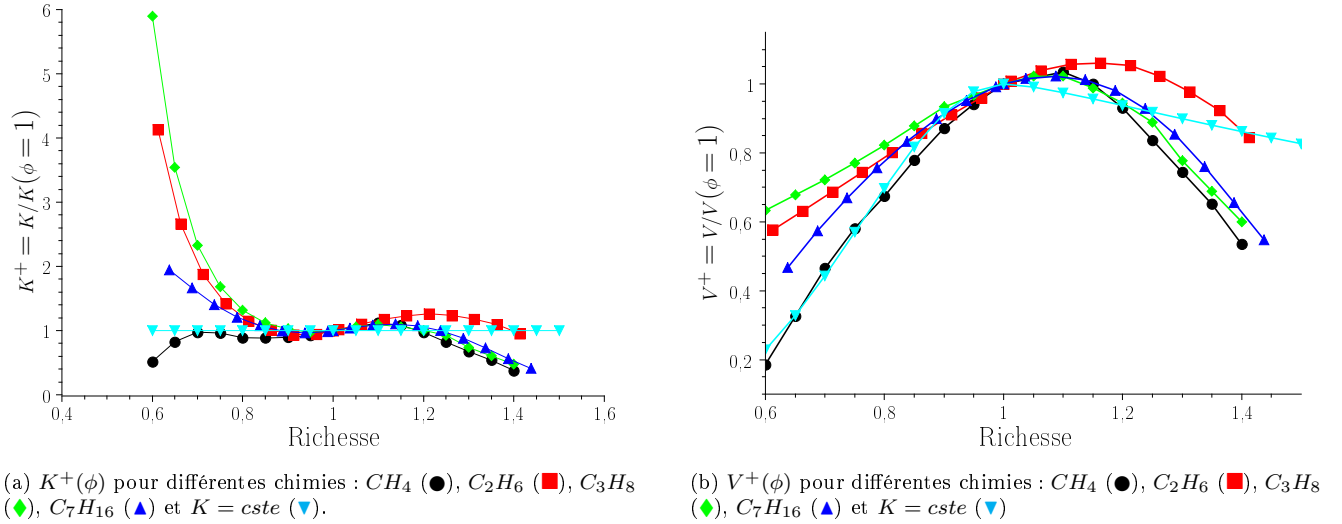
Les valeurs $K(\phi)$ ont été obtenues théoriquement pour le cas du CH_4 , C_2H_6 , C_3H_8 et C_7H_{16} . La figure 2.23a nous montre les valeurs de K normalisé (noté $K^+ = K(\phi)/K(\phi = 1)$) pour ces différentes espèces.

Généralisation de la méthode K GKAS

Il pourrait être intéressant de trouver une loi d'Arrhenius commune à toutes les espèces simulées. Quelques études, effectuées notamment par Mallard et Le Chatelier [45], ainsi que par Clavin [46] montrent que $V^2 \propto \dot{\omega}$ avec V la vitesse de flamme. On obtient donc :

$$V(\phi)^2 \propto K(\phi) \rho Y_F Y_O \frac{\Phi_s(Y_F + Y_O)^2}{(\Phi_s Y_F + Y_O)^2} \exp\left(\frac{\beta}{\alpha} - \frac{\beta}{\alpha(1-\alpha)T}\right) \propto K(\phi) . \quad (2.95)$$

Les vitesses de flamme $V^+ = V/V_0$ en fonction de la richesse sont représentées pour différentes chimies par la figure 2.23b.


 FIG. 2.23: $K^+(\phi)$ et $V^+(\phi)$ pour différentes chimies.

L'équation 2.95 nous donne la tendance générale de l'évolution de $V(\phi)^2$ en fonction de $K(\phi)$. On définit par la suite les valeurs normalisées $K^+(\phi) = K(\phi)/K(\phi = 1)$ et $V^+(\phi) = V(\phi)/V(\phi = 1)$. Comme V^2 et K sont proportionnels, on va s'intéresser au rapport K^+/V^{+2} . Afin de rester dans des ordres de grandeur raisonnables, et afin de tirer une loi indépendante de la réactivité plus ou moins accentuée des espèces, on posera :

$$\kappa(\phi) = \ln \left(\frac{K^+(\phi)}{V^{+2}(\phi)} \right) .$$

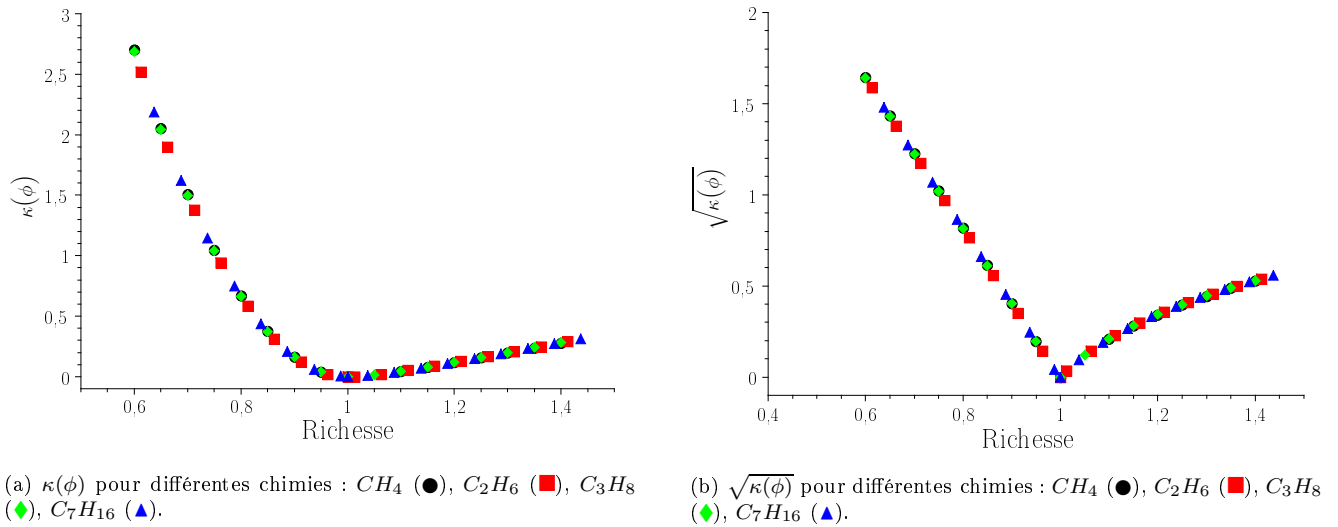
Nous pouvons ré-écrire l'équation 2.93 sous la forme suivante :

$$\dot{\omega}_R = K(\phi = 1)\rho V^{+2}(\phi) \exp(\aleph(\phi)) \exp \left(\frac{\beta}{\alpha} - \frac{\beta}{\alpha(1-\alpha)T} \right) .$$

Nous avons tracé sur la figure 2.24a $\kappa(\phi)$ en fonction de ϕ pour différentes espèces. Cette figure nous montre que quelle que soit l'espèce considérée, $\kappa(\phi)$ est identique. Il s'agit maintenant de trouver une loi permettant de la déterminer. Nous pouvons voir sur cette figure que pour $\phi > 1$, \aleph est une droite. Pour les $\phi < 1$, κ ressemble à une parabole, nous traçons donc $\sqrt{\kappa(\phi)}$ en fonction de ϕ . Cette fonction est tracée sur la figure 2.24b.

De cette figure nous montre que κ est relié linéairement à ϕ dans la zone riche, et $\sqrt{\kappa}$ est relié linéairement à ϕ dans la zone pauvre. Cette fonction est donc indépendante de $V(\phi)$.

On va donc noter A_l le coefficient directeur de $\sqrt{\kappa}$ pour $\phi < 1$ et A_r le coefficient directeur de κ pour $\phi \geq 1$.


 FIG. 2.24: $\kappa(\phi)$ et $\sqrt{\kappa(\phi)}$ pour différentes chimies.

Espèce	ν_F	A_l	A_r
CH_4	0.05516	-4.1110	0.69491
C_2H_6	0.05877	-4.09729	0.70331
C_3H_8	0.06032	-4.09909	0.70271
C_7H_{16}	0.0625	-4.08055	0.71474

 TAB. 2.1: Coefficients ν_F , A_l et A_r pour différentes espèces

Nous pouvons en tirer la conclusion que

$$\begin{aligned} \kappa(\phi) &\sim (A_l(\phi - 1))^2 \quad \text{si } \phi \leq 1, \\ \kappa(\phi) &\sim A_r(\phi - 1) \quad \text{si } \phi > 1. \end{aligned}$$

A_l , A_r et ν_F ont été déterminés pour quatre espèces. Ces coefficients sont donnés dans le tableau 2.1.

Les coefficients A_l et A_r étant très proches pour toutes ces espèces, nous prendrons la valeur moyenne $\bar{A}_l = -4.09698$ et $\bar{A}_r = 0.70391$.

La fonction analytique κ définie par :

$$\begin{cases} K(\phi) = (\bar{A}_l(\phi - 1))^2 & \text{si } \phi < 1, \\ K(\phi) = \bar{A}_r(\phi - 1) & \text{si } \phi \geq 1. \end{cases} \quad (2.96)$$

est représentée par la figure 2.25 pour ces espèces. De $\kappa(\phi)$ nous pouvons déduire immédiatement

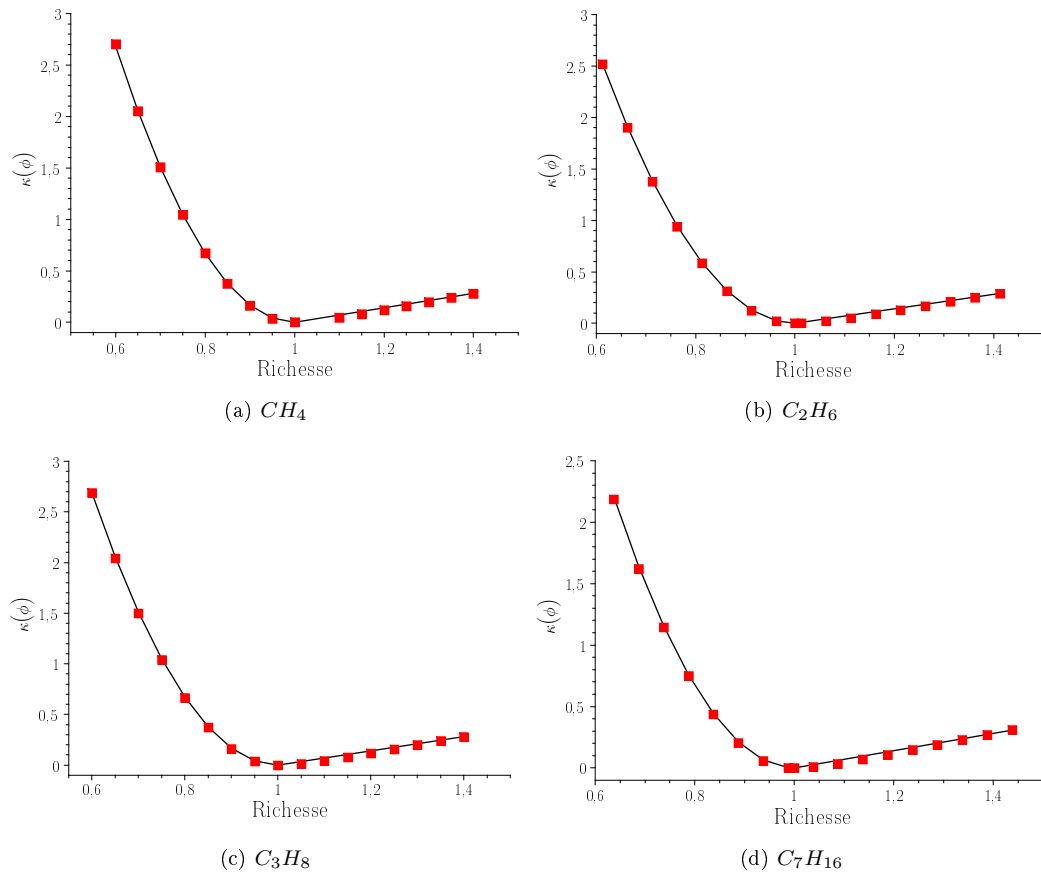


FIG. 2.25: κ réel (■) et κ modélisé (—) pour le CH_4 , C_2H_6 , C_3H_8 et C_7H_{16} .

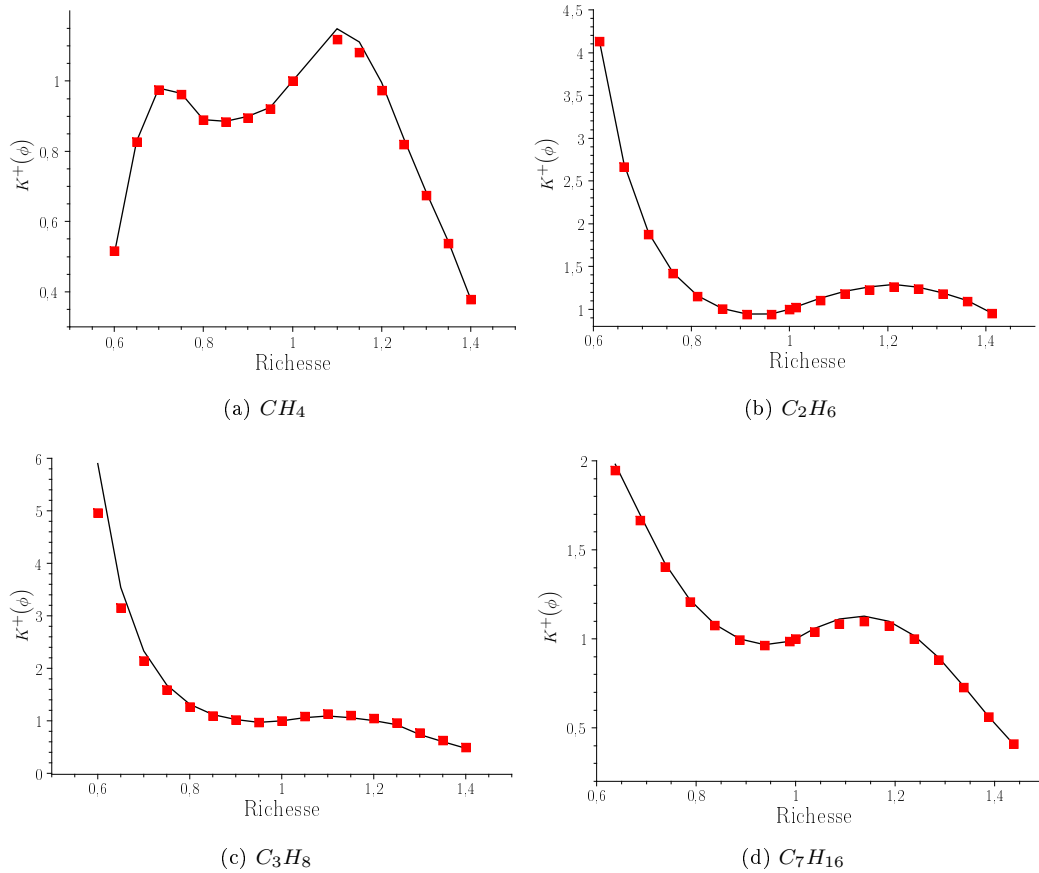


FIG. 2.26: K^+ réel (■) et K^+ modélisé (—) pour le CH_4 , C_2H_6 , C_3H_8 et C_7H_{16} .

le coefficient pré-exponentiel $K(\phi)$ par :

$$K^+(\phi) = V^{+2} \exp(\kappa(\phi)) \quad \text{avec} \quad K(\phi) = K^+(\phi)K_{st} . \quad (2.97)$$

Les facteurs $K^+(\phi)$ sont représentés par la figure 2.26, où nous voyons une très bonne concordance entre notre modèle et les coefficients réels.

Les paramètres nécessaires à la détermination de la chimie sont maintenant la vitesse de flamme en fonction de la richesse (données expérimentales), ainsi que le facteur pré-exponentiel à la stoechiométrie $K(\phi = 1)$ et le coefficient stoechiométrique du fuel ν_F .

Et enfin, nous recensons dans le tableau 2.2 les valeurs de K_{st} pour ces espèces.

La simulation de cinq flammes triples a été effectuée afin d'observer la faculté de ce modèle à rendre compte de phénomènes complexes. Le résultat de ces simulations est représenté sur la figure 2.27.

Espèce	K_{st}
CH_4	17630
C_2H_6	18772
C_3H_8	19291
C_7H_{16}	17204

TAB. 2.2: Coefficients K_{st} pour différentes espèces.

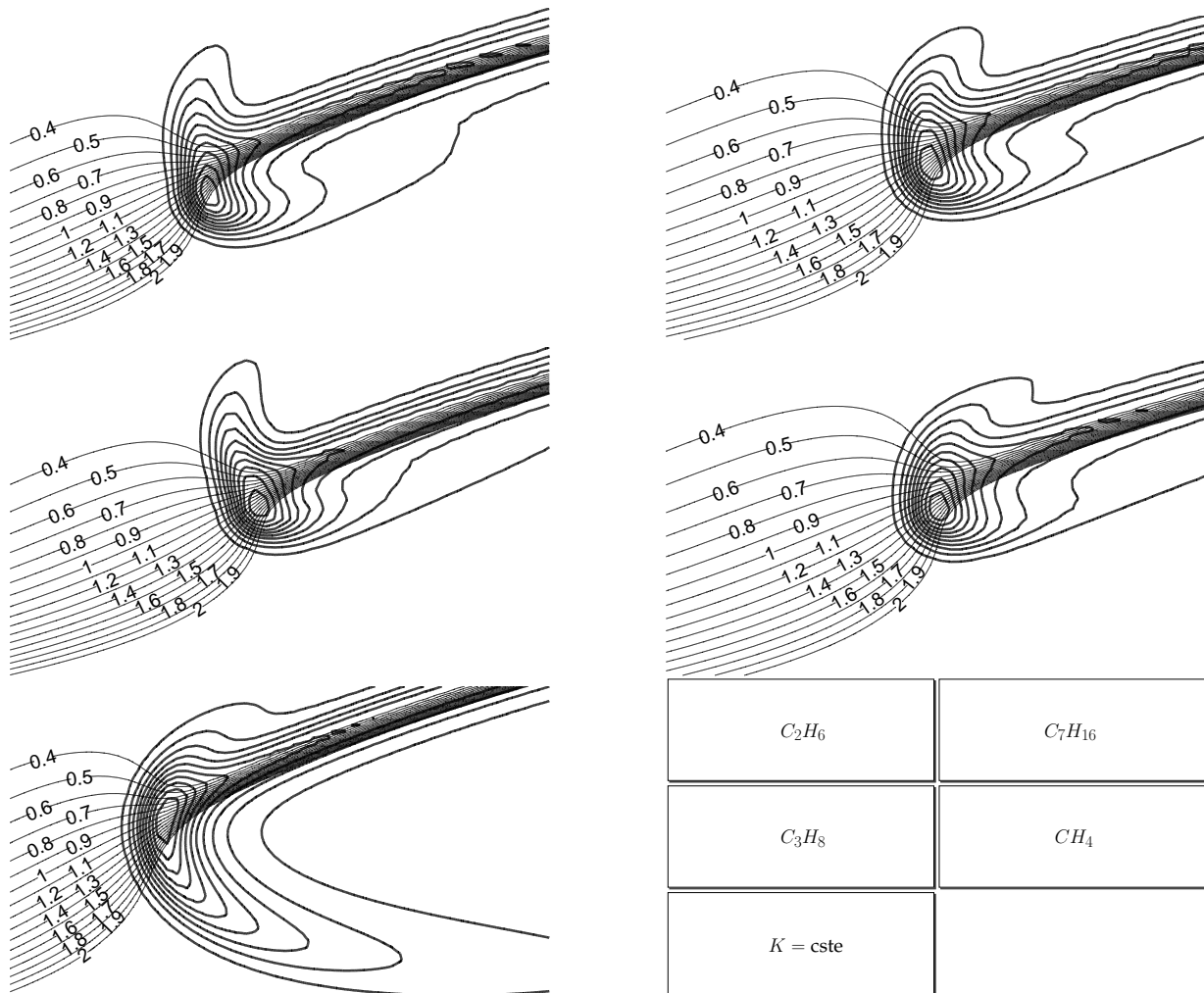


FIG. 2.27: Flammes triples pour plusieurs espèces, ainsi que pour $K = cste$ et iso-contour de richesse.

2.4.3.3 Flamme froide

Certaines études effectuées dans ce travail de thèse nécessitent une chimie dite de “flamme froide“ (i.e. qui ne dégage pas de chaleur), afin que le gaz ne se dilate pas. Pour ce faire, l’utilisation d’une température virtuelle est nécessaire. Celle-ci dépend linéairement de la fraction massique des gaz brûlés. L’estimation de cette température est donnée par l’équation 2.98 :

$$T_{virt} = T_0 + \frac{\alpha}{1 - \alpha} Y_{GB} , \quad (2.98)$$

avec Y_{GB} la fraction massique de gaz brûlé, α la température réduite décrite dans le chapitre 2.4.3.2, T_0 la température de référence du domaine et T_{virt} la température virtuelle qui sera utilisée pour l’estimation du terme source chimique. Dans ce cas, afin de garder une température de domaine constante, on définit l’enthalpie de formation des gaz brûlés $h_{0,GB}$ de sorte que $\sum_k h_{0,k} = 0$.

Avec cette méthode, la chaleur dégagée par la flamme est nulle, donc la variation de la masse volumique du gaz aussi. La validation de cette méthode et la comparaison des résultats avec une flamme chaude de référence a été effectuée dans le chapitre 3.2.

2.5 Mise en application : cylindre chaud

Afin de tester les méthodes numériques développées au sein d'*Asphodele*, une configuration particulière a été mise en place : elle consiste à plonger un cylindre chaud dans un écoulement diphasique, d'étudier l'évaporation, le mélange et l'allumage de la flamme. L'utilisation de filaments pour stabiliser une flamme est une technique largement utilisée dans le monde de la combustion [47]. En effet, la présence d'une source de chaleur dans un milieu propice à la combustion permet la création et la stabilisation d'une flamme, ce qui l'empêche de se propager librement ou de s'éteindre. Cette technique est très répandue pour les études expérimentales de flammes stationnaires [48]. Cependant, dans le cas de la stabilisation d'une flamme diphasique, les études sont rares. Nous verrons dans cette section que plusieurs paramètres importants apparaissent dans ce cas diphasique. Ceux ci sont la température du fil, le nombre de Reynolds du milieu, mais aussi les paramètres caractéristiques des gouttes tels que leur diamètre et leur densité (donc la richesse).

Les premières études concernant l'impact de corps immergés sur des sprays ont été effectuées par Landahl et Herrmann [49]. Ces études ont pu déterminer les paramètres entrant en jeu afin de quantifier les collisions entre les gouttes et ces corps immergés. Elles ont été approfondies dans le cas d'un cylindre plongé dans un écoulement d'air chargé de gouttelettes [50], ce qui a permis d'étudier par la suite les transferts thermiques dans ce cas [51, 52]. Il s'est avéré que la présence de gouttelettes dans la couche limite entourant le corps immergé a un impact significatif sur les transferts thermiques que subit le cylindre [53, 54].

D'autres études ont porté sur le comportement d'une flamme monophasique stabilisée dans le sillage d'un corps immergé. Des expérimentations ont permis d'analyser la limite d'allumage et d'extinction de ces flammes [55, 56, 47, 57]. Plusieurs analyses ont été effectuées grâce à la simulation afin d'étudier plus finement les phénomènes mis en jeu [58].

Cependant, peu d'études combinant corps immergés, sprays et combustion ont été effectuées. Citons notamment Yuan [59] qui étudia expérimentalement l'allumage de sprays par des surfaces chaudes. Nous nous proposons ici de combiner ces phénomènes afin d'étudier numériquement la stabilité de flammes diphasiques dans le sillage d'un cylindre chauffé. Il s'agit d'une étude très préliminaire dont l'objectif premier est de tester les capacités des outils numériques mis en oeuvre dans le code *Asphodele* au cours de ce travail de thèse.

2.5.1 Outils numériques utilisés

Cette étude nécessite plusieurs outils numériques spécifiques à chacun des phénomènes physiques intervenant dans ces simulations. Les solutions aérodynamiques résolues dans ce solveur sont les équations classiques de Navier-Stokes, présentées dans le paragraphe 2.2.1 (page 25), utilisant l'approximation LMN. La chimie utilisée ici est une chimie simple à une étape, présentée dans la section 2.4.3.2 (page 70). La gestion du corps immergé est présentée dans le paragraphe 2.4.1 (page 51), ainsi que son interaction avec les gouttes dans le chapitre 2.4.2.2. Les gouttes sont ici supposées sphériques. Leur temps cinétique caractéristique τ_p défini dans le chapitre 2.3.1.1 (page 33) est un paramètre d'entrée, au même titre que le temps caractéristique d'évaporation τ_v défini dans le chapitre 2.3.1.2 (page 34).

2.5.2 Configuration numérique

La configuration du domaine de simulation est représentée par la figure 2.28. Il s'agit d'un domaine 2D d'une longueur $L_x = 6.318 \text{ mm}$ et de hauteur $L_y = 3.159 \text{ mm}$. Le maillage utilisé pour la résolution est un maillage cartésien contenant $N_x = 800$ mailles sur x et $N_y = 400$ mailles sur y . Cette discrétisation permet une bonne description des propriétés des flammes présentes, étant donné qu'elle permet d'avoir une vingtaine de points à travers la flamme de référence.

L'entrée du domaine se situe à gauche et sa sortie à droite, les frontières selon l'axe vertical y étant périodiques. La sortie est une sortie convective. Le cylindre chaud est constitué d'un cylindre immergé de diamètre $d_c = 631.8 \text{ }\mu\text{m}$ correspondant à un fil chaud dans un dispositif expérimental. Sa température est élevée à 1577.17°C . La discrétisation ici permet d'avoir plusieurs mailles à travers la couche limite qui va se développer autour de ce cylindre.

Le fluide injecté est de l'air avec 20% d'oxygène et à pression de 101144 Pa. Il est injecté à une vitesse $U_{inj} = 5 \text{ m}\cdot\text{s}^{-1}$. Le spray injecté est mono-dispersé et a une densité en goutte par maille de 1. La taille de goutte initiale est $\bar{d} = 1.943 \text{ }\mu\text{m}$. La loi d'évaporation utilisée est la loi IAT, présentée dans le chapitre 2.3.1.3. Le temps caractéristique d'évaporation utilisé ici est $\tau_v = 63.176 \text{ }\mu\text{s}$.

Le nombre de Reynolds de l'écoulement, défini avec le diamètre du diamètre du cylindre et la vitesse d'injection, est $Re = 200$.

Dans un cas physiquement réaliste, les temps caractéristiques τ_p et τ_v sont liés pour une même espèce. Une variation de diamètre des gouttes induisant la variation de ces deux paramètres, les effets qui en découlent deviennent difficilement distinguables. Nous nous proposons ici de

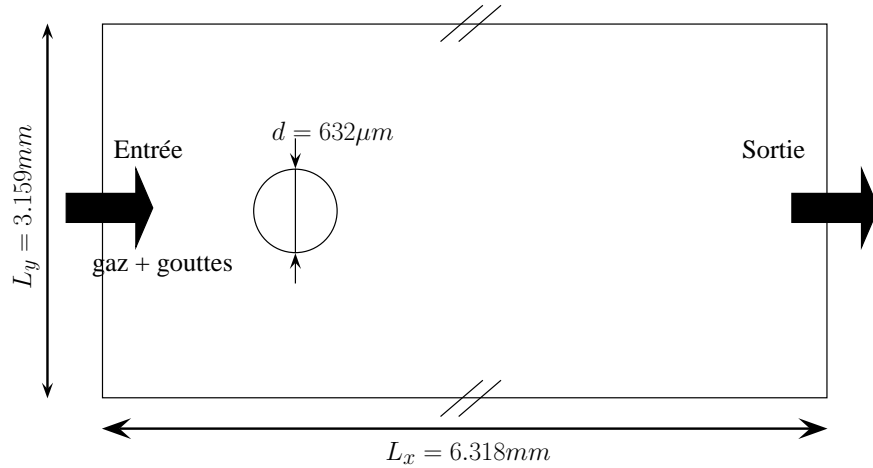


FIG. 2.28: Configuration du domaine

Nom de la simulation	τ_p (code)	τ_p (physique) μs	τ_p/τ_{fl}	Nombre de Stokes	Évaporation	Chimie
1_DENS	0.01	6.318	1.10^{-3}	$5.265.10^{-2}$	non	non
2_DENS	0.1	63.18	1.10^{-2}	$5.265.10^{-1}$	non	non
3_DENS	0.5	315.9	5.10^{-2}	2.632	non	non
1_EVAP	0.01	6.318	1.10^{-3}	$5.265.10^{-2}$	oui	non
2_EVAP	0.1	63.18	1.10^{-2}	$5.265.10^{-1}$	oui	non
3_EVAP	0.5	315.9	5.10^{-2}	2.632	oui	non
1_COMB	0.01	6.318	1.10^{-3}	$5.265.10^{-2}$	oui	oui
2_COMB	0.1	63.18	1.10^{-2}	$5.265.10^{-1}$	oui	oui
3_COMB	0.5	315.9	5.10^{-2}	2.632	oui	oui

TAB. 2.3: Liste des configurations des simulations effectuées

ne faire varier artificiellement qu'un seul paramètre : τ_p . Cela nous permettra de comprendre en détail l'influence du nombre de Stokes des gouttes sur la structure de flamme. Le mélange initial est à la stoechiométrie, le fuel injecté étant exclusivement liquide.

Trois jeux de simulations ont été effectuées. Le seul paramètre qui varie entre ces trois jeux de simulations est le nombre de Stokes des gouttes. Leurs valeurs ont été répertoriées dans le tableau 2.3. Le temps caractéristique de l'écoulement, ainsi que le nombre de Stokes sont définis par la relation 2.99.

$$\tau_e = \frac{d_c}{U_{inj}} = 120 \mu s ; St = \frac{\tau_p}{\tau_e} . \quad (2.99)$$

De plus, il faut noter que le modèle de collision élastique utilisé ici n'est valable que pour des gouttes dont le diamètre est suffisamment faible. En effet, pour des nombres de Weber supérieurs à 80, les gouttes se désintègrent lors de la collision [60, 61]. Dans notre cas, ce nombre de Weber critique apparaît pour des gouttes dont le diamètre est supérieur à $100 \mu m$, soit un temps caractéristique critique $\tau_p^{cr} = 20 ms$. Les nombres de Weber choisis ici étant très nettement inférieurs au nombre de Weber critique, les rebonds pourront être considérés comme

parfaitement élastiques.

Afin d'analyser uniquement l'impact du nombre de Stokes sur la flamme, seul τ_p sera variable. Une autre hypothèse est nécessaire. Celle-ci est la non-prise en compte de la catalyse sur le cylindre. La raison en est que la chimie utilisée ici est une chimie simple à une étape, ce qui empêche la prise en compte de l'impact de la présence d'un corps chaud sur les radicaux présents.

2.5.3 Étude de la ségrégation

La densité de goutte est importante dans la mesure où nous pouvons directement en déduire la quantité de fuel liquide localement disponible. La ségrégation des gouttes dépendant du nombre de Stokes dans un milieu turbulent, nous pouvons présager qu'en aval du cylindre, là où le fluide devient turbulent, ce paramètre aura un impact sur la ségrégation. Cependant, en amont, la collision entre les gouttes et le corps immergé aura aussi un effet sur leur évaporation ainsi que sur les propriétés du mélange qui arrive sur le cylindre. Les simulations effectuées pour étudier la ségrégation des gouttes en fonction de leur nombre de Stokes sont des simulations 1-way. Le gaz ne sera donc pas influencé par la présence de la phase disperse.

Les trois simulations effectuées nous ont permis de mettre en valeur trois phénomènes que nous détaillerons ici.

2.5.3.1 Impact du nombre de Stokes sur les collisions entre les gouttes et le corps immergé.

Des lignes de courant en aval du cylindre ont été tracées sur la figure 2.29a. Les gouttes les plus légères étant plus à même de les suivre, nous pouvons en déduire que pour de très faibles nombres de Stokes, aucune collision n'aura lieu. En effet, nous voyons sur la figure 2.30a que la vitesse de glissement $\mathbf{u}_g - \mathbf{u}$ des gouttes les plus légères reste faible en tout point du domaine. Étant donné que le gaz en contact avec le cylindre est au repos, si la vitesse de glissement tend à être nulle, alors les gouttes ne peuvent pas le toucher si elles sont considérées comme ponctuelles. Cet effet a été montré par Pawlowski en 1984 [50].

Les collisions entre les gouttes et le corps immergé vont donc être d'autant plus fréquentes et violentes que τ_p sera élevé. En effet, les gouttes venant de face au cylindre seront plus à même de collisionner avec lui, car elles ne seront pas déviées par l'écoulement (le système peut être considéré comme symétrique en amont). Cette déviation des gouttes va être d'autant plus

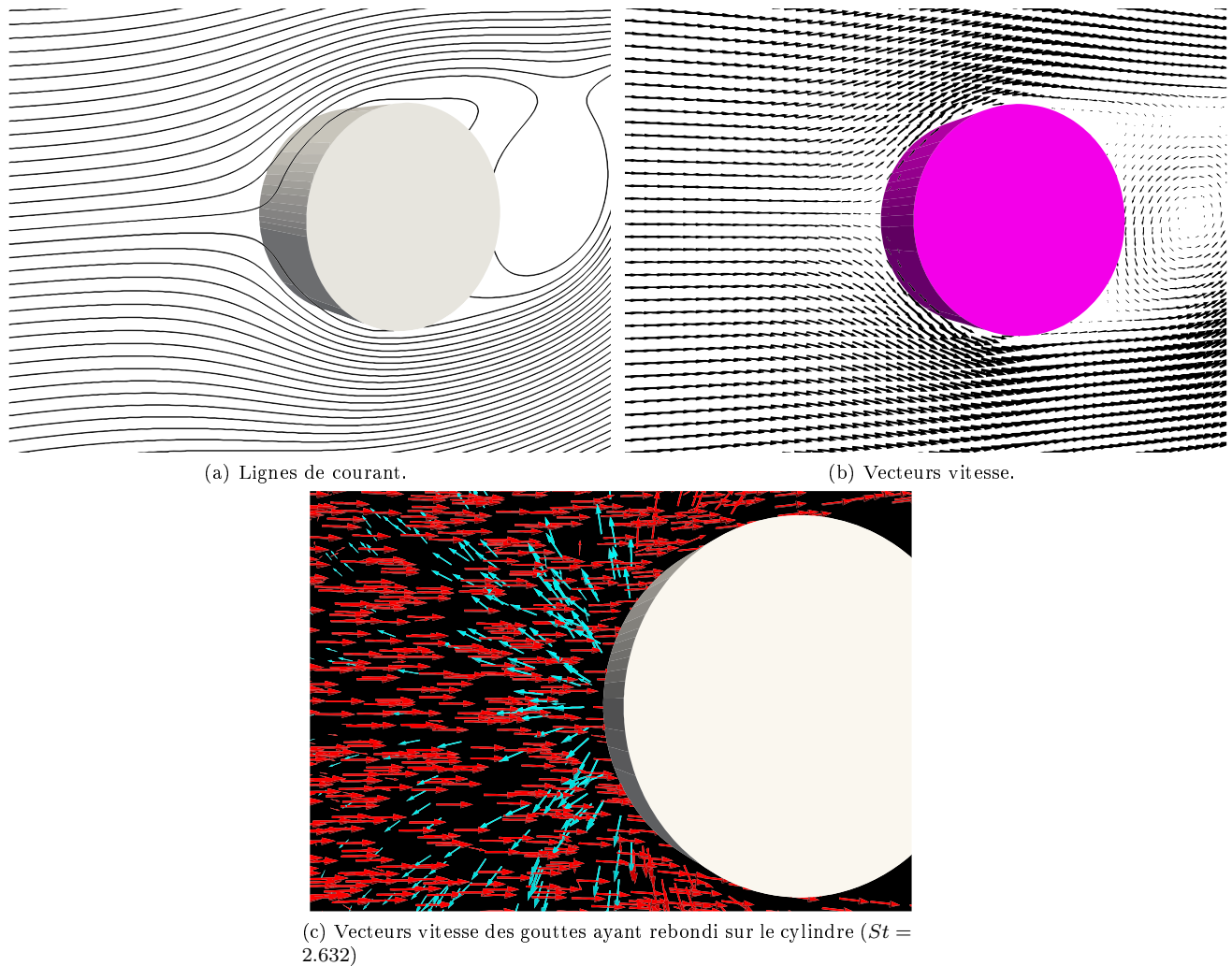


FIG. 2.29: Représentation des lignes de courant et des vecteurs vitesse du fluide et des gouttes autour du cylindre (gouttes n'ayant pas rebondi (\rightarrow) et gouttes ayant rebondi (\leftarrow)).

importante que l'on s'éloigne du centre du domaine, le fluide contournant le cylindre. Plus les gouttes seront balistiques, moins elles seront sensibles à cette déviation, plus elles seront à même de collisionner avec le cylindre loin du centre du domaine. Ce phénomène est représenté sur la figure 2.31, où l'on voit les trajectoires des gouttes pour un nombre de Stokes modéré (gouttes en bleu, $St = 5.265 \cdot 10^{-1}$) ainsi que pour un nombre de Stokes élevé (gouttes en rouge, $St = 2.632$). A ce stade nous atteignons les limites de l'hypothèse de choc élastique.

En amont du cylindre, les gouttes ne peuvent s'évaporer que là où la chaleur dégagée par le cylindre influe significativement sur la température du gaz. Par conséquent, seule la région proche cylindre en amont est susceptible de les évaporer. Or, les gouttes s'approchent plus de la zone chauffée par le cylindre quand elles sont plus lourdes.

De plus, si elles rebondissent, elles peuvent repartir près de la zone d'injection, et revenir

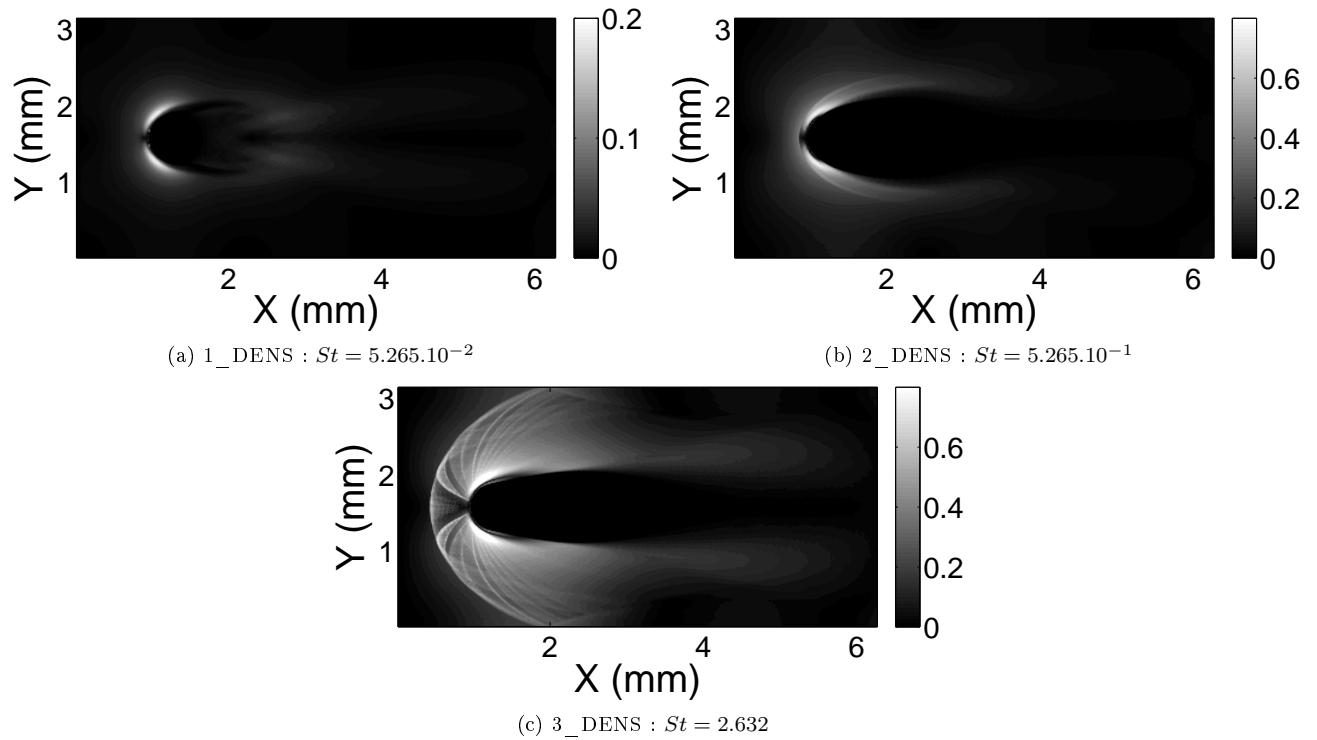


FIG. 2.30: Vitesse de glissement moyenne des gouttes dans le domaine pour trois nombres de Stokes différents.

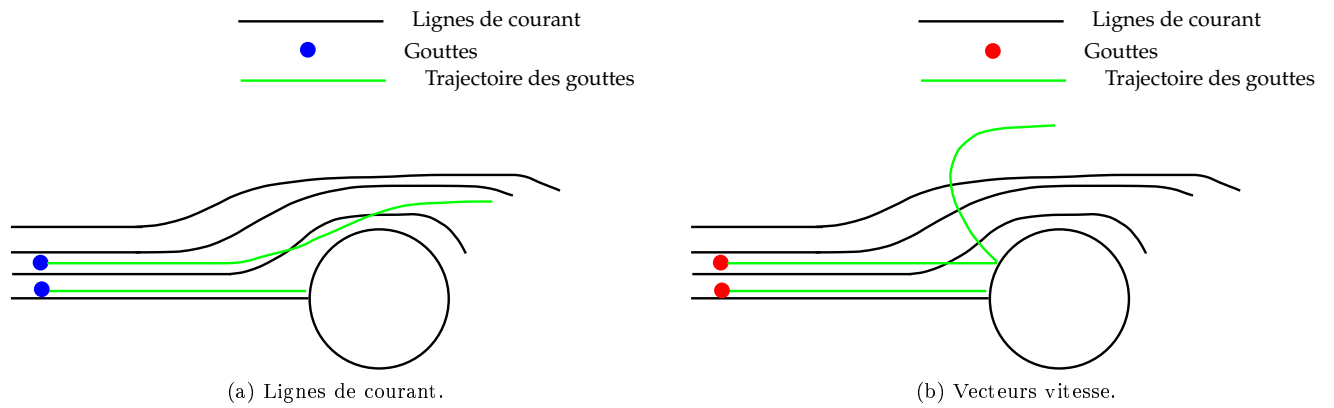


FIG. 2.31: Représentation des trajectoires (lignes vertes) de deux gouttes de balistiques différentes ($St = 5.265.10^{-1}$ à gauche; $St = 2.632$ à droite). Les lignes de courant sont en lignes noires, les gouttes sont en bleu pour $St = 5.265.10^{-1}$ et rouge pour $St = 2.632$.

collisionner une seconde fois l'obstacle, ce qui implique une évaporation encore plus importante. La densité de goutte en amont, due aux collisions entre celles-ci et le cylindre, va donc être d'autant plus importante que le nombre de Stokes est élevé.

2.5.3.2 Impact du nombre de Stokes sur la densité de gouttes en amont.

Les figures 2.32a, 2.32b et 2.32c montrent que pour les trois nombres de Stokes étudiés, la densité de goutte en amont du cylindre augmente lorsque les gouttes ont un nombre de Stokes plus élevé. Une couche de gouttes dense va apparaître lorsque les collisions deviendront effectives. Cet effet est visible sur la figure 2.32b qui représentent la densité moyenne de goutte. Les gouttes les plus balistiques (cas 3_DENS) entrent si violemment en collision avec le cylindre qu'elles sont éjectées loin de la couche limite. Le front de gouttes en aval visible sur la figure 2.32b disparaît, comme le montre la figure 2.32c.

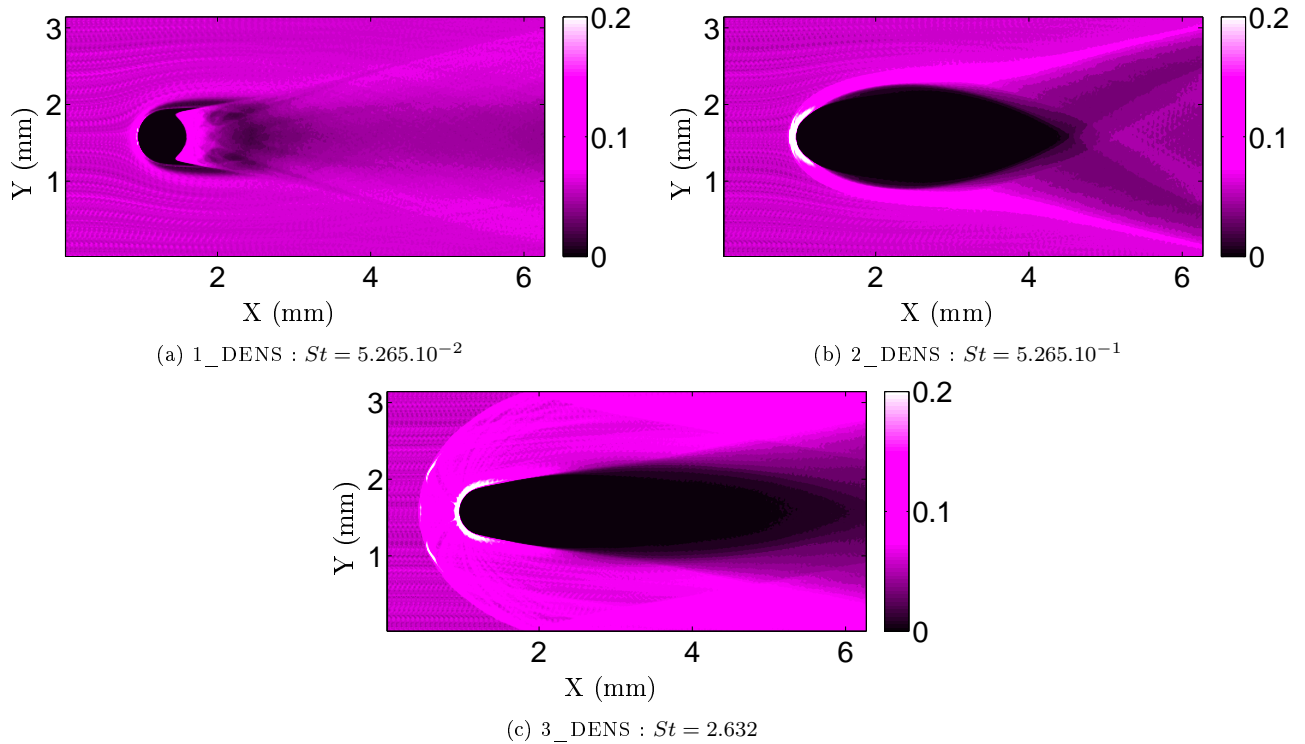


FIG. 2.32: Fraction massique moyenne de fuel liquide dans le domaine pour trois nombres de Stokes différents.

Il est possible de caractériser approximativement la distance du front de gouttes par rapport au cylindre. En considérant la vitesse du gaz constant ($U_g = U_0$) jusqu'au cylindre, ainsi que la vitesse des gouttes n'étant pas encore entrées en collision, il est possible d'exprimer analytiquement la vitesse ainsi que la position des gouttes en amont du cylindre après rebond. Prenons l'origine des temps à l'instant où la goutte entre en contact avec le corps immergé. La vitesse de la goutte à cet instant est $U_d(t = 0) = -U_0$. Cette configuration initiale est représentée sur le graphique 2.33. La relaxation de la vitesse de la goutte est donnée par l'équation 2.100. En l'intégrant, on trouve immédiatement la position de la goutte dans ce cas.

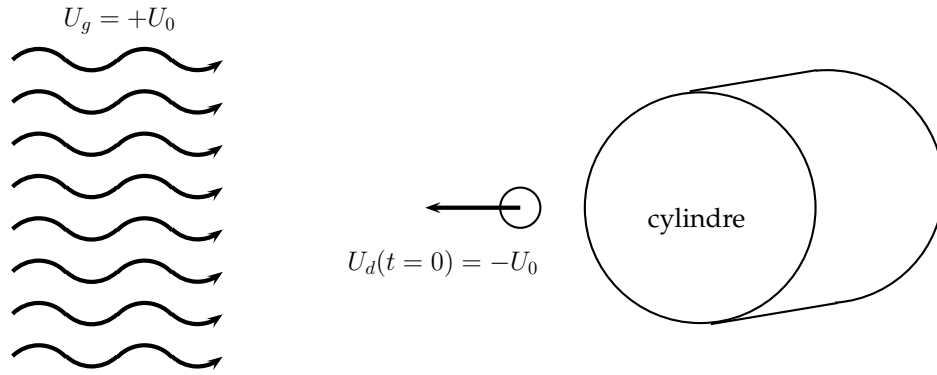


FIG. 2.33: Configuration du domaine

$$\begin{cases} U_d(t) = U_0 - 2U_0 e^{-t/\tau_p} , \\ X_d(t) = X_0 + U_0 (t + 2\tau_p (e^{-t/\tau_p} - 1)) . \end{cases} \quad (2.100)$$

L'instant où la goutte fait demi-tour (vitesse nulle) est $t_0 = \tau_p \ln(2)$. On trouve par conséquent la position du front de gouttes :

$$X_{min} = X(t_0 = \tau_p \ln(2)) = X_0 + \tau_p U_0 (\ln(2) - 1) , \quad (2.101)$$

avec X_0 l'extrémité gauche du cylindre. Cette solution analytique a été tracée sur la figure 2.34. On voit que cette distance, dans le cadre de l'approximation d'une vitesse de gaz constante, est linéairement dépendante de τ_p , donc du nombre de Stokes.

Afin de comprendre l'impact qu'a le nombre de Stokes sur le choc de gouttes en amont, la valeur moyenne de la densité selon l'axe x en fonction du nombre de Stokes a été tracée sur la figure 2.34. Nous pouvons nettement voir que la distance du front de gouttes due aux rebonds est linéairement dépendante du nombre de Stokes et correspond à la solution analytique donnée ci-dessus.

De plus, un nombre de Stokes très élevé va augmenter de manière significative la densité en aval du cylindre. En effet, les gouttes ne s'évaporant pas dans ces trois simulations, le flux massique de fuel liquide va être constant sur chaque section du domaine une fois le régime établi. Or, les gouttes les plus balistiques ayant rebondi sur le cylindre vont se voir attribuer une vitesse négative : elles remontent vers la zone d'injection. Si le temps de relaxation τ_p est très grand, le temps que les gouttes vont mettre pour retrouver la vitesse du fluide ne va plus être négligeable. Toute la zone où ces gouttes auront une vitesse moindre que celle du gaz va avoir une densité de gouttes accrue. En effet, le flux massique de gouttes dans chaque section étant donné par l'équation 2.102, nous voyons que pour que ce flux soit constant, une diminution

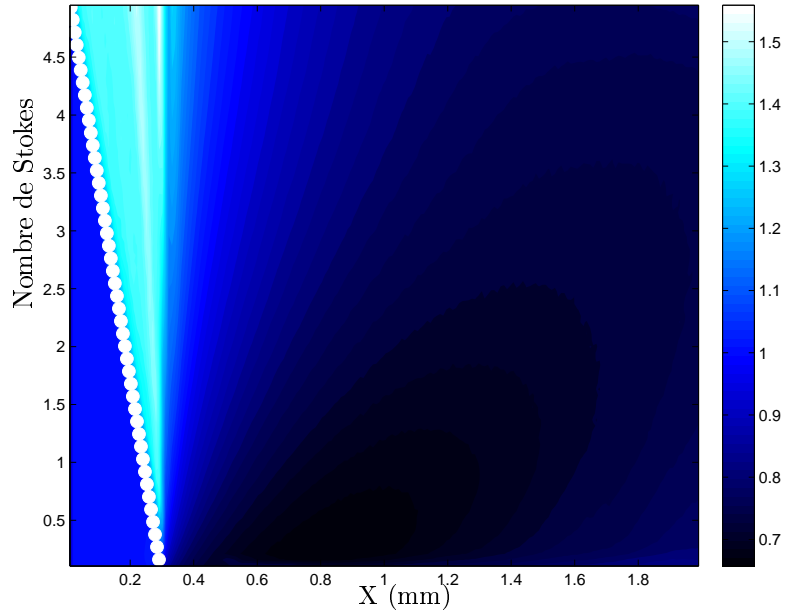


FIG. 2.34: Densité moyenne de fuel liquide dans le domaine en fonction du nombre de Stokes des gouttes, ainsi que la distance analytique du front de gouttes au cylindre (disques blancs).

de la vitesse moyenne de goutte implique une augmentation de la fraction volumique de liquide. Cette vitesse de glissement moyenne est montrée sur les figures 2.30a, 2.30b et 2.30c et s'écrit

$$Q_v = \iint_S d_v \langle \overrightarrow{u}(S) \rangle \cdot \overrightarrow{dS}, \quad (2.102)$$

avec Q_v le débit massique de fuel liquide à travers la surface S ($[kg.s^{-1}]$), d_v la densité volumique de fuel liquide ($[kg.m^{-3}]$) et $\langle u \rangle$ la vitesse moyenne des gouttes à l'endroit considéré ($[m.s^{-1}]$).

2.5.3.3 Impact du nombre de Stokes sur la densité de gouttes dans la zone de recirculation du cylindre.

Une zone de recirculation va s'établir en aval du cylindre. Comme précédemment, la trajectoire des gouttes les plus légères étant proche des lignes de courant, certaines d'entre elles vont être capturées dans cette zone. Cet effet est visible sur la figure 2.32a. Cela nous montre que plus les gouttes sont petites, plus elles seront entraînées par la turbulence présente en aval du cylindre. Plusieurs études ont été effectuées afin de démontrer l'impact du nombre de Stokes sur la ségrégation des gouttes en milieu turbulent [62]. Nous pouvons déduire de celles-ci que les gouttes les moins balistiques vont plus facilement être entraînées dans le sillage du cylindre par les instabilités de Von-Karman.

2.5.4 Étude du mélange

La ségrégation des gouttes décrite auparavant va nous permettre d'expliquer l'impact du nombre de Stokes sur le mélange gazeux lors de l'évaporation des gouttes. L'étude du mélange permet également de comprendre la structure de la flamme que nous étudierons plus loin.

Dans le cas de la simulation 1_EVAP (gouttes très légères), il n'y a aucun choc entre les gouttes et le cylindre : elles suivent les lignes de courant représentées sur la figure 2.29a. Par conséquent, comme les gouttes s'approchent peu du cylindre, leur évaporation va être faible autour du cylindre, comme le montre la figure 2.35a. Plus elles seront éloignées du cylindre, moins elles seront exposées à la chaleur dégagée par celui-ci. Par conséquent, la quantité de gouttes dans une position apte à les faire évaporer va être faible. Cependant, leur faible inertie sera propice à leur entraînement dans la zone de recirculation du cylindre, qui est chauffée. Les gouttes les plus légères vont donc peu s'évaporer en amont du cylindre, et beaucoup en aval.

Pour des gouttes plus balistiques (cas 2_EVAP), plus elles s'approcheront du cylindre, plus la densité de ces gouttes autour du cylindre va augmenter, comme nous pouvons le voir sur la figure 2.35b. Par conséquent, la quantité de gouttes se trouvant dans un gaz chaud va augmenter, ainsi que la quantité de fuel gazeux autour du cylindre. Néanmoins, à cause de leur plus grande difficulté à suivre des variations brutales des lignes de courant, celles-ci seront difficilement entraînées dans la zone de recirculation du cylindre. Le taux d'évaporation va donc être plus important en amont, et moins important en aval.

Finalement, pour une augmentation encore plus grande de la balistique du spray (cas 3_EVAP), les gouttes entreront en collision avec le cylindre. Dans ce cas limite, nous avons montré qu'un front de gouttes apparaît (figure 2.35b), dont la distance augmente linéairement avec le temps de relaxation des gouttes τ_p . Il apparaît donc une zone très forte en concentration de gouttes. Cette zone est certes éloignée du cylindre, mais elle constitue une réserve en gouttes qui – ayant déjà collisionné et donc en partie évaporées – peuvent recollisionner avec le cylindre. A chaque rebond, une quantité donnée de fuel gazeux sera déposée autour du cylindre.

Afin de comprendre l'importance des phénomènes expliqués ci-dessus, nous avons tracé la fraction massique gazeuse moyenne dans le domaine en fonction du nombre de Stokes sur la figure 2.36. Nous voyons l'augmentation du fuel gazeux autour du cylindre quand le nombre de Stokes augmente, ainsi que sa diminution sur les bords du sillage. Inversement, cette évaporation est plus élevée dans le sillage pour des nombre de Stokes plus faibles.

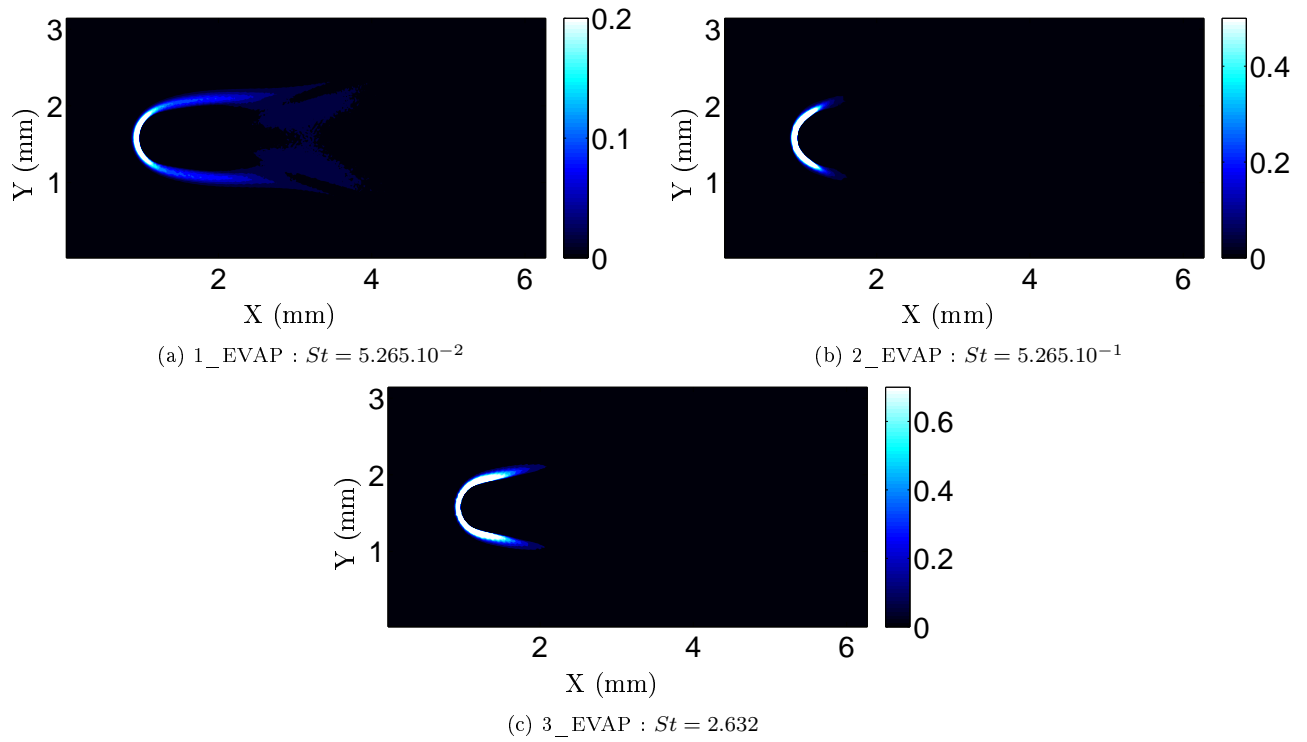


FIG. 2.35: Taux moyen d'évaporation des gouttes dans le domaine pour trois nombres de Stokes différents.

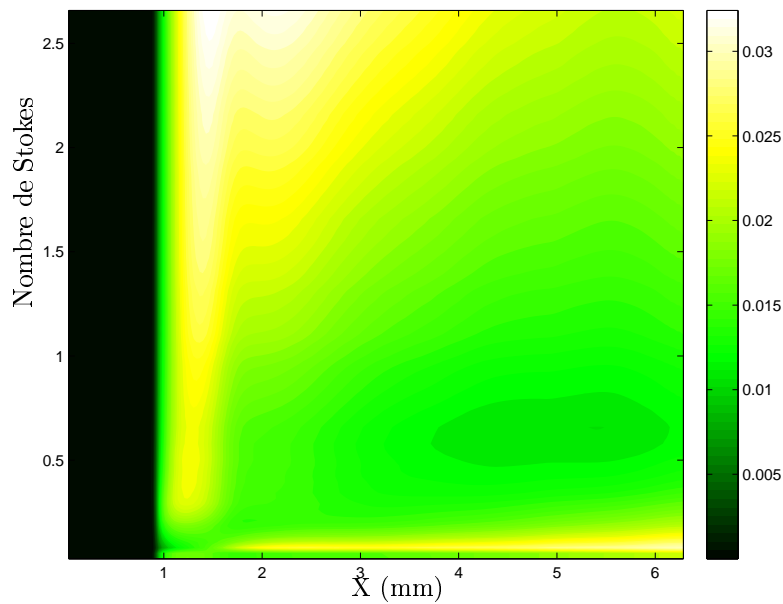


FIG. 2.36: Fraction massique moyenne de fuel gazeux dans le domaine en fonction du nombre de Stokes.

2.5.5 Étude de la combustion

Afin de comprendre l'impact du nombre de Stokes sur la structure de flamme, il est nécessaire de comprendre les effets qu'ont le nombre de Stokes sur la quantité de fuel liquide disponible

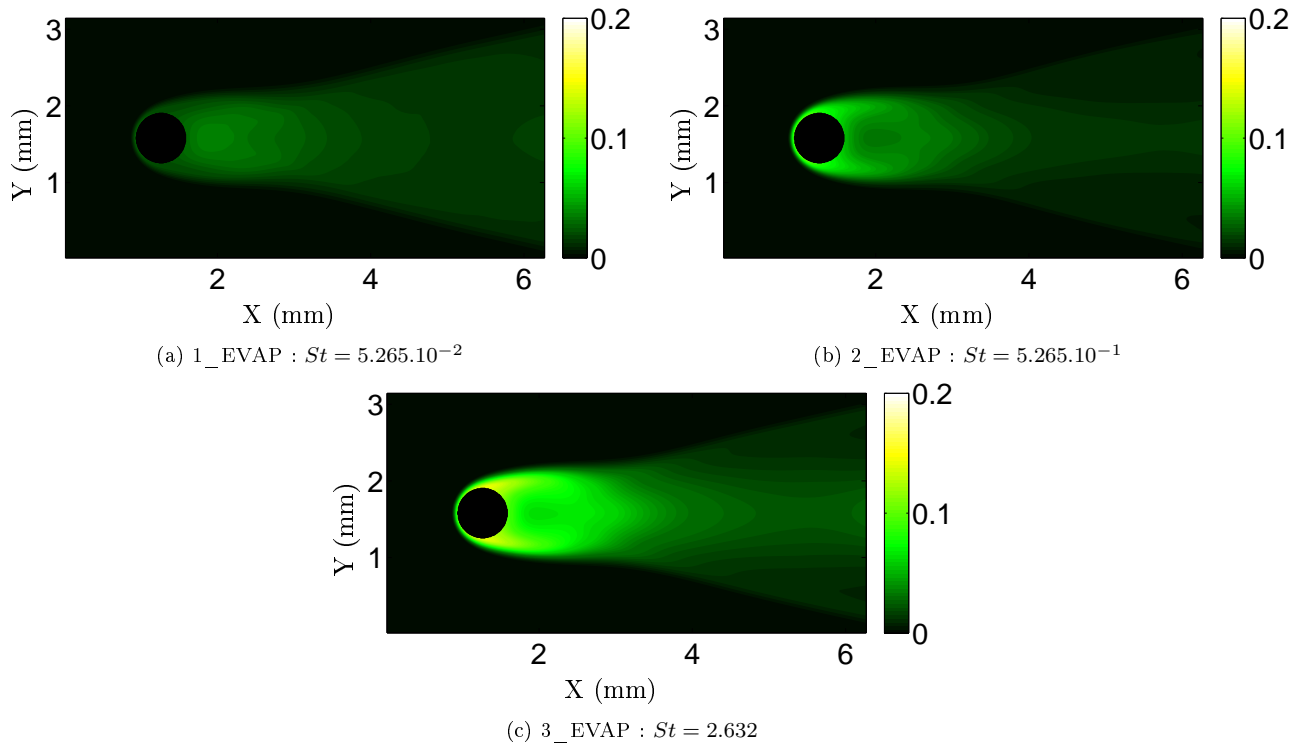


FIG. 2.37: Fraction massique moyenne de fuel gazeux dans le domaine pour trois nombres de Stokes différents.

dans le domaine, ainsi que sur le mélange de fuel gazeux qui va brûler par la suite.

Nous avons vu précédemment que la quantité de fuel aux abords du cylindre va augmenter avec l'augmentation du nombre de Stokes. La zone d'inflammabilité va donc être atteinte pour une certaine gamme de nombre de Stokes; ce qui implique pour un nombre de Stokes très élevés (cas 3_COMB) que cette quantité de fuel gazeux va être trop importante pour pouvoir s'enflammer. Ceci explique que le taux de réaction moyen représenté sur la figure 2.38c montre un décrochage de la flamme.

Dans le cas 2_COMB, la quantité de fuel aux abords du cylindre est plus faible que précédemment, comme représenté sur la figure 2.37b, ce qui va impliquer une combustion dans la région proche du cylindre et une accroche de la flamme, comme montré sur la figure 2.38b.

Finalement, pour le cas 1_COMB, la figure 2.37a nous montre que la quantité de fuel à proximité du cylindre est encore plus faible, mais cependant suffisante pour que le mélange s'enflamme. Dans le sillage du cylindre, les gouttes continuent à s'évaporer (comme le montrent les figures 2.35a, 2.36 et 2.37a).

L'augmentation du nombre de Stokes (cas 2_COMB) va induire une augmentation du fuel autour du cylindre. Cependant, les gouttes auront plus de difficulté à être entraînées dans le sillage. La flamme accrochée sur le cylindre ne va donc pas pouvoir se propager ensuite, le fuel

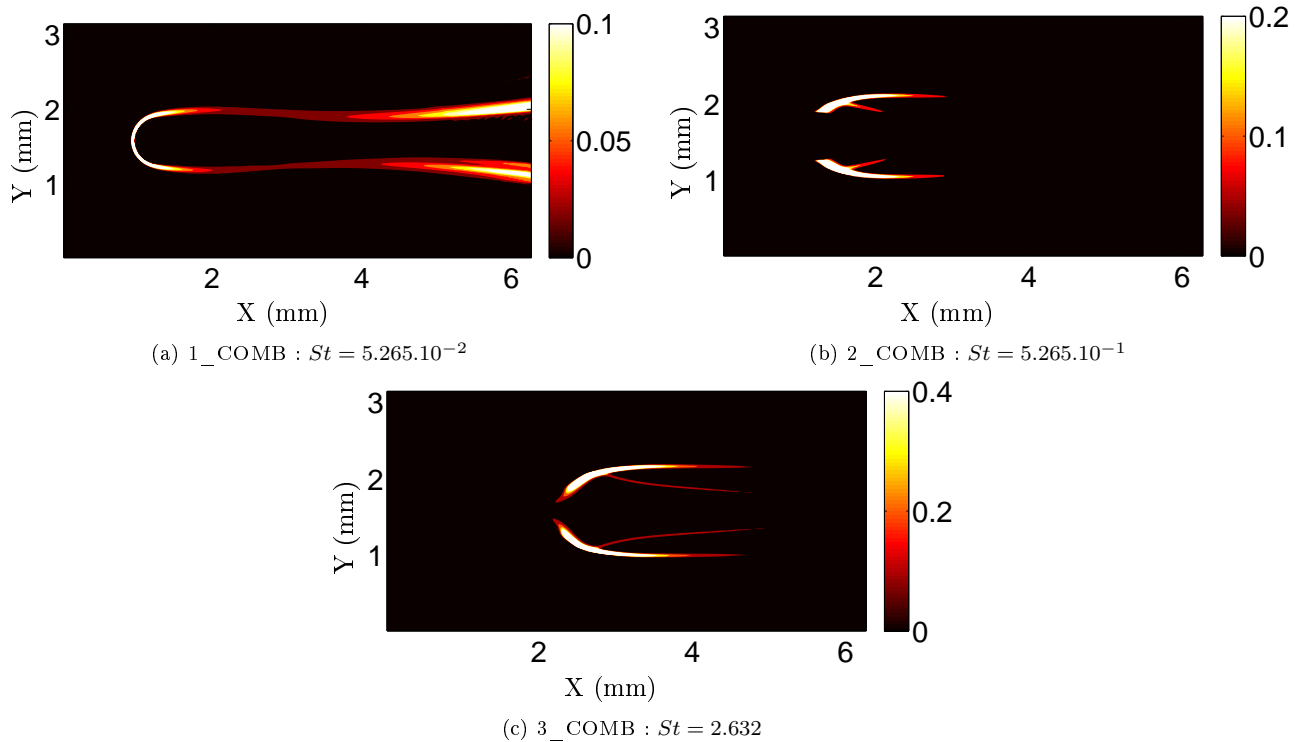
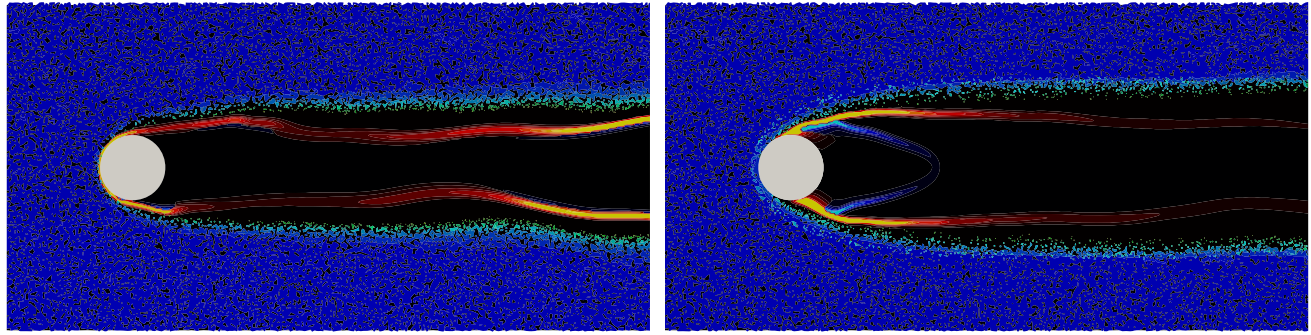
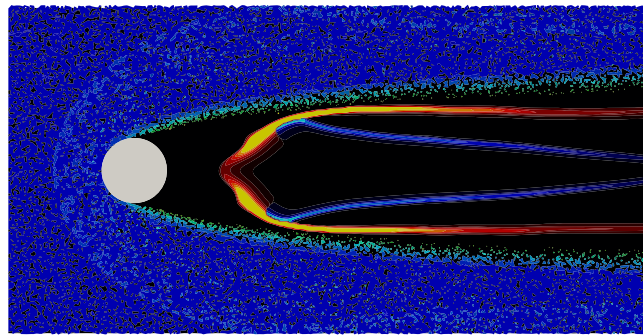


FIG. 2.38: Taux de réaction moyen dans le domaine pour trois nombres de Stokes différents.

liquide étant trop éloigné de la zone chaude. La flamme va se trouver confinée dans le sillage proche du cylindre, comme le montrent les figures 2.38b et 2.39b.

Enfin, pour les gouttes les plus balistiques, nous avons montré que la quantité de fuel gazeux va être très élevée autour du cylindre, ce qui induit une richesse trop importante pour permettre l'allumage. La flamme se détache du cylindre. L'espace entre le cylindre et la flamme va permettre un meilleur mélange entre les gaz frais et le fuel évaporé. Cela entraînera un allumage de la flamme. Le milieu dans lequel cette flamme brûle est très riche, comme nous l'avons montré sur la figure 2.32c. Cette flamme va rester confinée dans le sillage. Le fuel excédentaire va traverser la flamme de prémélange pour arriver ensuite dans le sillage chaud du cylindre, où se trouve aussi de l'oxydant passant par l'interstice entre le cylindre et la flamme. Toutes les conditions sont réunies pour qu'une flamme de diffusion (en bleu) apparaisse dans le sillage, comme nous le voyons sur la figure 2.39c.

Un scénario expliquant les phénomènes mis en jeu et leur impact sur la ségrégation, le mélange puis la combustion est proposé par la figure 2.40. La modification du nombre de Stokes impacte directement l'entraînement des gouttes par la turbulence en aval du cylindre. Les rebonds sur le cylindre apparaissant pour des nombres de Stokes plus élevés vont conduire à deux phénomènes. Le premier est la quantité de fuel gazeux autour du cylindre, due aux

(a) 1_COMB : $St = 5.265 \cdot 10^{-2}$ (b) 2_COMB : $St = 5.265 \cdot 10^{-1}$ (c) 3_COMB : $St = 2.632$ FIG. 2.39: Taux de réaction instantané dans le domaine pour trois nombres de Stokes différents, $t = 12ms$.

collisions sur celui-ci. Cette quantité va être d'autant plus élevée que le nombre de Stokes le sera. Lorsque la limite d'inflammabilité sera dépassée, la flamme se décrochera (pour de fortes valeurs du nombre de Stokes). Le second est la densité de fuel liquide autour du sillage, qui va être plus importante lorsque les collisions commenceront à être effectives, pour ensuite diminuer à cause de l'éjection brutale des gouttes pour les nombres de Stokes les plus grands.

2.5.6 Conclusion

Les simulations effectuées ainsi que les comportements globaux de la ségrégation des gouttes ont permis d'étudier l'impact du nombre de Stokes sur la densité des gouttes dans le domaine. Cette étude a ensuite permis de prédire les zones de plus grande densité de fuel liquide, dues à la ségrégation dans le sillage du cylindre, ainsi qu'aux chocs en amont de celui-ci.

Ces gouttes une fois évaporées introduiront du fuel gazeux dans le domaine. La topologie du mélange va directement être modifiée par la densité locale de gouttes, donc du τ_p . Les conditions initiales du domaine étant identiques, seul le nombre de Stokes va induire une modification des

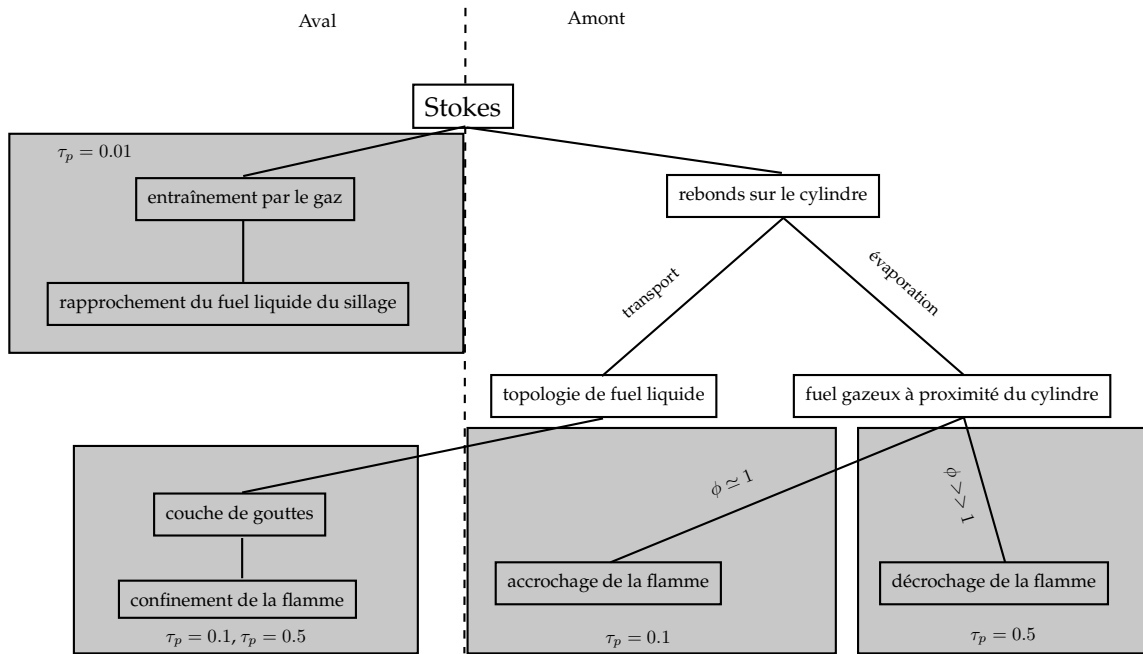


FIG. 2.40: Liens de causalité entre les différents phénomènes

phénomènes observés.

Finalement, une étude préliminaire sur les modes de combustion dans ce système a été effectuée, montrant l'impact de la balistique des gouttes sur l'accrochage de la flamme, ainsi que sur son mode de propagation dans le milieu. Une étude complète pourra aussi être envisagée dans le cadre de l'analyse de la stabilité de flammes dans les dispositifs expérimentaux ou industriels. Une meilleure prise en compte de l'impact des gouttes sur le cylindre sera néanmoins nécessaire.

D'autres paramètres méritent d'être étudiés, par exemple la richesse de fuel liquide en entrée, ainsi que le temps caractéristique d'évaporation des gouttes.

Chapitre 3

Combustion laminaire

En science, la phrase la plus excitante que l'on peut entendre, celle qui annonce des nouvelles découvertes, ce n'est pas "Eureka" mais "Tiens, c'est marrant".

Douglas Adams

3.1 Introduction

L'augmentation des performances informatiques a permis depuis quelques décennies l'extension de l'utilisation de la DNS. En effet, malgré la puissance de calcul nécessaire pour ce type de simulation, cette méthode devient de plus en plus utilisée car elle ne contient pas d'approximations dues à la présence de termes de sous-maille, comme c'est le cas en LES.

Les premières simulations DNS ont été dédiées à la simulation d'écoulements inertes [63, 64]. Elles ont depuis été adaptées afin de permettre la simulation de fluides réactifs purement gazeux [65, 66, 67, 68, 3]. Parallèlement, la simulation de particules dispersées en milieu turbulent a été étudiée [69, 70, 71, 72, 73, 74]. La formulation utilisée pour ce type de simulation a été étendue afin de permettre la prise en compte de gouttes s'évaporant [75, 76, 77, 78, 62]. De nombreuses études ont ainsi permis la caractérisation de la topologie de mélange en fonction des paramètres spécifiques des gouttes.

Néanmoins, très peu d'études portent sur la simulation DNS de combustion en présence d'une phase dispersée [79, 80, 81, 82]. En effet, l'impact de cette phase sur les flammes en présence de gouttes est complexe, et a nécessité plusieurs caractérisations. Plusieurs modes de combustion ont ainsi été définis en milieu diphasique. Ces modes sont présentés sur le graphique 3.1, créé par Chiu *et al.* [83, 84, 85, 86].

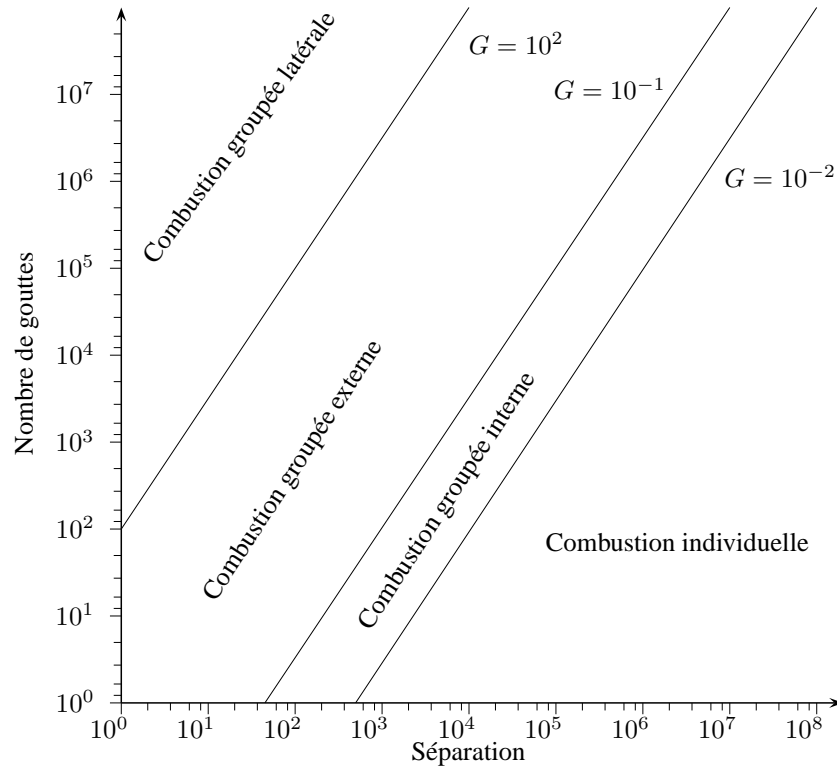


FIG. 3.1: Modes de combustion de gouttes en fonction de leur nombre et de leur séparation.

La séparation est définie comme $S = \delta_s / \delta_{r,fl}$, avec δ_s la distance moyenne inter-goutte et $\delta_{r,fl}$ un rayon caractéristique de la flamme de diffusion [87]. La transition d'un régime à l'autre se caractérise par le nombre de groupe, noté G , qui se résume par la relation $G \simeq 5N^{2/3}S^{-1}$ [88] lorsque le nombre de Péclet est grand. Dès lors, les flammes peuvent adopter quatre comportements distincts selon le nombre de groupe (figure 3.2).

- **La combustion groupée latérale** se produit pour des valeurs de $G \gg 1$. Cela revient à considérer des paquets de gouttes très denses (nombre de gouttes dans le nuage N très grand et distance moyenne inter-goutte S très petit). Dans ce cas, la densité locale de liquide est telle que la richesse gazeuse après évaporation sera trop importante pour qu'une combustion puisse y avoir lieu. De plus, la quantité de fuel gazeux atteindra très rapidement un état de saturation, ce qui ralentira grandement l'évaporation des gouttes. Dans ce cas, le fuel évaporé en grande quantité va diffuser dans l'oxydant qui l'entoure, ce qui va donner lieu à une flamme de diffusion, comme représenté sur la figure 3.2.
- **La combustion groupée externe** apparaît pour des valeurs de $G > 1$, modérées. Comme pour le cas précédent, la densité de fuel liquide est très importante, et une fois les gouttes évaporées, la richesse gazeuse atteint la zone de non-inflammabilité de la flamme. Néanmoins, cette quantité de fuel gazeux n'atteint pas la saturation. Dans ce cas, les

gouttes peuvent librement s'évaporer. La flamme reste néanmoins au pourtour du groupe de gouttes, brûlant par diffusion le fuel gazeux dégagé.

- **La combustion groupée interne** pour des valeurs de $G < 1$. Les gouttes sont suffisamment espacées pour qu'elles puissent brûler individuellement. La flamme va donc traverser une partie du nuage, laissant quelques gouttes brûler. Cette flamme va entourer le noyau du nuage de gouttes. De part la chaleur qui lui est transmise, cela va permettre l'évaporation des gouttes se trouvant à l'intérieur.
- **La combustion individuelle** pour des valeurs de $G \ll 1$. Comme précédemment, les gouttes sont très espacées, elles vont donc brûler indépendamment. Il n'existe pas de zone où la richesse liquide est trop importante pour maintenir la flamme à distance du noyau de gouttes. Elle va donc traverser le nuage, en brûlant une partie du fuel gazeux évaporé, laissant derrière elle des gouttes, chacune entourée d'une flamme de diffusion.

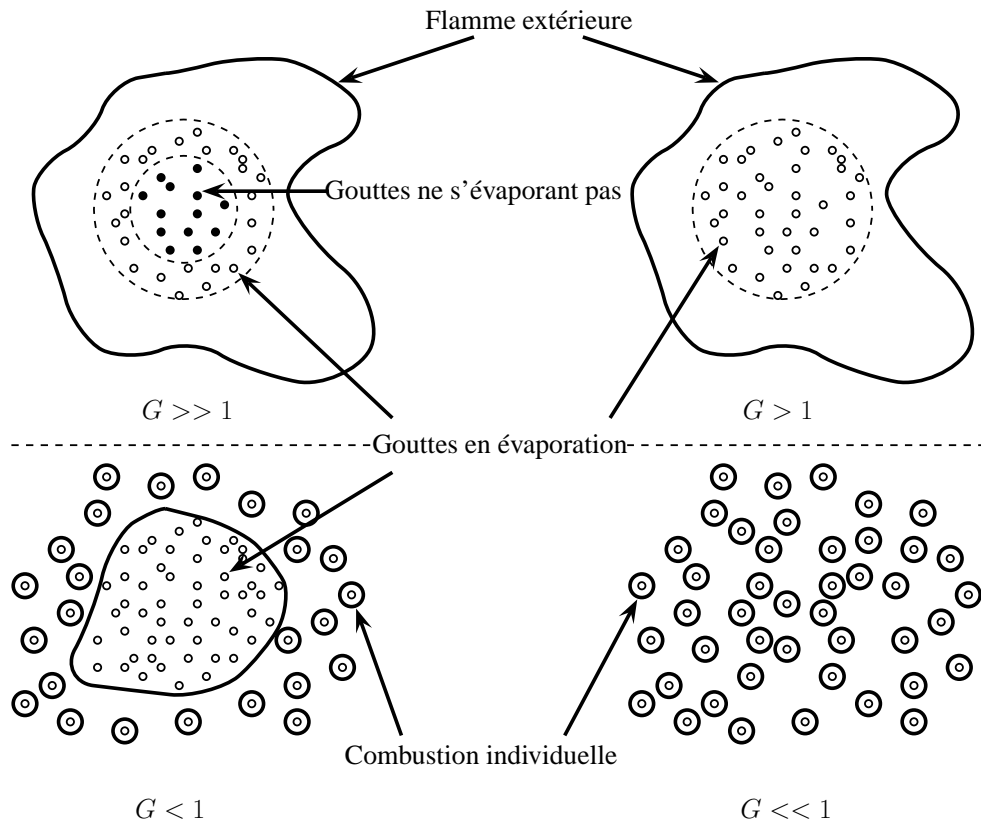


FIG. 3.2: Modes de combustion de gouttes en fonction de leur nombre de groupe G .

Cependant, la densité de gouttes et leur espacement (donc leur nombre de groupe G), ne suffit pas à définir ces régimes de combustion. En effet, le temps caractéristique d'évaporation est un paramètre pouvant aussi impacter sur le mode de propagation de la flamme. Afin de déterminer cet impact, deux nombres caractéristiques ont été utilisés [87]. Le premier est le

temps caractéristique de la flamme, défini par $t_{fl} = \delta_{fl}/S_l$, avec δ_{fl} l'épaisseur de flamme et S_l sa vitesse, et le temps caractéristique d'évaporation τ_v , défini par l'équation 2.32. Dans le cas où $\tau_v \ll \tau_{fl}$, les gouttes vont s'évaporer très rapidement, ce qui va donner lieu à un mélange carburant + comburant qui va ensuite brûler. La zone d'évaporation sera d'autant plus éloignée de la flamme que τ_v est faible (car cela augmentera la sensibilité de l'évaporation à la température). Le mélange résultant de cette évaporation est donc quasi-homogène, la flamme s'y propagera en régime prémélangé (figure 3.3a). Si τ_v et τ_{fl} sont du même ordre, alors deux scénarii peuvent exister. Le premier apparaît lorsque la séparation S est suffisamment faible pour que ces gouttes puissent atteindre, voire traverser, la flamme. La répartition du fuel gazeux étant beaucoup plus diffuse dans ce cas, la flamme va devenir une flamme épaissie, comme représenté sur la figure 3.3b. Le second scénario apparaît lorsque S augmente, le régime passera d'un régime de combustion de groupe à un régime de percolation, puis de combustion en poches. Ces régimes ont été répertoriés par Borghi [89], et sont représentés sur les figures 3.4 et 3.5. Les gouttes ayant traversé le front de flamme vont continuer à s'évaporer, pour donner lieu à une seconde flamme placée en retrait de la première, aussi nommée back-flame, comme représenté sur la figure 3.3c.

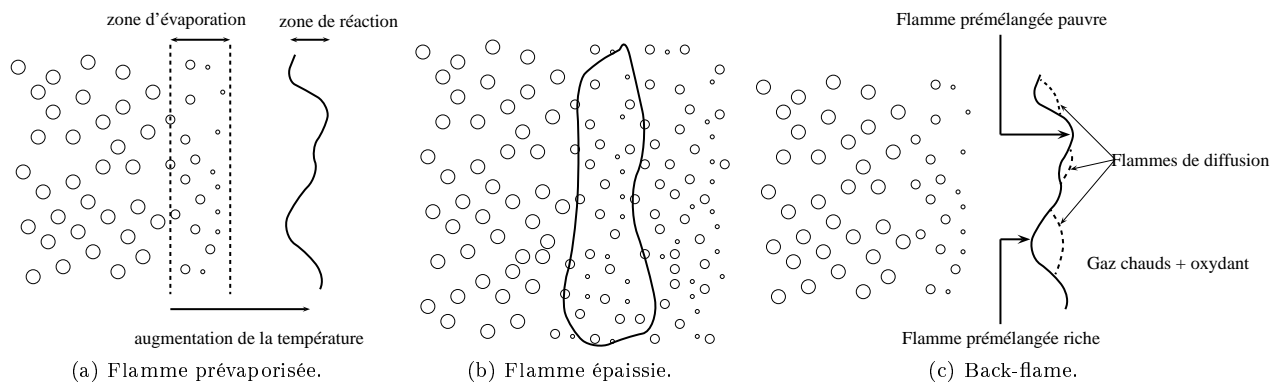


FIG. 3.3: Structures de flammes laminaires diphasiques.

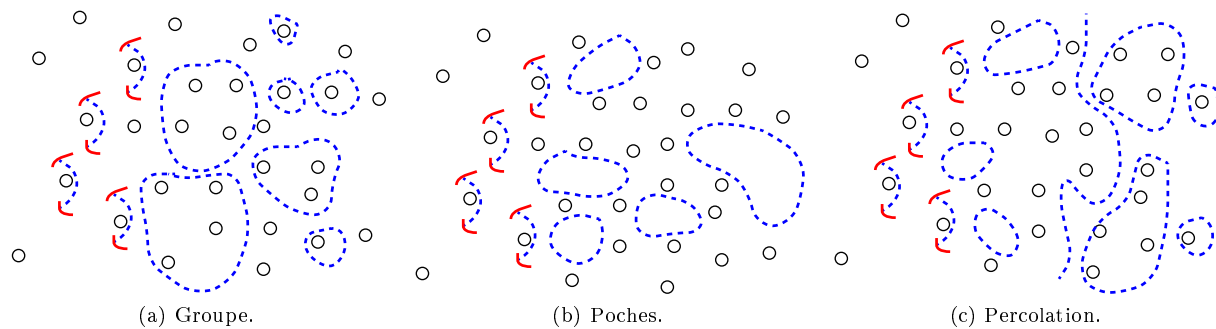
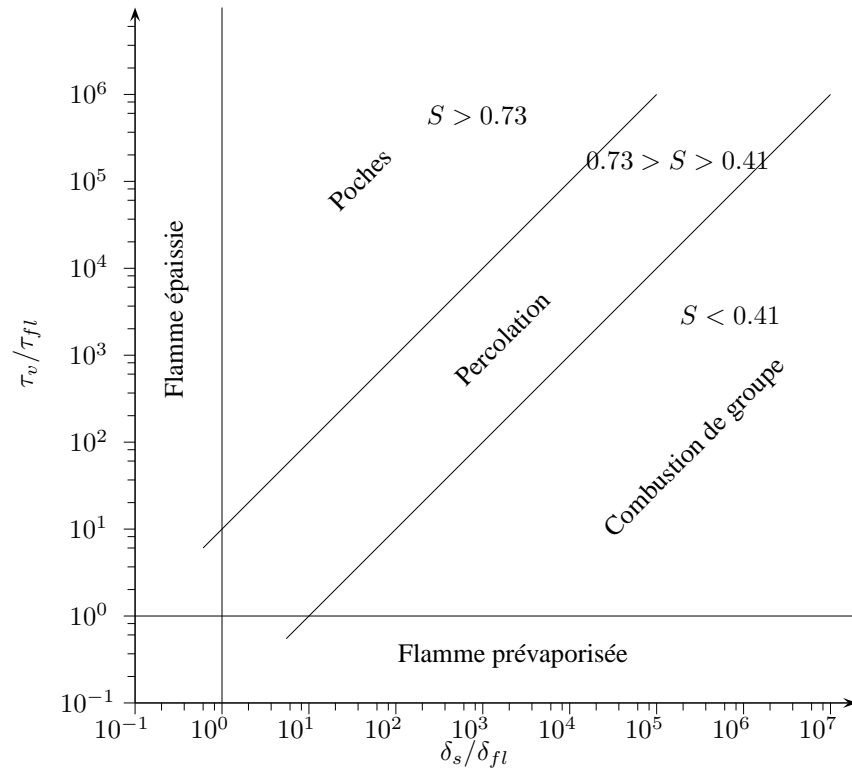


FIG. 3.4: Structures de flammes laminaires diphasiques dans un spray de gouttes au repos. Lignes rouges : flamme prémélangée, tirets bleus : flamme de diffusion.


 FIG. 3.5: Modes de combustion de gouttes en fonction de leur nombre de groupe G .

Enfin, un dernier paramètre est à considérer : la richesse liquide liée aux gouttes en présence. En effet, la richesse est un paramètre majeur dans la mesure où elle nous permettra de savoir dans quel régime la combustion a lieu (pauvre ou riche). Pour une richesse liquide très élevée par exemple, il sera d'autant plus facile de maintenir la flamme loin du noyau et d'avoir une flamme de diffusion que dans le cas d'une richesse pauvre, où une flamme épaissie aura plus de facilité à se développer. Ces différents régimes en fonction de la richesse, dans le cas d'un jet turbulent diphasique, ont été catalogués par Réveillon *et al.* [81, 43]. Ces régimes sont représentés par la figure 3.6.

3.2 Flamme 1D de référence

Les études que nous réaliserons sur le comportement des flammes laminares en milieu diphasique nécessitent de définir les caractéristiques de référence de ces flammes. En premier lieu, une flamme monophasique 1D stoechiométrique a été simulée pour du *N – heptane* gazeux à la stoechiométrie. La chimie utilisée est le KGTKAS décrit dans le paragraphe 2.4.3.2 (page 70).

Les coefficients stoechiométriques du fuel et de l'oxydant sont respectivement $\nu_F = 0.0625$ et $\nu_O = 0.9375$, ce qui correspond à un rapport classique fuel/air de 1/15. On a $\nu_P = \nu_F + \nu_O$. Les

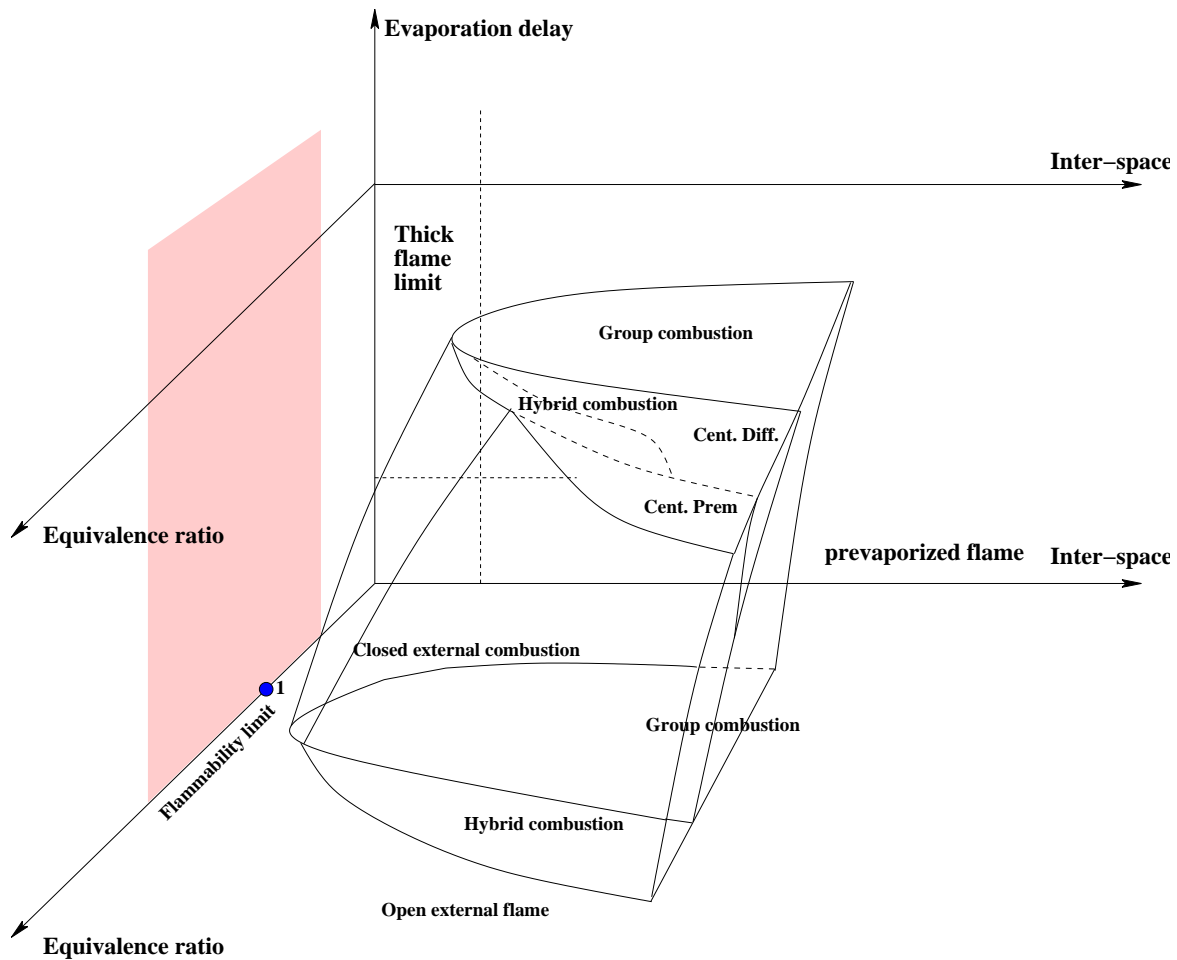


FIG. 3.6: Modes de combustion de gouttes en fonction de leur nombre, de leur séparation et de la richesse.

coefficients α et β que nous avons pris sont $\alpha = 0.8$ et $\beta = 8$, valeurs habituellement utilisées [3].

Les paramètres de normalisation du domaine sont résumés dans le tableau 3.1. Le domaine utilisé pour cette flamme de référence a une longueur de 3.159 mm , le mélange est injecté à la vitesse de flamme (0.427 m.s^{-1}) et à une température de 298.15 K .

Deux flammes de référence ont ainsi été simulées, une en flamme chaude et l'autre en flamme dite "froide". Cette dernière ayant un dégagement de chaleur nul, la température du domaine restera constante et égale à T_0 . Afin de permettre une chimie fonctionnelle dans ce cas, l'utilisation d'une température virtuelle est nécessaire. Celle-ci dépend linéairement de la fraction massique des gaz brûlés. L'estimation de cette température est donnée par l'équation 3.1 :

$$T_{virt} = T_0 + \frac{\alpha}{1 - \alpha} Y_{GB} , \quad (3.1)$$

Normalisations	
grandeur	physique (SI)
L_0	$3.15928 \cdot 10^{-3} m$
U_0	$5 m \cdot s^{-1}$
t_0	$6.3186 \cdot 10^{-4} s$
T_0	$298.15 K$

TAB. 3.1: Récapitulatif des paramètres de normalisation du code

avec Y_{GB} la fraction massique de gaz brûlé. Dans ce cas, afin de garder une température de domaine constante, on définit l'enthalpie de formation des gaz brûlés $h_{0,GB}$ de sorte que $\sum_k h_{0,k} = 0$.

Le taux de réaction, ainsi que la température sont représentés par la figure 3.7a pour la flamme froide et 3.7b pour la flamme chaude. Les fractions massiques du fuel, de l'oxydant et des gaz brûlés sont représentées sur la figure 3.8a pour la flamme froide et 3.8b pour la flamme chaude. Le temps caractéristique de la flamme est défini de sorte que $t_{fl} = \delta_{fl}/U_{fl}$. Enfin, l'épaisseur de flamme est définie par la relation 3.2 alors que toutes les autres caractéristiques de ces deux flammes sont répertoriées dans le tableau 3.2.

$$\delta_{fl} = \frac{T_b - T_u}{\max\left(\frac{\partial T}{\partial x}\right)} \quad (3.2)$$

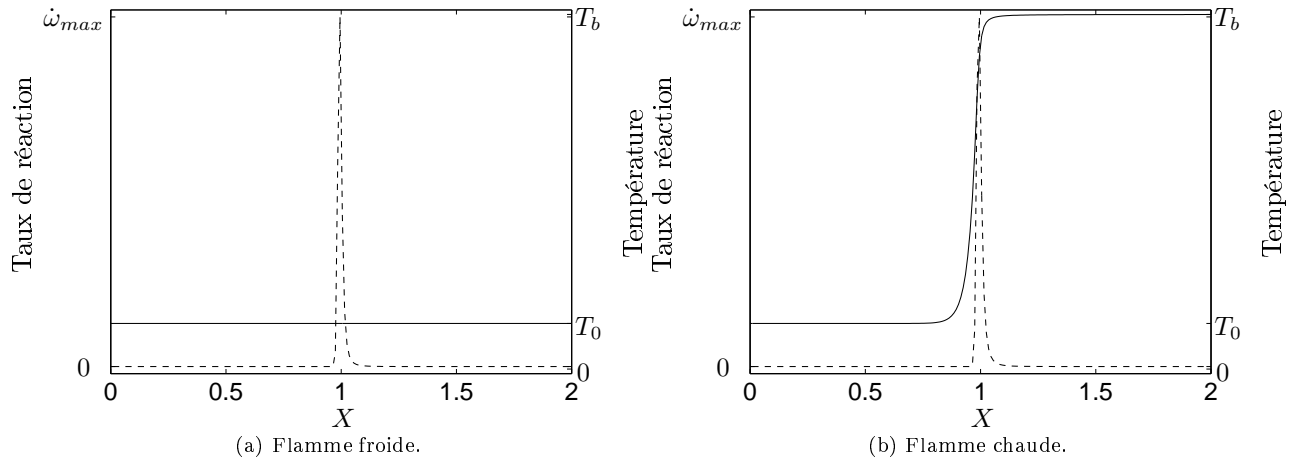


FIG. 3.7: Profils de taux de réaction (- -) et de température (-) des flammes chaudes et froides de référence.

Nous constatons que la vitesse de flamme, ainsi que son épaisseur sont très proches dans le cas de la flamme chaude et de la flamme froide.

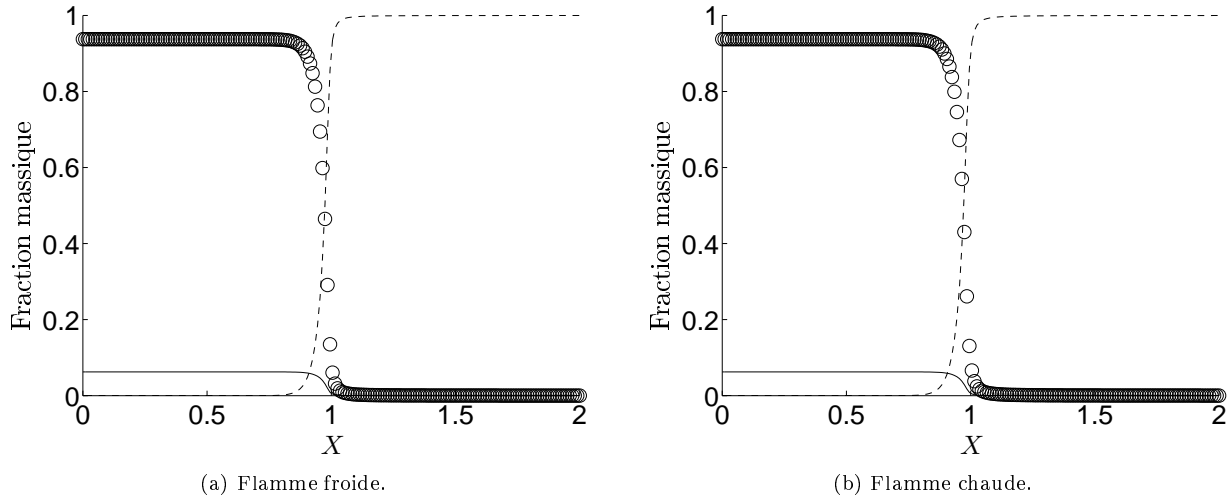


FIG. 3.8: Profils de la fraction massique de fuel (—), d'oxydant (○) et de gaz brûlés (- -) des flammes chaudes et froides de référence.

Flamme chaude		
grandeur	code	physique (SI)
U_{fl}	$8.5319 \cdot 10^{-2}$	$0.4266 m \cdot s^{-1}$
δ_{fl}	$2.8957 \cdot 10^{-2}$	$9.1483 \cdot 10^{-5} m$
T_b	5	$1490.75 K$
τ_{fl}	0.3394	$2.1445 \cdot 10^{-4} s$
$max(\dot{\omega}_r)$	24.8813	
$\sum \dot{\omega}_r$	73.0354	
Flamme froide		
U_{fl}	$8.5094 \cdot 10^{-2}$	$0.4255 m \cdot s^{-1}$
δ_{fl}	$2.9422 \cdot 10^{-2}$	$9.2952 \cdot 10^{-5} m$
T_b	1	$298.15 K$
τ_{fl}	0.3458	$2.1847 \cdot 10^{-4} s$
$max(\dot{\omega}_r)$	6.7334	
$\sum \dot{\omega}_r$	16.9329	

TAB. 3.2: Récapitulatif des caractéristiques des deux flammes de référence.

3.3 Caractérisation de flammes 1D diphasiques

3.3.1 Etat de l'art

L'évolution continue des transports terrestres et aériens nécessite de grandes quantités d'énergie. Le carburant embarqué est généralement sous forme liquide, permettant ainsi le stockage d'une grande quantité d'énergie dans un faible volume. Cependant, ce carburant doit être atomisé puis vaporisé afin de pouvoir être brûlé. Cette vaporisation implique la co-existence d'un liquide et d'un gaz dans les chambres de combustion. Lors de la combustion de ce carburant, une flamme se forme et peut interagir avec la phase liquide encore présente. Cette interaction

peut induire une instabilité de la flamme ainsi qu'une modification de ses propriétés, dont sa vitesse de propagation. Ce phénomène connu est étudié expérimentalement depuis les années 1950 (Burgogne et Cohen [90]). Ces instabilités de flammes étant à l'origine d'une pollution accrue ainsi que d'une diminution du rendement et de la baisse de la durée de vie du moteur, il est nécessaire de les comprendre et de les contrôler. Ce sont principalement pour ces raisons qu'un grand nombre d'études se sont tournées sur l'origine et la compréhension de ces instabilités. Leurs causes sont multiples, et chacune nécessite une étude particulière. Parmi celles-ci, citons principalement la différence de la diffusion des espèces et de la chaleur, la présence d'ondes acoustiques et leurs interactions avec la réaction chimique ainsi que l'interaction entre l'évaporation des gouttes présentes et la flamme. Une étude théorique a été effectuée par Lin sur ces instabilités [91, 92].

La vitesse de flamme étant grandement affectée par la présence de ces gouttes, plusieurs recherches ont été effectuées afin de caractériser l'impact de leur présence sur sa vitesse de propagation. Citons Greenberg [93] qui étudia l'impact du taux de charge des gouttes sur la vitesse de flamme. Il montra ainsi que dans un régime pauvre, une augmentation du taux de charge induit une diminution de la vitesse de flamme, ce qui n'est pas forcément le cas d'un mélange riche. De même, Atzler [94] a développé une méthode d'analyse expérimentale de mesure de la vitesse de flamme dans un brouillard de gouttes. Goldfarb [95] a montré que ce problème pouvait être décomposé en deux problèmes plus précis, chacun dépendant des temps caractéristiques liés aux gouttes. Une étude numérique portant sur l'influence du nombre de Stokes des gouttes sur la vitesse de flamme en milieu turbulent a été effectuée par Réveillon en 2007 [96]. De même, Greenberg [97] a développé une relation permettant de calculer la vitesse moyenne de flamme en milieu polydispersé, en fonction du diamètre moyen des gouttes présentes.

Dans la continuité de ces études, nous proposons ici une étude de ces régimes de combustion, en fonction des paramètres intrinsèques aux gouttes dans un milieu dilatable et en fonction de la richesse liquide ainsi que du temps caractéristique d'évaporation.

3.3.2 Configuration numérique

Les flammes 1D diphasiques ont beaucoup été étudiées. En effet, ce type de configuration permet d'étudier l'influence de la présence de gouttes sur le régime de flamme. Afin de restreindre l'étude à des phénomènes les plus élémentaires possibles, les gouttes seront fixées dans le domaine afin que leur déplacement n'induisse pas d'interaction flamme/gouttes supplémen-

taires. On détermine à l'avance le rayon des gouttes de sorte que le spray initial soit mono-disperse. Dans ce cas, la seule interaction possible sera celle du taux d'évaporation sur le taux de réaction.

Les paramètres modifiables dans ce cas sont la richesse liquide ainsi que le temps caractéristique d'évaporation des gouttes τ_v . Afin d'effectuer une étude plus générale, les analyses seront faites en fonction de τ_v/τ_{fl} ($\tau_{fl} = 2.14 \cdot 10^{-4} s$).

Les gouttes sont uniformément disposées dans le domaine (figure 3.9).

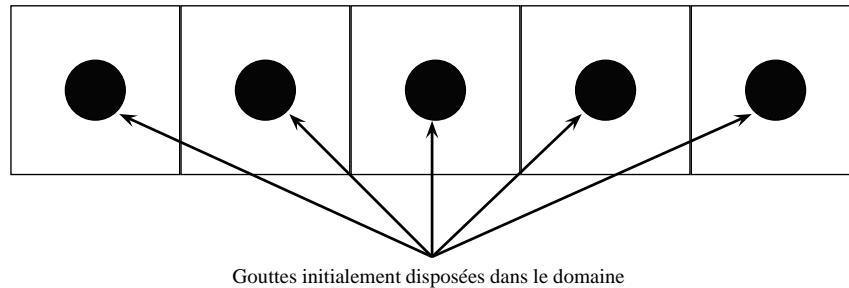


FIG. 3.9: Répartition initiale des gouttes dans le domaine

Cette étude portera sur la caractérisation d'une flamme diphasique en fonction de τ_v/τ_{fl} et de la richesse, dans le cas d'une flamme chaude et d'une flamme "froide". La configuration du domaine utilisé est représentée par la figure 3.10. La longueur du domaine est de $L_x = 10$ et comporte $N_x = 2000$ mailles. Les gouttes sont du C_7H_{16} (n-heptane). La loi d'évaporation des gouttes est une loi en $By(T)$ (IAT), décrite dans la section 2.3.1.3. La chimie utilisée ici est le KGKAS, décrit dans la section 2.4.3.2.

Le domaine 1D est rempli de gouttes, à raison d'une goutte par maille, comme montré sur la figure 3.9.

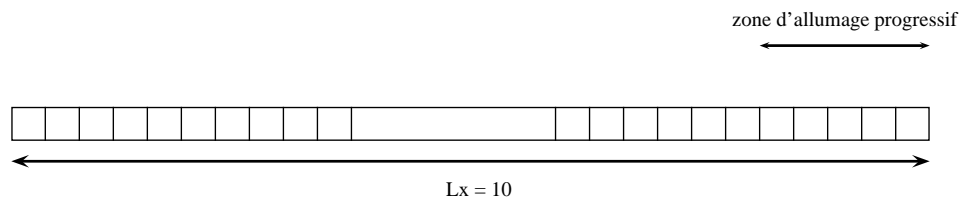


FIG. 3.10: Configuration du domaine

On effectue un allumage progressif par augmentation lente de la température en fin de domaine. Il apparaît une flamme qui va commencer à se propager vers les gouttes. Une fois que cette flamme effectue une propagation stationnaire, loin du point d'allumage, nous analysons ses propriétés, telles que la vitesse de flamme, la distance entre le front d'évaporation et le front

de flamme, ainsi que le taux de réaction.

Les grandeurs observées sont normalisées de la manière suivante. Le taux de réaction $\dot{\omega}$ dans le domaine est normalisé par la valeur maximale du taux de réaction de la flamme stoechiométrique gazeuse de référence correspondante : $\dot{\omega}^{norm} = \dot{\omega}/\dot{\omega}^{st}$. La température T est normalisée par la température de flamme stoechiométrique, de sorte que $T^{norm} = (T - T_0)/(T_b - T_0)$. Les distances (D et l'abscisse) sont normalisées par l'épaisseur de flamme stoechiométrique gazeuse de référence correspondante : $D^{norm} = D/\delta_{fl}$ et $x^{norm} = x/\delta_{fl}$. Le taux d'évaporation quant à lui est exprimé en unité arbitraire. Et enfin, la fraction massique de fuel Y_f est normalisée par sa valeur à la stoechiométrie $Y_f^{st} = 0.0625$: $Y_f^{norm} = Y_f/Y_f^{st}$. La vitesse de flamme est normalisée par rapport à la vitesse gazeuse à la stoechiométrie : $V^{norm} = V/V^{st}$ et le temps caractéristique d'évaporation τ_v est normalisé par le temps caractéristique de la chimie $\tau_v^{norm} = \tau_v/\tau_{fl}$. Les caractéristiques de la flamme à la stoechiométrie ($\dot{\omega}^{st}, V^{st}, T_b$) sont données dans le chapitre précédent (chapitre 3.2).

Enfin, dans un but de caractérisation de régime de combustion, il est nécessaire d'introduire la fraction de mélange

$$Z = \frac{\frac{\nu_O W_O}{\nu_F W_F} Y_F - Y_O + 1}{1 + \frac{\nu_O W_O}{\nu_F W_F}}, \quad (3.3)$$

ainsi que la richesse :

$$\Phi = \frac{\nu_O W_O}{\nu_F W_F} \frac{Z}{1 - Z}. \quad (3.4)$$

Ces deux grandeurs sont constantes à travers une flamme gazeuse prémélangée.

3.3.3 Résultats numériques

Le paramètre variable τ_v/τ_{fl} varie entre 0.0294 et 5.89. La richesse évolue entre 0.6 et 1.4. 10 000 simulations ont été effectuées en faisant varier linéairement ces deux paramètres.

La vitesse de flamme en fonction de ces deux paramètres est tracée sur la figure 3.11. Nous constatons que pour un τ_v très faible, la vitesse de flamme est celle de la flamme gazeuse. En effet, dans ce cas nous sommes en régime purement prémélangé. Puis, lorsque τ_v augmente ($\tau_v/\tau_{fl} \simeq 2$), on constate une augmentation de la vitesse de flamme pour des richesses élevées. Enfin, lorsque τ_v est très grand, la vitesse de flamme diminue et devient quasi-linéairement dépendante de la richesse.

La distance moyenne entre le front de flamme et le front d'évaporation, notée D , est tracée sur la figure 3.12. Deux phénomènes apparaissent sur cette figure. Le premier est que, pour des τ_v suffisamment élevés, D est très faible. Le second apparaît dans le cas d'un τ_v très faible.

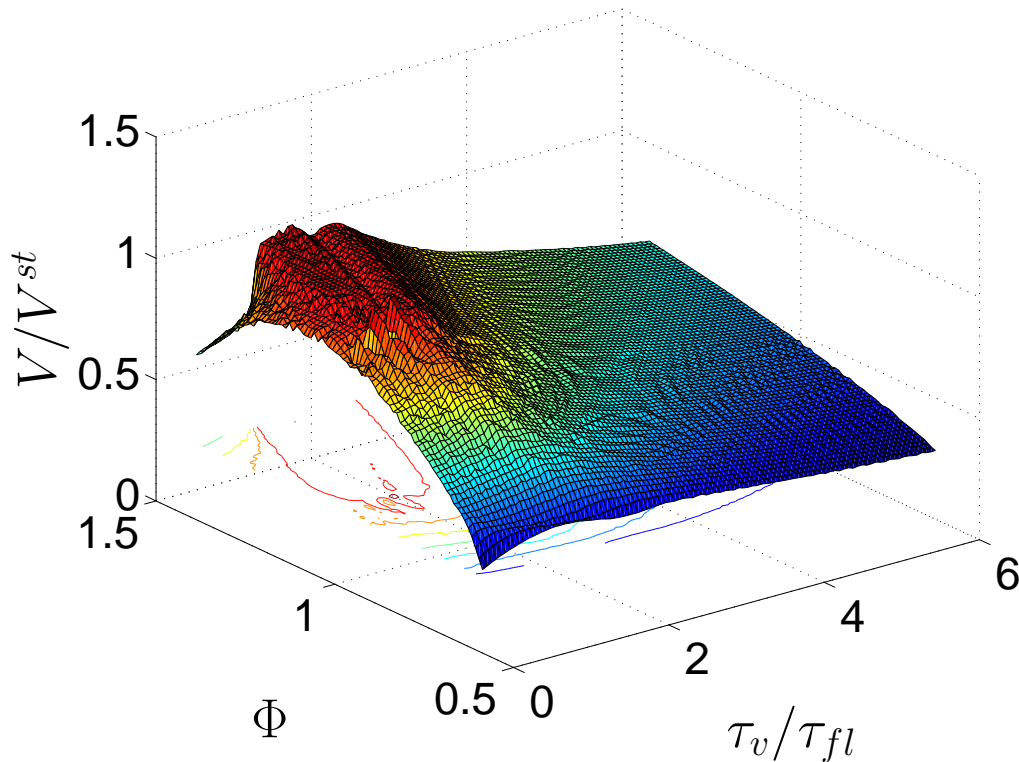


FIG. 3.11: Vitesse moyenne de la flamme 1D diphasique chaude en fonction de τ_v/τ_{fl} et de Φ .

Dans ce cas, D augmente de manière significative dans le cas d'une richesse très pauvre ou très riche.

Afin de comprendre plus en détail les paramètres physiques en jeu, trois coupes de ces graphiques ont été effectuées aux endroits les plus représentatifs ($\tau_v/\tau_{fl} \in \{0.0294, 1, 5.59\}$). Les coupes concernant la vitesses sont tracées sur la figure 3.14a, celles concernant la distance entre le front d'évaporation et le front de flamme sont tracées sur la figure 3.14b. Aucune coupe sur le taux de réaction total n'a été effectuée, celui-ci étant proportionnel à la vitesse de flamme.

Concernant les coupes de vitesses de flamme en fonction de Φ pour trois τ_v/τ_{fl} distincts (figure 3.14a), nous pouvons les comparer à la vitesse de flamme gazeuse équivalente (représentée par la courbe noire). Nous observons bien les trois phénomènes décrits précédemment, à savoir une vitesse de flamme similaire à la vitesse de flamme gazeuse pour des τ_v/τ_{fl} très faibles, une augmentation de la vitesse de flamme par rapport à la vitesse de flamme gazeuse pour $\tau_v/\tau_{fl} = 1$ en milieu riche, puis une vitesse de flamme possédant une dépendance quasi-linéaire par rapport à la richesse pour les τ_v/τ_{fl} les plus élevés.

Afin de comprendre plus finement les phénomènes présents, plusieurs captures instantanées du taux de réaction, du taux d'évaporation, de la fraction massique de fuel, de la température

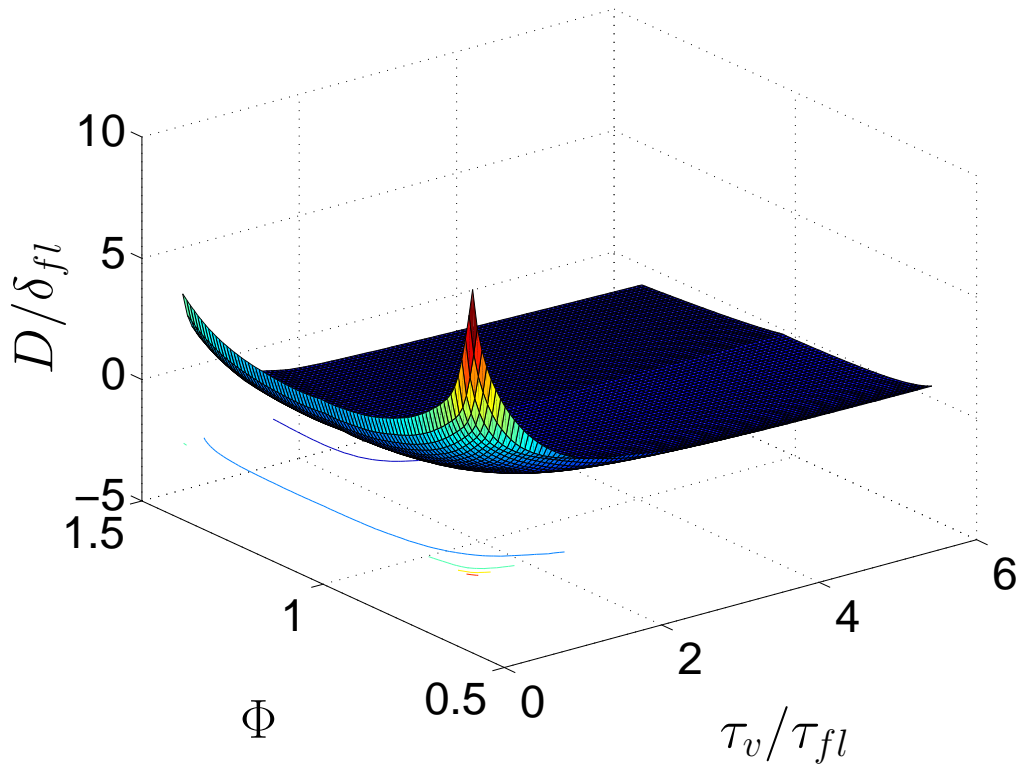


FIG. 3.12: Distance moyenne du front de flamme et du front d'évaporation des gouttes dans le cas de la flamme 1D diphasique chaude en fonction de τ_v/τ_{fl} et de Φ .

et des gouttes présentes ont été effectuées pour ces trois τ_v/τ_{fl} et pour chaque richesse $\Phi \in \{0.6, 1, 1.4\}$. Nous constatons tout d'abord que pour les τ_v/τ_{fl} les plus faibles (figures 3.15a, 3.15b et 3.15c), le front d'évaporation reste éloigné du front de flamme. De plus, pour les richesses les plus élevées ($\Phi = 1.4$: figures 3.15c, 3.15f et 3.15i), du fuel gazeux résiduel est présent dans les gaz brûlés, ce qui est normal étant donné que dans ces conditions, le fuel est en excès. Un autre phénomène remarquable est l'apparition d'un double pic de réaction pour les τ_v/τ_{fl} les plus élevés à la stoechiométrie et pour les flammes riches (figures 3.15h et 3.15i). Nous verrons que le premier pic est consécutif à une flamme de prémélange, le second à une flamme de diffusion.

Afin de caractériser la flamme dans chacun de ces cas, les graphiques donnant la température normalisée en fonction de la fraction massique de fuel normalisée nous permettent de suivre l'équilibre thermodynamique au travers de chaque flamme (figures 3.16). En effet, au travers de la flamme, – dans le cas d'un Lewis unitaire et à C_p et \mathcal{D} constants – chaque point peut être considéré comme étant à l'équilibre thermodynamique, c'est à dire $C_p T + h_0^F Y_F = \text{cste}$. C'est la courbe noire sur ces figures.

La présence de gouttes va introduire du fuel gazeux dans les gaz brûlés. Cela aura pour

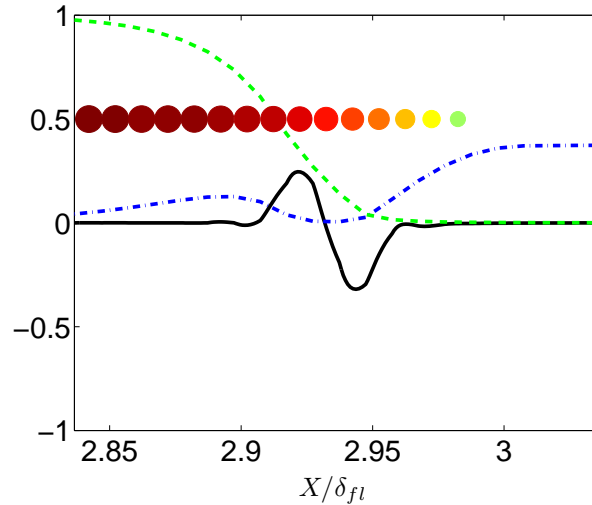


FIG. 3.13: Taux de réaction (ligne noire : positif pour le prémélange, négatif pour la diffusion), fraction massique de fuel normalisée (pointillés bleus) et fraction massique d'oxydant (pointillés verts).

effet de dévier de l'équilibre thermodynamique et d'entraîner la formation de structures de flammes que nous n'avons pas dans le cas monophasique. Nous pouvons par exemple voir un "retournement" de la courbe dans certains cas (figures 3.16f et 3.16i). Nous verrons que la présence d'une flamme de diffusion peut entraîner un tel retournement. C'est une condition nécessaire mais pas suffisante. Afin de corroborer les hypothèses effectuées sur la structure de la (ou des) flamme(s) présente(s), le taux de réaction en fonction du rapport d'équivalence Φ au travers de la flamme stabilisée a été tracé sur la figure 3.17. Pour les temps d'évaporation les plus faibles, on voit que Φ est constant à travers la flamme. Or, s'il y avait évaporation des gouttes près du front de flamme, le mélange s'en trouverait modifié, ce qui provoquerait un étalement du taux de réaction en fonction de Φ .

Finalement, afin d'avoir une idée plus précise sur les conditions nécessaires à la formation de ces flammes de diffusion, le taux de réaction dans les flammes de diffusion $\dot{\omega}_{diff}$ a été tracé en fonction de Φ et de τ_v/τ_{fl} sur le graphique 3.18. Nous voyons la présence d'une frontière concernant la richesse, ainsi que du rapport τ_v/τ_{fl} . Si la richesse est trop faible ou que le rapport τ_v/τ_{fl} est trop faible, alors il n'y a pas de flamme de diffusion.

Dans un but de compréhension des phénomènes présents, nous avons utilisé l'indice de Takeno [98] afin de distinguer les flammes de prémélange des flammes de diffusion. Le taux de réaction de la flamme de prémélange est noté $\dot{\omega}_{prem}$ et celui de la flamme de diffusion $\dot{\omega}_{diff}$. On a

$$\dot{\omega}^{norm} = \dot{\omega}_{prem}^{norm} + \dot{\omega}_{diff}^{norm}.$$

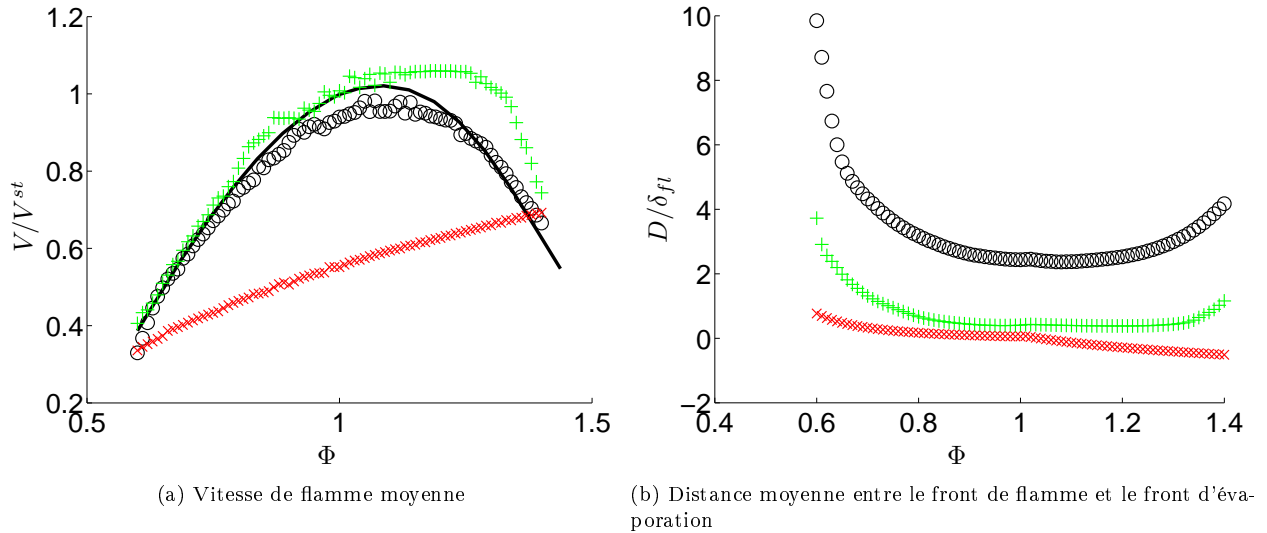


FIG. 3.14: Caractéristiques de la flamme 1D diphasique chaude en fonction de τ_v/τ_{fl} et de Φ . $\tau_v/\tau_{fl} = 5.59$ (\times), $\tau_v/\tau_{fl} = 1$ ($+$) et $\tau_v/\tau_{fl} = 0.0294$ (\circ). La ligne continue correspond à la flamme gazeuse 1D de référence

3.3.4 Exploitation des résultats

Dans un but de compréhension des phénomènes mis en jeu, l'impact du paramètre τ_v/τ_{fl} va être étudié dans les trois cas mis en avant auparavant.

Pour un τ_v/τ_{fl} très faible ($=0.0294$), étant donné que les gouttes vont s'évaporer dès que la température va commencer à augmenter à l'approche de la flamme, nous sommes dans un cas purement prévaporisé. Dans ce cas, les gouttes s'évaporent dans la zone de diffusion de la chaleur loin devant le front de flamme. Comme cette vaporisation sera très rapide, le mélange pourra s'homogénéiser avant l'approche de la flamme. Les fluctuations du mélange dues aux termes sources de fuel gazeux ne vont donc pas avoir d'impact sur la flamme. En effet, d'après le graphique 3.14b représentant la distance du front de flamme au front d'évaporation, nous voyons que celle-ci est relativement élevée vis à vis des autres configurations où τ_v/τ_{fl} est plus élevé, et-ce d'autant plus que l'on s'éloigne de la stoechiométrie. En effet, la vitesse de flamme étant maximale à la stoechiométrie, c'est à cette richesse que le front de flamme sera le plus proche de la zone de prévaporisation. Nous pouvons confirmer cette observation par les captures instantanées où l'on voit nettement que le front d'évaporation ($+$) est plus éloigné du front de flamme ($-$) à richesse $\Phi = 0.6$ (figure 3.15a) et $\Phi = 1.4$ (figure 3.15c) que dans le cas où $\Phi = 1$ (figure 3.15b). Nous observons sur ces mêmes graphiques que l'éloignement de ces deux fronts permet au fuel gazeux d'atteindre la même fraction massique gazeuse que celle qu'elle devrait avoir dans le cas des flammes purement gazeuses équivalentes. Cela entraîne la constance de Φ

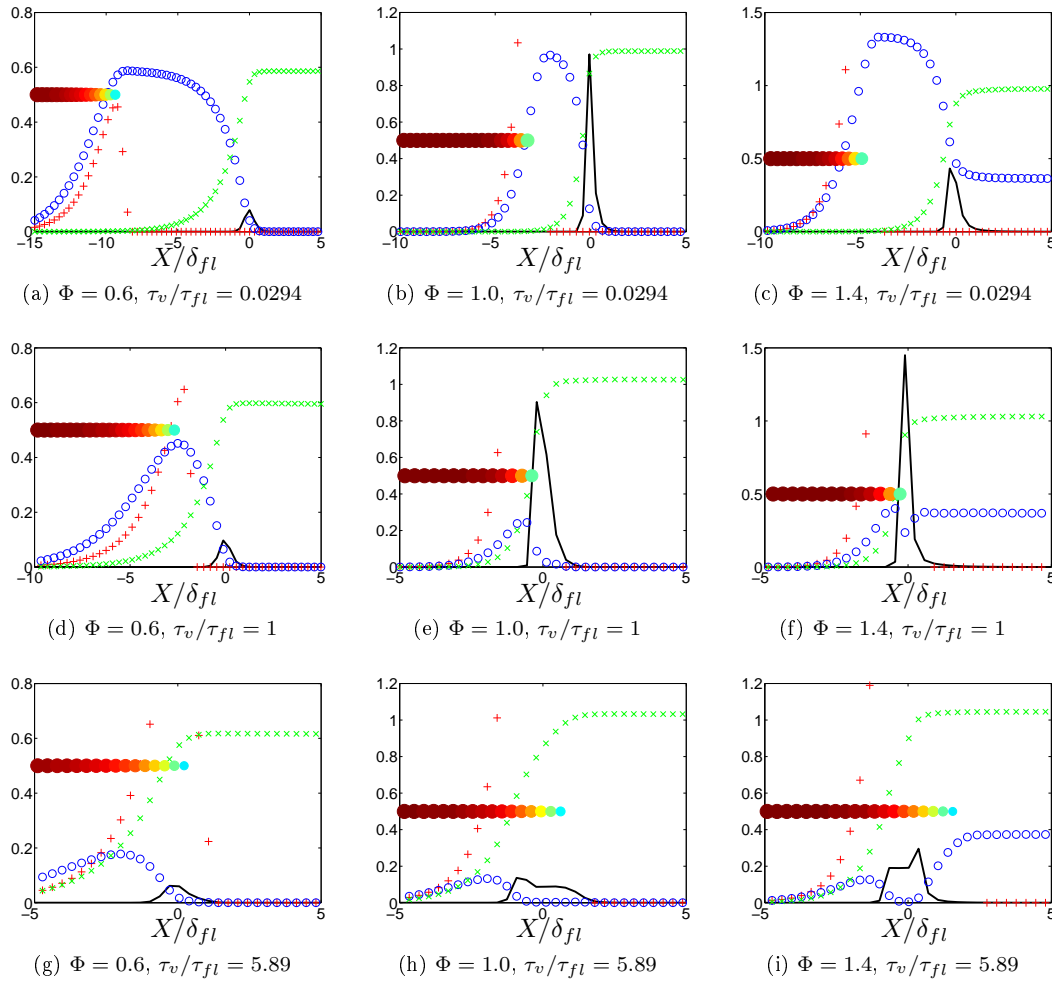


FIG. 3.15: Captures instantanées du taux de réaction normalisé (—), de la température normalisée (\times), de la fraction massique de fuel normalisée (\circ), du taux d'évaporation en grandeur arbitraire ($+$) et des gouttes. $\tau_v/\tau_{fl} = 0.0294$: (a),(b),(c) ; $\tau_v/\tau_{fl} = 1.0$: (d),(e),(f) et $\tau_v/\tau_{fl} = 5.89$: (g),(h),(i) ; pour $\Phi = 0.6$: (a), (d), (g) ; $\Phi = 1.0$: (b), (e), (h) et $\Phi = 1.4$: (c), (f), (i)

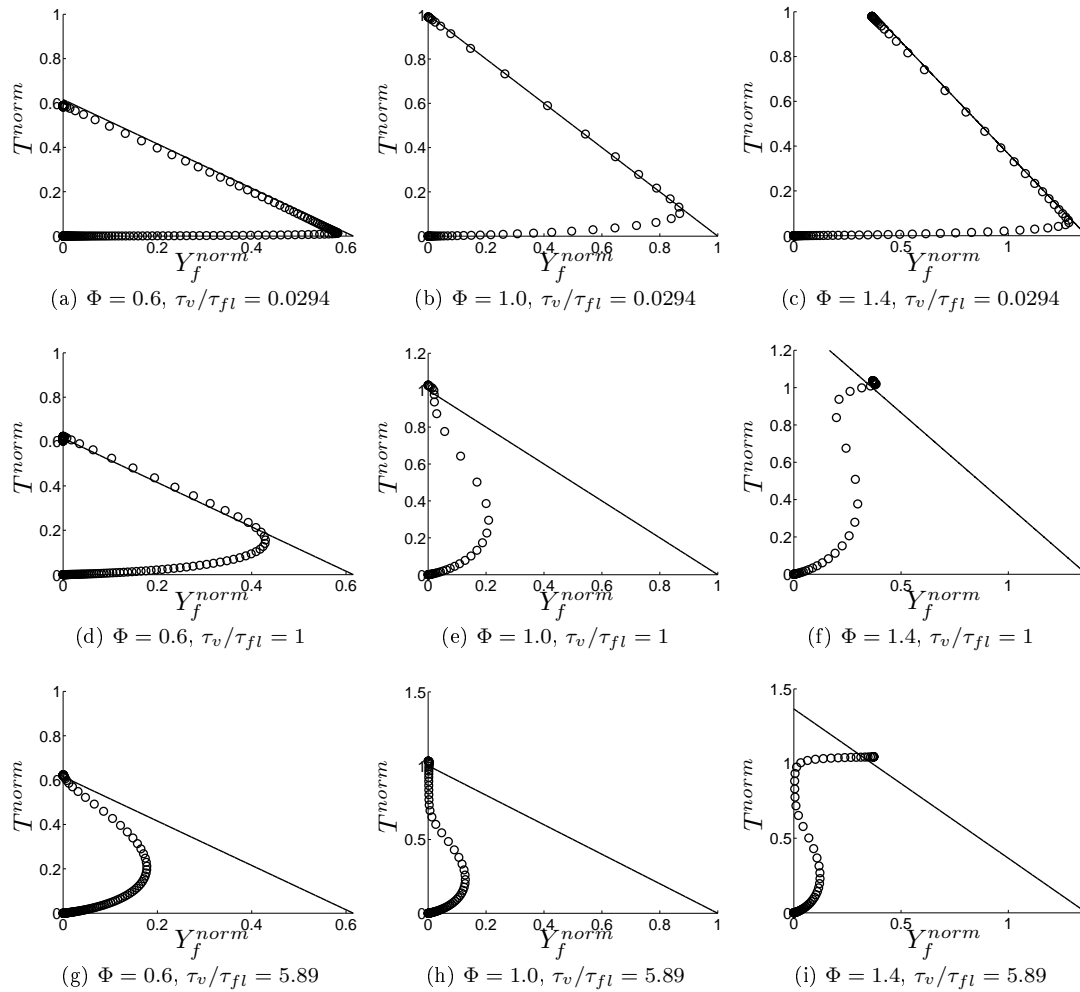


FIG. 3.16: Equilibre thermodynamique (—) et équilibre local (○). $\tau_v/\tau_{fl} = 0.0294$: (a),(b),(c) ; $\tau_v/\tau_{fl} = 1.0$: (d),(e),(f) et $\tau_v/\tau_{fl} = 5.89$: (g),(h),(i) ; pour $\Phi = 0.6$: (a), (d), (g) ; $\Phi = 1.0$: (b), (e), (h) et $\Phi = 1.4$: (c), (f), (i)

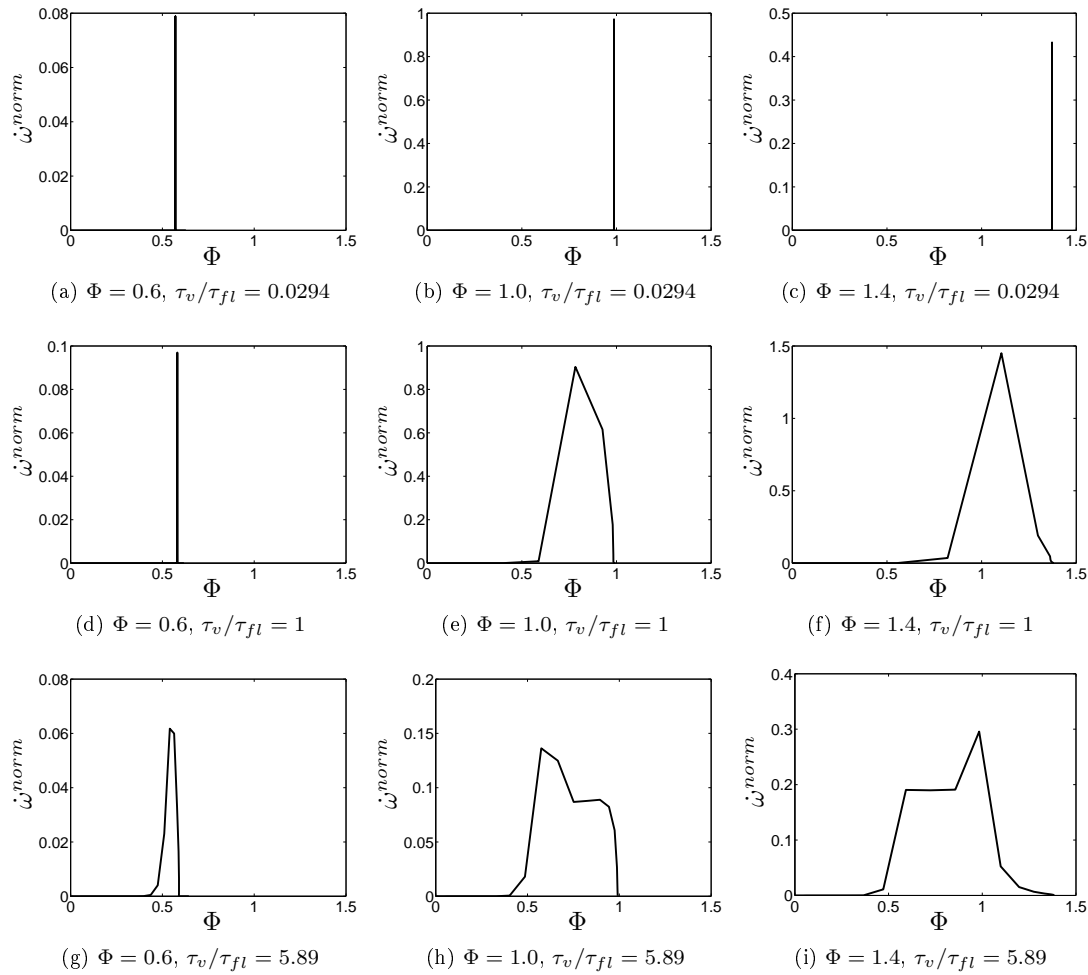


FIG. 3.17: Taux de réaction en fonction de la variable de mélange. $\tau_v/\tau_{fl} = 0.0294$: (a),(b),(c); $\tau_v/\tau_{fl} = 1.0$: (d),(e),(f) et $\tau_v/\tau_{fl} = 5.89$: (g),(h),(i); pour $\Phi = 0.6$: (a), (d), (g); $\Phi = 1.0$: (b), (e), (h) et $\Phi = 1.4$: (c), (f), (i)

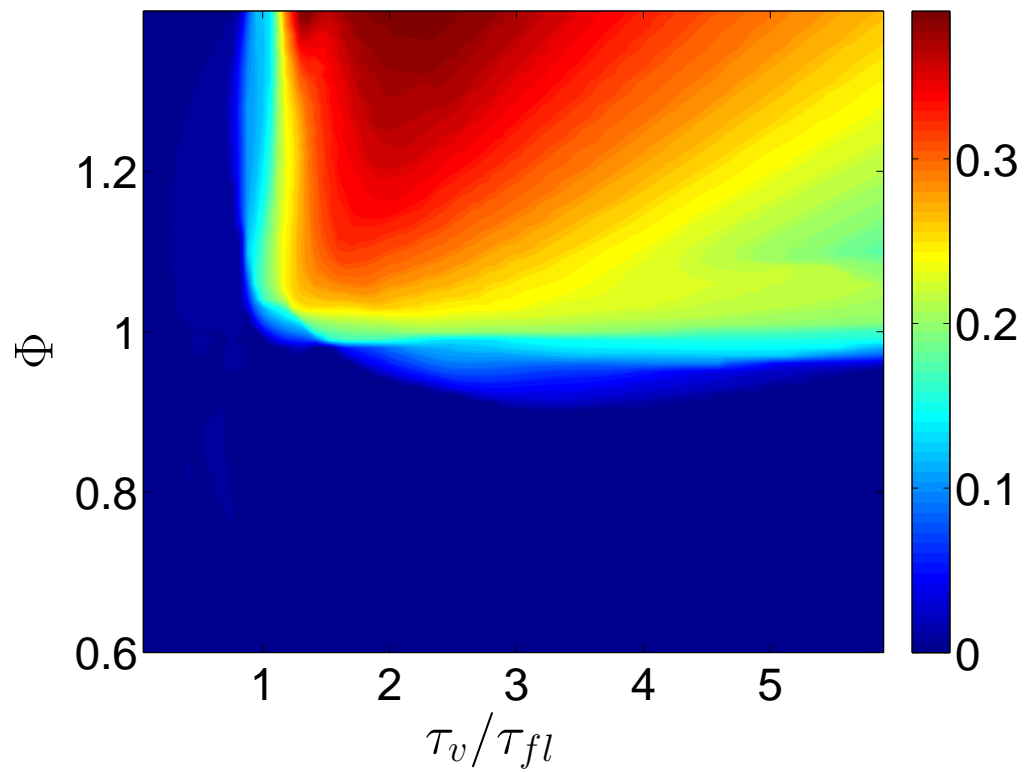


FIG. 3.18: Taux de réaction moyen de la flamme de diffusion 1D diphasique en fonction de τ_v/τ_{fl} et de Φ .

au travers de la flamme, ce qui explique les pics visibles sur les graphiques 3.17a, 3.17b et 3.17c.

Concernant l'équilibre thermodynamique au travers de la flamme (figures 3.16a, 3.16b et 3.16c), nous pouvons voir que dans notre cas nous en sommes très proche. En effet, les gouttes s'évaporant très vite, la fraction massique de fuel va très rapidement atteindre la valeur qu'elle devrait avoir dans le cas purement gazeux, et ce sans que la température n'augmente significativement car nous restons loin du front de flamme. Cela explique le plateau où Y_f^{norm} passe de 0 à son maximum pour une température normalisée T^{norm} très faible. Puis, lors de la combustion, nous voyons que Y_f^{norm} et T^{norm} sont linéairement liés et proche de l'équilibre thermodynamique (-). Aucun terme source de fuel gazeux n'est présent dans les gaz brûlés étant donné que les gouttes sont toutes évaporées lors de l'arrivée du front de flamme ; la courbe ($T^{norm}(Y_f^{norm})$) va donc rester à l'équilibre jusqu'à la fin de la réaction. Le fuel en excès dans le cas où la richesse est de $\Phi = 1.4$ explique le résidu de fuel en fin de réaction, visible sur le graphique 3.16c. Aucune flamme de diffusion n'est visible sur les captures instantanées, comme le confirme la figure 3.18, où nous nous situons en dehors de la zone où taux de réaction de flamme de diffusion est non nul.

Pour un τ_v/τ_{fl} de l'ordre de 1, nous voyons sur les captures instantanées à la stoechiométrie et dans le cas riche (figures 3.15e et 3.15f) que le front d'évaporation va traverser le front de flamme. Cela s'explique par le temps accru que vont mettre les gouttes à s'évaporer, donc à la diminution de la distance entre le front d'évaporation et le front de flamme, observable sur la figure 3.14b. Cette distance – comme précédemment – reste plus faible à la stoechiométrie qu'aux richesses $\Phi = 0.6$ et $\Phi = 1.4$. Dans le cas pauvre, puisque les flammes vont s'évaporer plus rapidement à cause de leur plus faible taille, nous restons dans une propagation de flamme purement prémélangée. C'est pourquoi Φ reste constant à travers cette flamme, comme nous pouvons le voir sur le graphique 3.17d. Lorsque l'on est à la stoechiométrie, les gouttes n'étant pas complètement évaporées à ce stade, la flamme qui apparaît est une flamme pauvre, comme nous pouvons le voir sur le graphique 3.17e où le maximum du taux de réaction est effectif pour une richesse de l'ordre de $\Phi = 0.75$, alors que la richesse liquide initiale est de 1. Dès que la richesse dépasse la stoechiométrie, la présence du terme source d'évaporation dans le front de flamme va entraîner une vitesse de flamme supérieure que dans le cas purement gazeux, comme nous pouvons le voir sur la figure 3.14a. En effet contrairement au cas précédent où la température n'était pas suffisamment élevée lors de l'évaporation pour amorcer une réaction, cela devient le cas à richesse élevée ($\Phi = 1.4$). Puisque les gouttes mettent plus de temps à s'évaporer, la température va augmenter pendant cette évaporation à cause de l'approche du pic de réaction. La richesse présente à l'endroit de la flamme est à la stoechiométrie, comme

le montre la figure 3.17f. C'est à cette richesse qu'elle va le plus vite, donc qu'elle aura le plus de facilité à se propager vers le front d'évaporation. La flamme va donc se propager à la même vitesse qu'à la stoechiométrie, ce qui explique la vitesse stable qu'atteint la flamme, visible sur le graphique 3.14a. Le reste du fuel qui s'évapore va brûler de manière passive dans les gaz chauds, dès son apparition. Ce phénomène est visible sur le graphique 3.16f, où l'on voit que la fraction massique de fuel augmente en même temps que la température dans un premier temps, puis est consommé en grande partie. Dans un second temps, le reste de fuel non évaporé va apparaître dans les gaz brûlés. Celui-ci va partiellement brûler, mais ne va pas entraîner d'augmentation significative de la température, sa quantité étant trop faible et l'oxydant résiduel étant en trop faible quantité. Le fuel en excès va rester dans les gaz brûlés ensuite, n'ayant plus d'oxydant pour brûler dans le cas où $\Phi = 1.4$.

L'analyse de l'équilibre thermodynamique montre un grand écart entre ce que nous avons auparavant ($\tau_v/\tau_{fl} = 0.0294$) et l'équilibre local dans notre cas. En effet, comme cela était prévisible, l'augmentation de τ_v induit un rapprochement du pic d'évaporation et du taux de réaction, visible sur le graphique 3.14b. L'augmentation de la température n'induit pas directement une augmentation de la fraction massique de fuel, ce qui explique la raison pour laquelle, initialement, la température va rapidement augmenter. Dans le cas le plus pauvre, là où la flamme est encore purement prémélangée, nous constatons que l'équilibre thermodynamique est tout de même atteint et va perdurer, étant donné qu'il n'y a plus de gouttes à évaporer au sein de la flamme (figure 3.17d). A la stoechiométrie ainsi que dans les cas riches, l'équilibre thermodynamique n'est atteint que dans les gaz brûlés, une fois la réaction effectuée. Cela est dû à la présence de gouttes qui s'évaporent lors du passage du front de flamme. La fraction massique de fuel n'a jamais le temps d'atteindre l'équilibre, la fraction de mélange va donc évoluer au travers de la flamme, comme nous pouvons le voir sur les graphiques 3.17e et 3.17f. Le graphique 3.18 montre que ces configurations ne présentent toujours pas de flamme de diffusion.

Pour un $\tau_v/\tau_{fl} = 5.89$, l'évaporation est très tardive. Un premier phénomène intéressant est que la vitesse de flamme ne va plus dépendre des caractéristiques de flamme gazeuse, mais uniquement de la richesse. On remarque une dépendance linéaire de la vitesse de flamme avec la richesse, comme nous pouvons le voir sur la figure 3.14a. En effet, le temps caractéristique d'évaporation τ_v est tellement élevé que c'est l'évaporation qui pilote la vitesse de flamme. Ainsi, comme dans le cas précédent, nous avons une flamme pauvre dans le cas où la richesse liquide initiale est à la stoechiométrie (figure 3.17h) et à richesse égale à 1 dans les cas riches (figure 3.17i) pour les mêmes raisons évoquées ci-dessus. En effet, dans cette configuration, la vitesse

de flamme sera tout le temps supérieure à la vitesse de propagation du front d'évaporation. La flamme va donc se fixer à l'endroit où le fuel nécessaire est suffisant pour maintenir une combustion. Cela se confirme par le fait que le taux de réaction apparaît à une richesse de 0.6 quelle que soit la configuration, comme nous pouvons le voir sur les graphiques 3.17g, 3.17h et 3.17i.

On remarque sur la figure 3.15i la présence d'une flamme de diffusion. En effet, à la richesse $\Phi = 1.4$, une flamme de prémélange à la stoechiométrie va se propager dans le milieu, comme nous pouvons le voir sur la figure 3.17i. Derrière la flamme, il restera donc de l'oxydant ainsi que des gouttes. Comme toutes les gouttes n'ont pas fini de s'évaporer, un second pic de fraction massique de fuel gazeux apparaît derrière la flamme, donnant lieu à une flamme de diffusion pauvre, ce qui explique le plateau visible sur cette même figure. Le taux de réaction de la flamme de diffusion en fonction de τ_v/τ_{fl} et Φ a été tracé sur la figure 3.18. De plus, nous remarquons que la distance entre le front de flamme et le front d'évaporation devient négative à cette richesse. Cela signifie que la majeure partie de l'évaporation se situe derrière la flamme. On a donc une flamme pilote prémélangée, suivie d'une flamme de diffusion qui va brûler tout le carburant liquide restant. Nous nous situons donc dans le cadre d'une flamme épaissie.

Dans la configuration où le fuel liquide est à la stoechiométrie, nous remarquons sur la figure 3.17h que la combustion ne se produit qu'en milieu pauvre, et majoritairement à une richesse de 0.6. La flamme pilote est donc une flamme de prémélange pauvre. Il s'ensuit une flamme plus étalée spatialement, qui va apparaître là où le taux d'évaporation devient élevé. En effet, les gouttes se retrouvant dans un milieu très chaud, elles vont brutalement s'évaporer, déposant du fuel gazeux dans le milieu chaud. Ce fuel, se mélangeant à l'oxydant résiduel non brûlé par la flamme pauvre, va immédiatement brûler, comme nous pouvons le voir sur la figure 3.15h. Ceci entraîne un très fort déséquilibre thermodynamique, comme nous pouvons le remarquer sur la figure 3.16h. Le fuel va tout d'abord augmenter dans la zone de diffusion thermique de la flamme, ce qui entraîne une augmentation de ces deux paramètres. Le fuel va ensuite brûler (en régime pauvre) induisant une augmentation de la température. Derrière la flamme pauvre, le fuel résiduel liquide va brûler dès son apparition gazeuse. Cela implique que la fraction massique de fuel gazeuse reste très faible alors que la température continue d'augmenter.

Finalement, dans le cas riche, nous observons un double pic de réaction sur la figure 3.15i. Le premier pic, dû à la combustion du fuel évaporé, correspond à une flamme de prémélange pauvre (cf figure 3.17i), puis apparaît un second pic de taux de réaction dû à la fin combustion du fuel déposé en fin d'évaporation des gouttes. En effet, sur ce graphique on peut constater que le pic d'évaporation est le plus élevé dans et derrière la flamme de prémélange. Ce pic d'évaporation

va même perdurer après la seconde flamme de diffusion. C'est ce qui entraîne la formation de cette flamme de diffusion. Sur le graphique 3.17i, on constate que la flamme prédominante est la flamme de diffusion à la stoechiométrie. C'est donc le dégagement de chaleur de cette flamme qui va entretenir la flamme de prémélange se trouvant plus en avant dans le nuage de gouttes. Cette flamme de prémélange pauvre est entretenue d'une plage de richesse qui va de 0.6 à 1.0. La combustion de la flamme de prémélange étant forcée, le déséquilibre thermodynamique va être très important. En effet, nous pouvons voir sur la figure 3.16i une courbe présentant de nombreuses ressemblances à la figure 3.16f ($\tau_v/\tau_{fl} = 0.3394$), mais dont les phénomènes présents sont très fortement accentués. Notons qu'à l'approche de la flamme de prémélange, la fraction massique maximale de fuel gazeux est nettement inférieure que dans le cas précédent. Celle-ci s'annule même après son passage (figure 3.15i). Le fuel en excès va finir par s'évaporer dans les gaz brûlés des deux flammes, mais faute d'oxydant, il ne brûlera pas et la température restera stable.

3.3.5 Conclusion

Dans cette partie nous avons caractérisé les flammes diphasiques 1D en fonction de deux paramètres : la richesse liquide initiale et le temps caractéristique d'évaporation τ_v . Nous avons déterminé plusieurs phénomènes en fonction de ces deux caractéristiques. Dans le cas où les gouttes s'évaporent très rapidement, nous avons vu que les caractéristiques de la flamme diphasique sont similaires à celle de la flamme gazeuse équivalente. Nous avons aussi mis en évidence une flamme épaissie, où la vitesse de flamme deviendra supérieure à la vitesse de flamme gazeuse de référence dans certains cas particuliers. Dans ce cas, aucune flamme de diffusion n'est apparente. Cette augmentation de la vitesse en milieu riche s'explique par le fait que c'est une flamme à la stoechiométrie qui va se propager, suivi d'une seconde flamme, passive, qui va brûler le fuel non consommé par cette première flamme stoechiométrique. Cette flamme stoechiométrique a été mise en évidence dans cette partie. Enfin, dans le cas d'évaporation très lente, nous voyons une apparition soudaine du taux de réaction de flamme de diffusion. Cette apparition est soumise à deux conditions, visibles sur le graphique 3.18. La première est la nécessité d'avoir une richesse liquide initiale élevée, et la seconde d'avoir $\tau_v/\tau_{fl} > 1$.

Afin de compléter cette étude, il pourrait être envisageable d'appliquer une loi d'évaporation plus proche des limites liées à la saturation, prenant en compte par exemple du fuel gazeux et de la pression sur l'état de saturation des gouttes. De même, il pourrait être intéressant de prendre en compte le two-way énergie. Cela va entraîner des phénomènes complexes, tels qu'un

refroidissement du gaz devant le front de flamme, d'où un impact très important sur la chimie.

Chapitre 4

Combustion turbulente de sprays

On peut lutter contre des idées avec d'autres idées, contrer des plans tordus avec des contre-plans encore plus tordus, mais il y a une force qui ne peut être contrée, qui se nourrit de toute opposition : c'est le chaos, le bordel total!

Jean-Claude Dunyach

4.1 Introduction

Les systèmes de propulsion actuels sont basés sur la combustion turbulente d'un carburant injecté sous forme liquide dans une chambre de prévaporisation, ou directement dans une chambre de combustion. Ce spray va tout d'abord s'atomiser dès sa sortie de l'injecteur. Cette atomisation n'a pas été étudiée ici, mais beaucoup de travaux ont été effectués concernant ce phénomène [99, 100]. Une fois atomisé, ce spray va se disperser, puis s'évaporer. Le fuel gazeux issu de cette évaporation va ensuite se mélanger par la turbulence présente, pour finalement brûler avec l'air présent dans le domaine.

Le suivi de cette phase disperse se fait généralement par des méthodes Lagrangiennes, dont les caractéristiques permettent difficilement de simuler de gros domaines. De plus, cette méthode est très difficilement parallélisable [101], et engendre des performances limitées. Les limitations numériques de cette méthode ont donc poussé à l'élaboration d'un modèle de suivi de spray dispersé Eulérien, dont un avantage certain est sa parallélisation. Ce modèle a été implémenté dans un solveur appelé *Muses3D*, développé par le laboratoire EM2C¹-ECP². Néanmoins, le passage à l'Eulérien du suivi d'un spray pose plusieurs soucis. Tout d'abord, le transport de

¹Énergétique, Moléculaire et Macroscopique, Combustion

²Ecole Centrale Paris

caractéristiques statistiques des gouttes dans chaque maille peut induire des instabilités telles que des delta-chocs (figure 4.1a). Ces instabilités apparaissent lorsque les vitesses des gouttes présentent plusieurs valeurs très distinctes, en particulier lors de croisement de paquets de gouttes. Un premier modèle multi-vitesses permettant de rendre compte du croisement de ces paquets a été développé par de Chaisemartin [17]. Ce modèle a permis de prendre en compte ces croisements de paquets, comme nous pouvons le voir sur la figure 4.1b.

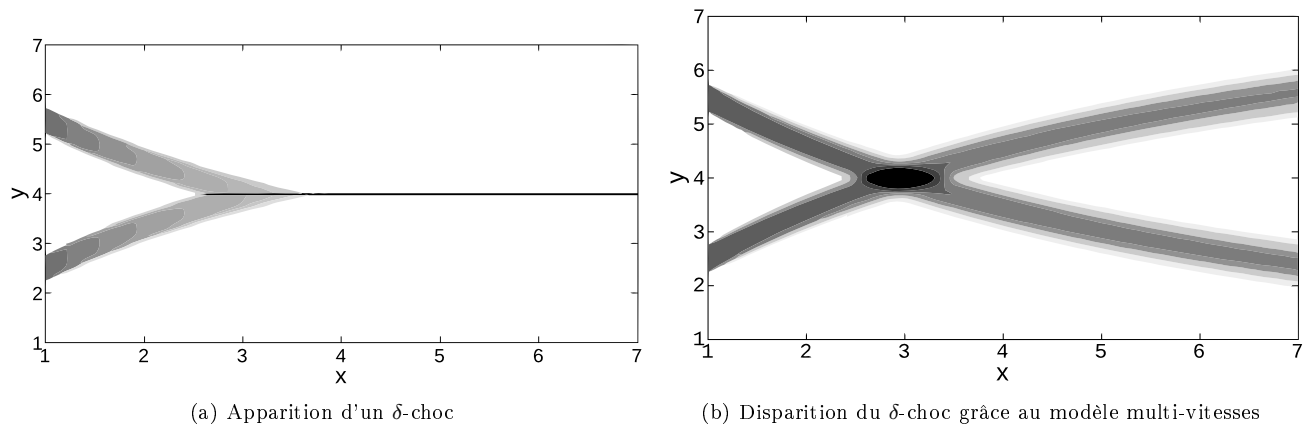


FIG. 4.1: Apparition d'un δ -choc selon les modèles Eulériens utilisés.

Afin de montrer les capacités du modèle multi-vitesses à rendre compte de phénomènes physiques tels que le croisement de deux jets diphasiques, une comparaison avec le solveur Lagrangien d'*Asphodele* a été effectuée. La prise en charge des collisions inter-particulaires a été intégrée via un opérateur de collision dans les équations de Williams dans le solveur Eulérien. Afin de valider ces modèles, plusieurs simulations comparatives ont été effectuées, où plusieurs caractéristiques moyennes ont été comparées entre la formulation Eulérienne (présentée dans le paragraphe 2.2.2 (page 28)) et la formulation Lagrangienne (présentée dans le paragraphe 2.3.1 (page 32)). Ces comparaisons ont été effectuées durant le Summer Program du CTR³ 2008 [18]. Le chapitre 4.2 y est consacré.

Cette première étude concerne le suivi et les collisions de particules solides, donc sans évaporation. Aucun mélange n'est donc présent. Afin de juger de la capacité de la formulation Eulérienne multi-fluides à rendre compte de la ségrégation et de l'évaporation en milieu turbulent et réactif, une autre étude a été effectuée. Celle-ci consiste à effectuer la ségrégation dans un premier temps, avec chacun des deux formalismes, d'un spray monodispersé. Ces résultats seront comparés entre eux. Puis, une fois ségrégué, ce spray sera rendu évaporant afin d'étudier la topologie de fuel gazeux présent dans le domaine. En effet, la ségrégation impacte directe-

³Center of Turbulent Research

ment sur l'évaporation et la topologie de fuel gazeux [102, 103]. Cela a permis de comparer les différences induites par le formalisme Eulérien dans le cas d'une rétro-action 2-way massique du spray sur le gaz porteur. Enfin, la propagation d'un front de flamme dans ce milieu a été effectué pour savoir si un phénomène tel que la chimie rend compte de manière identique (ou proche) dans le cas des deux formalismes. Cette étude a été effectuée durant le Summer Program durant le CTR 2010 [16, 104]. Cette étude est présentée dans le paragraphe 4.3.

Finalement, l'étude précédente a été étendue dans le cas d'un spray initialement polydispersé. Cela a permis de vérifier si le modèle Eulérien multi-fluides rend bien compte de l'évaporation dans le cas où des gouttes de plusieurs sections sont initialement présentes. De manière identique, une étude de la ségrégation des gouttes selon leur taille avec les deux formalismes a été effectuée. Les impacts de la polydispersion sur la topologie de fuel gazeux sont différents du cas monodispersé. Cet impact a été étudié dans le chapitre 4.4. La comparaison de la topologie de fuel gazeux a été conduite de façon identique, entre les deux formalismes. Finalement, la propagation d'un front de flamme froide a été effectuée au sein du spray évaporant. Les résultats et comparaisons ont été détaillés dans ce chapitre.

4.2 Combustion turbulente d'un spray évaporant polydisperse avec croisement de gouttes : modélisation Eulérienne des collisions à nombre de Knudsen fini et validation.

Les simulations numériques de la dynamique de sprays s'évaporant dans des écoulements instationnaires, avec un large spectre turbulent, est d'une grande importance pour les applications industrielles et nécessite un grand effort de modélisation et de calcul scientifique. Dans un travail similaire [104], il a été démontré la capacité de la méthode Eulérienne multi-fluides à capturer la dynamique et l'évaporation de ces sprays. Ce même papier a également étendu l'étude jusqu'à des nombres de Stokes rendant possible des croisements de gouttes, en utilisant une méthode de quadrature des moments dans l'espace des vitesses, conditionné par la taille des gouttes. Ces études ont été effectuées pour un nombre de Knudsen infini, donc dans le cas où l'impact des collisions entre gouttes est négligeable. Dans ce chapitre, nous étudions la possibilité d'utiliser la méthode des moments cinétiques conditionnés par les tailles, pour rendre compte de la dynamique de collisions de sprays polydispersés pour des nombres de Knudsen finis. Après avoir dérivé le modèle et présenté les méthodes numériques nécessaires à la conservation de l'espace des moments, nous validerons cette approche et sa capacité à décrire les

collisions de deux jets qui se croisent, en comparant les résultats issus d'un spray mono- et poly-disperse décrit par une méthodologie Lagrangienne.

4.2.1 Introduction

Dans cette étude, il existe un intérêt considérable pour le développement de méthodes numériques afin de simuler les sprays. Les principales méthodes physiques qui peuvent être utilisées pour ces simulations sont (1) le transport dans l'espace réel, (2) l'évaporation des gouttes, (3) l'accélération des gouttes due à la force de traînée et (4) aux rebonds, la coalescence et le break-up des gouttes qui engendrent la polydispersion. L'objectif principal des simulations numériques est de prendre en compte le lien qui existe entre ces méthodes. Une première approche de simulation de spray à un niveau mésoscopique est de décrire avec la méthode Lagrangienne l'évolution ponctuelle des particules du brouillard en résolvant l'évolution des propriétés physiques telles que la position, la vitesse et la température. Cette approche est appelée simulation des particules discrètes (DPS) et peut être considérée comme une simulation numérique directe (DNS) pour la phase liquide. Son principal inconvénient est qu'elle est dépendante des conditions initiales de l'injection, qui ne peuvent pas être précisément connues. Par conséquent, seules les analyses statistiques moyennes avec des injections aléatoires peuvent être effectuées. Un point de vue statistique peut également être adopté et conduit à une seconde approche pour la simulation de sprays mésoscopiques. Un tel modèle est fondé sur une théorie cinétique qui est basée sur l'équation de transport de Williams [6]. L'approche Lagrangienne de Monte-Carlo, appelée la méthode de simulation directe de Monte-Carlo (DSMC) par Bird [105], est généralement considérée comme étant plus précise que les méthodes Eulériennes pour résoudre l'équation de Williams. Toutefois, en raison du coût élevé et des difficultés à la coupler précisément avec les descriptions Eulériennes de la phase gazeuse, les recherches se dirigent vers le développement de méthodes Eulériennes pour décrire les sprays. Dans une étude récente (de Chaisemartin *et al.* [106]), un nouveau modèle Eulérien ainsi que ses schémas numériques ont été introduits. Ce modèle est capable de composer avec deux défauts des modèles bi-fluides Eulériens actuels : la description de la polydispersion et la distribution de vitesse hors-équilibre pour les sprays qui s'évaporent. Le premier phénomène est apparu comme important depuis que l'on a découvert que des gouttes de différentes tailles ont des dynamiques différentes, déposant leur fraction massique de fuel durant l'évaporation en différentes localisations. Le second phénomène engendre un défaut majeur, à savoir l'incapacité du modèle à capturer la distribution de gouttes bi-modales et donc le croisement des sprays. Ce nouveau modèle utilise un ensemble d'améliorations des

modèles multi-fluides pour la polydispersion [107, 108, 109], et la méthode de quadrature des moments dans l'espace des phases des vitesses pour les particules monodisperses [110]. Les schémas numériques dédiés satisfont une propriété essentielle i.e. la préservation de l'espace des moments. Les validations sont alors effectuées dans une configuration de jet libre en décrivant les comparaisons avec le solveur *Asphodele*.

Dans cette étude, le modèle développé par de Chaisemartin *et al.* [106] est étendu à des sprays qui collisionnent. Nous allons rechercher la capacité de tels modèles Eulériens à capturer les dynamiques et la polydispersion des sprays collisionnants, modélisés à un niveau cinétique à travers l'opérateur de Boltzmann. En utilisant un DPS Euler/Lagrange avec de fortes interactions dans la configuration de deux jets chargés en gouttes se collisionnant, nous mènerons une analyse comparative détaillée du modèle Eulérien multi-fluides. Un tel modèle peut être facilement appliqué à des noyaux de collision complexes : des modèles 3D avec coalescences et rebonds.

4.2.2 Simulation de particules discrètes et modèle statistique pour les particules se collisionnant

À une échelle mésoscopique, les gouttes sont supposées sphériques et sont décrites comme étant un brouillard de particules ponctuelles pour lequel les échanges de masse, de quantité de mouvement et d'énergie thermique sont définis dans leur ensemble. Une première approche de simulation de spray de ce type est appelée simulation de particules discrètes (DPS) et consiste à résoudre l'évolution des propriétés physiques telles que leur position, leur vitesse, leur taille et leur température. Un point de vue statistique peut également être adopté considérant que la position initiale, la taille, la température d'une goutte ne sont pas connues précisément, mais au travers d'une fonction probabiliste pour laquelle une équation de transport peut être écrite.

Le but de ce paragraphe est de présenter les deux formulations et les relations entre elles. Pour raison de simplicité, la loi d'évaporation isothermique d^2 , ainsi que la loi de traînée de Stokes seront utilisées, ainsi que des rebonds élastique en $2D$. Il est possible d'ajouter d'autres phénomènes physiques tels que la gravité, le réchauffement ou d'autres modèles complexes pour l'évaporation, la traînée ou les collisions entre sphères dures [111], ou encore les collisions entraînant une coalescence [108, 112], mais ceci n'est pas le propos de ce travail.

4.2.2.1 Algorithme Lagrangien DPS

Le DPS décrit l'évolution de particules numériques, chacune représentant une ou plusieurs gouttes. Si L_0 est la longueur de référence, u_0 la vitesse de référence, $t_0 = L_0/u_0$ le temps de référence et S_0 la surface de référence d'une goutte, alors l'évaporation et les processus de traînée peuvent être décrits par des équations adimensionnelles :

$$d_t \mathbf{x}_p = \mathbf{u}_p, \quad d_t \mathbf{u}_p = \frac{\mathbf{F}(t, \mathbf{x}_p, \mathbf{u}_p, S_p)}{m_p}, \quad d_t S_p = \mathcal{K}, \quad (4.1)$$

dans lesquelles, en variables adimensionnelles, x_p est la position de la p^{ieme} particule, u_p sa vitesse, S_p la surface de la goutte (supposées sphériques), m_p sa masse, $\mathbf{F}(t, \mathbf{x}, \mathbf{u}, S) = (\mathbf{U}(t, \mathbf{x}) - \mathbf{u}_k)/St(S)$ la force de traînée de Stokes dépendant de sa surface, et \mathcal{K} le taux d'évaporation, ici considéré constant. Le nombre de Stokes et le temps de relaxation adimensionnel sont $St(S) = t_p(S)/t_0$, où $t_p(S) = \rho_{l0} S S_0 / (18\pi\nu_0\rho_{g0})$, et ρ_{l0} et ρ_{g0} sont les densités liquide et gazeuse de référence. Nous pouvons écrire $St(S) = St_0 S$ avec le nombre de Stokes St_0 correspondant à S_0 .

Les collisions gouttes/gouttes sont prises en compte au sein de chaque pas de temps. Il existe des phénomènes $3D$ mais considérant que toutes les gouttes et leur vitesses sont dans le même plan, elles peuvent être vues comme un phénomène $2D$. Ainsi, des collisions binaires de sphère dure sont considérées ici et les collisions sont considérées élastiques. Un algorithme de détection doit être mis en place pour déterminer quelle paire de particules collisionnera dans chaque pas de temps. Ce dernier doit être suffisamment petit pour que la vitesse de chaque particule puisse être considérée comme constante afin de détecter les collisions, et aussi qu'il ne puisse y avoir qu'une collision par pas de temps et par goutte. Le coût de cette détection peut facilement atteindre l'ordre N^2 où N est le nombre de particules. Pour éviter cela, un algorithme a été développé ; il considère seulement les particules voisines de la particule étudiée. L'algorithme général de la DPS contient alors trois phases incluses dans un pas de temps :

1. la détection de particules collisionnantes,
2. la résolution des équations 4.1, avec une méthode de Runge-Kutta d'ordre 3,
3. la modification des positions et vitesses des particules qui collisionnent.

4.2.2.2 Description statistique du spray

D'un point de vue statistique, un spray peut être décrit par sa surface associée, la fonction densité de vitesse (NDF) $f(t, \mathbf{x}, S, \mathbf{u})$ qui satisfait l'équation de transport de Williams [6] :

$$\partial_t f + \partial_{\mathbf{x}} \cdot (\mathbf{u} f) + \partial_S (\mathcal{K} f) + \partial_{\mathbf{u}} \cdot (\mathbf{F} f) = \frac{1}{\text{Kn}} \Gamma, \quad (4.2)$$

où Γ est l'opérateur de collision adimensionnel et, pour le modèle DPS, \mathcal{K} est la constante de la loi d'évaporation en d^2 et $\mathbf{F}(t, \mathbf{x}, \mathbf{u}, S)$ est la force de traînée de Stokes définie préalablement. Le nombre de Knudsen Kn est le rapport entre le libre parcours moyen $l_0 = 1/(n_0 \sigma_0)$ et L_0 , où σ_0 est la section efficace des collisions (qui est monodimensionnel dans notre espace physique $2D$), et n_0 la densité de référence de gouttes. Il est à noter qu'un nombre de référence de la densité $N_0 = n_0(L_0)^2$ a été utilisé pour créer une NDF adimensionnée. Dans le cas d'un nombre de Knudsen infini, qui correspond à la limite d'une particule suffisamment petite et à une dilution du spray suffisante, l'effet de l'opérateur de collision est négligeable, comme l'a montré de Chaisemartin *et al.* [106]. A l'inverse, un petit nombre de Knudsen correspond à la limite où le fluide atteint un équilibre. Entre ces deux limites, les interactions gouttes/gouttes ont un impact sur le spray sans induire un équilibre. Ce dernier cas est le sujet de cette étude.

Décrivons dans sa forme adimensionnelle l'opérateur de collision de Boltzmann dépendant de la taille et correspondant à des rebonds binaires élastiques en $2D$:

$$\Gamma = \int_0^\infty \beta(S, S^*) \int_{\mathbb{R}^2} \int_{D^+} [f'' f^{*''} - f f^*] |\mathbf{g} \cdot \mathbf{n}| \, d\mathbf{n} \, d\mathbf{u}^* \, dS^*, \quad (4.3)$$

avec les termes de pre-collision $f = f(S, \mathbf{u})$, $f^* = f(S^*, \mathbf{u}^*)$ et les termes de post-collision $f'' = f(S, \mathbf{u}'')$, $f^{*''} = f(S^*, \mathbf{u}^{*''})$, tous dépendants de t et de \mathbf{x} , et où $\mathbf{g} = \mathbf{u} - \mathbf{u}^*$ est la différence de vitesse avant la collision. La courbe D^+ est le demi-cercle unité dans lequel $\mathbf{g} \cdot \mathbf{n} > 0$ (i.e., différence de vitesse qui résulte des collisions). La section efficace de la collision est $\beta(S, S^*) = \sqrt{S} + \sqrt{S^*}$. Les variables avec double prime indiquent les valeurs avant la collision inverse, qui sont définies dans les termes des valeurs de pré-collision par Vedula *et al.* [111].

$$\begin{aligned} \mathbf{u}'' &= \mathbf{u} - \frac{2(S^*)^{3/2}}{(S)^{3/2} + (S^*)^{3/2}} (\mathbf{g} \cdot \mathbf{n}) \mathbf{n}, \\ \mathbf{u}^{*''} &= \mathbf{u}^* + \frac{2(S)^{3/2}}{(S)^{3/2} + (S^*)^{3/2}} (\mathbf{g} \cdot \mathbf{n}) \mathbf{n}. \end{aligned} \quad (4.4)$$

Les méthodes de Monte-Carlo sont généralement utilisées pour résoudre l'équation 4.2. Les

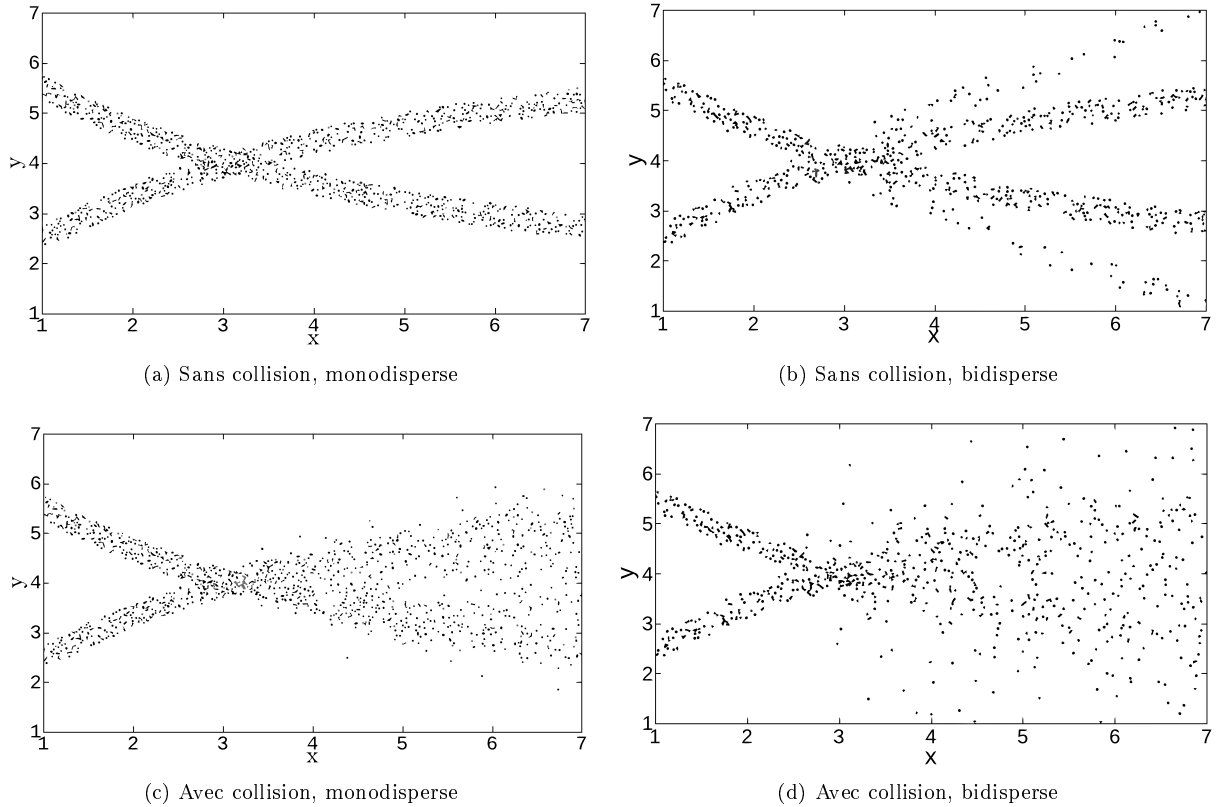


FIG. 4.2: Position des gouttes dans les simulations Lagrangiennes sans collision (en haut) et avec collision (bas) pour le cas monodisperse (gauche) et bi-disperse (droite).

champs Eulériens pour la densité de masse en phase liquide et la vitesse sont alors récupérés en les moyennant dans chaque maille de l'espace physique. Néanmoins, dans ce travail, notre but est de développer un modèle Eulérien pour la résolution statistique du spray. Ce modèle sera comparé à l'ensemble des moyennes obtenues pour les résultats DPS qui sont vus comme une réalisation des processus statistiques.

4.2.3 Configuration des jets croisés et solutions de référence

Une configuration $2D$ simple, dans laquelle se déroulent les collisions, est constituée de deux jets se croisant. Le fluide est considéré comme temporellement stationnaire et uniforme dans le domaine, avec une composante vitesse non nulle dans la direction x . Cela implique la restriction à un formalisme 1-way, qui est adéquat dans notre optique de validation du modèle Eulérien au travers de comparaisons avec les simulations Lagrangiennes. Le nombre de Reynolds basé sur U_0 , ν_0 et L_0 est de 1000, où U_0 est la vitesse du gaz, L_0 est la largeur globale du jet. Nous apporterons aussi des quantités dimensionnelles pour illustrer nos propos. Elles seront basées sur une vitesse $U_0 = 1$ m/s, une longueur $L_0 = 1.5$ cm et une viscosité cinématique

$\nu_0 = 1.6 \cdot 10^{-5} \text{ m}^2/\text{s}^2$. De plus, nous posons $d_0 = L_0/100$, où d_0 est le diamètre correspondant à la surface d'une goutte S_0 , en utilisant un nombre typique de goutte $N_0 = 1000$. Le domaine de calcul a une taille de 6×6 , soit $9 \text{ cm} \times 9 \text{ cm}$ en valeur dimensionnée.

Deux jets de spray, chacun ayant une largeur de 0.5, sont injectés dans l'espace de calcul avec une vitesse adimensionnée unitaire dont les directions forment des angles respectifs de 45° et -45° par rapport à la vitesse horizontale du fluide. La distance entre le centre des deux jets est de 3. Les gouttes sont suffisamment balistiques pour que les jets se croisent au centre du domaine (voir figure 4.2). Ces sprays peuvent être monodisperses, avec des gouttes dont le nombre de Stokes $St = 5.29$, correspondant à un diamètre de $195 \mu\text{m}$, ou bidisperses avec des gouttes où les nombres de Stokes sont $St = 5.29$ et $St = 15.86$ correspondant à des diamètres respectifs de $195 \mu\text{m}$ et $338 \mu\text{m}$. Dans ce dernier cas les dynamiques des deux tailles de gouttes sont très différentes, comme nous pouvons le voir dans le cas sans collision de la figure 4.2 à droite : les gouttes les plus balistiques dans chaque jet se déplacent plus vite que les plus petites. De plus, dans les deux cas, la densité de masse du spray est égale à 350 au point d'injection, avec une équi-répartition pour les deux tailles de gouttes dans le cas bi-disperse. Le nombre de référence de Knudsen est alors $Kn = 2L_0/(N_0d_0) = 0.2$. La densité de phase liquide ρ_l est 563 fois plus élevée que la densité du gaz.

Les simulations de référence ont été effectuées avec le code *Asphodele* (chapitre 2.3). Une injection aléatoire de goutte aléatoire est effectuée de telle façon qu'elle soit statistiquement indépendante du temps et spatialement uniforme sur la largeur des deux jets. Une capture instantanée d'une simulation DPS avec les positions des gouttes est illustrée sur la figure 4.2. Du fait que ces configurations sont statistiquement stationnaires, dans le but d'obtenir des moyennes d'ensemble après le régime transitoire, il suffit de prendre la moyenne temporelle une fois que l'état stationnaire est atteint.

4.2.4 Modèle Eulérien multi-fluides et multi-vitesses avec collision

Les modèles multi-fluides Eulériens pour les sprays incluant la coalescence ont été développés par Laurent *et al.* [108] et ont été comparés avec la méthode DQMOM de Fox [112]. C'est une extension du modèle multi-fluides Eulérien standard présenté par Laurent et Massot [107, 109] et abordé par de Chaisemartin *et al.* [106]. Ce modèle consiste en une discrétisation $0 = S_0 < S_1 < \dots < S_{N_{sec}}$ de l'espace des tailles, et en l'écriture d'une équation de fluide pour chaque intervalle $[S_{k-1}, S_k[$ appelé section. Toutefois, il est basé sur une hypothèse d'équilibre de la vitesse des gouttes de même taille : seule une vitesse est considérée sans dispersion de sorte

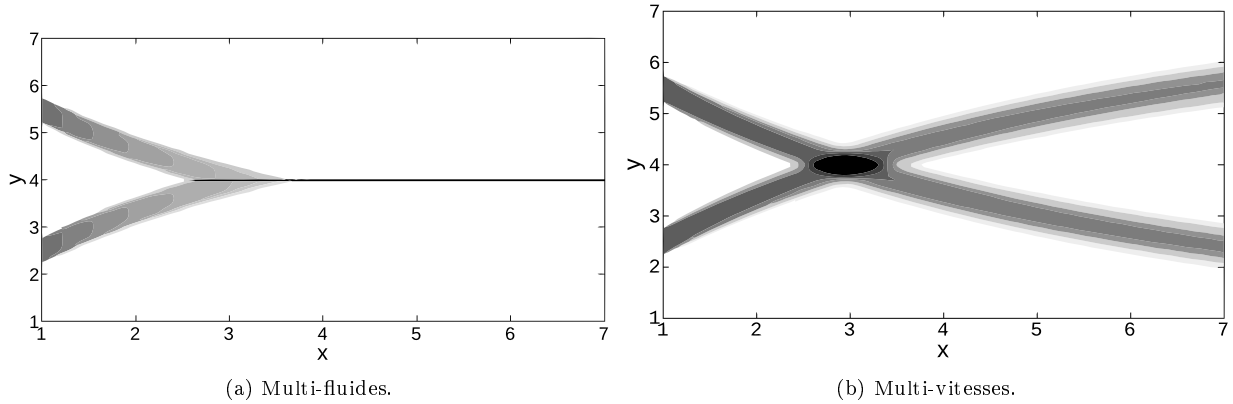


FIG. 4.3: Densité des gouttes pour une simulation de deux jets qui se croisent. Approche multi-fluides (gauche) et multi-vitesses (droite) pour un nombre de Stokes $St = 5.29$.

que seules les collisions de gouttes de taille différente peuvent être décrites dans ce modèle. Cela rend peu pratique la simulation de notre configuration car elle ne peut même pas décrire le croisement de jets non collisionnants ; c'est la limite infinie du nombre de Knudsen comme le montre la figure 4.3(a) pour le cas mono-disperse. C'est une configuration ambitieuse dans lesquelles les jets ne sont pas injectés dans la direction de l'axe comme l'a fait de Chaisemartin *et al.* [106], dans laquelle la traînée a un effet visible, ce qui est plus réaliste. Cela nous conduit à un CFL différent de un et à des diffusions numériques. On peut voir en figure 4.3(b) que la méthode multi-vitesses multi-fluides développée par de Chaisemartin *et al.* [106] et utilisant une hypothèse hors équilibre décrit parfaitement le croisement de gouttes. C'est par conséquent une bonne méthode à étendre à une configuration de nombre de Knudsen fini.

4.2.4.1 Approche multi-fluides multi-vitesses

Nous nous intéressons au moment de vitesse suivant, dans la section $[S_{k-1}, S_k[$:

$$m^{(k)}(t, \mathbf{x}) M_{j,l}^{(k)}(t, \mathbf{x}) = \rho_l \int_{S_{k-1}}^{S_k} S^{3/2} \int_{\mathbb{R}^2} (u_1)^j (u_2)^l f(t, \mathbf{x}, S, \mathbf{u}) d\mathbf{u} dS, \quad (4.5)$$

avec la convention $M_{00}^{(k)} = 1$. Cette hypothèse résulte de la méthode multi-vitesses multi-fluides introduite par de Chaisemartin [106], qui peut être écrite :

$$\forall S \in [S_{k-1}, S_k[\quad f(t, \mathbf{x}, S, \mathbf{u}) = m^{(k)}(t, \mathbf{x}) \kappa_k(S) \sum_{\alpha=1}^N w_{\alpha}^{(k)}(t, \mathbf{x}) \delta(\mathbf{u} - \mathbf{u}_{\alpha}^{(k)}(t, \mathbf{x})), \quad (4.6)$$

avec, pour chaque k allant de 1 au nombre total de sections N_{sec} ,

$$\sum_{\alpha=1}^N w_{\alpha}^{(i)} = 1, \quad \rho_l \int_{S_{k-1}}^{S_k} S^{3/2} \kappa_k(S) dS = 1.$$

Les N poids $w_{\alpha}^{(k)}$ et les N vitesses $\mathbf{u}_{\alpha}^{(k)}$ sont calculés à partir des moments de vitesse $M_{j,l}^{(k)}$ en utilisant la méthode de quadrature donnée par de Chaisemartin [106], avec $N = 4$ dans notre configuration 2D. Cette quadrature est une amélioration de celle proposée par Fox [110] de sorte qu'aucune direction ne soit privilégiée. Les équations de conservation pour la $k^{\text{ième}}$ section s'écrit alors :

$$\begin{aligned} \partial_t m^{(k)} M_{j,l}^{(k)} + \partial_{\mathbf{x}}(m^{(k)} M_{j+1,l}^{(k)}) &= -(E_1^{(k)} + E_2^{(k)}) m^{(k)} M_{j,l}^{(k)} + E_1^{(k+1)} m^{(k+1)} M_{j,l}^{(k+1)} \\ &+ j m^{(k)} \frac{U_{g,x} M_{j-1,l}^{(k)} - M_{j,l}^{(k)}}{\text{St}(S_{\text{mean}}^{(k)})} + l m^{(k)} \frac{U_{g,y} M_{j,l-1}^{(k)} - M_{j,l}^{(k)}}{\text{St}(S_{\text{mean}}^{(k)})} + \frac{\Gamma_{j,l}^{(k)}}{\text{Kn}}, \end{aligned} \quad (4.7)$$

où $j + l \leq 3$; $E_1^{(k)}$ et $E_2^{(k)}$ sont les coefficients "classiques" d'évaporation et $S_{\text{mean}}^{(k)}$ la surface moyenne pour cette section ([107]).

4.2.4.2 Fermeture du terme de collision de Boltzmann par une méthode de quadrature

Grâce à un changement de variable et une hypothèse (Équation 4.6), le terme de collision de Boltzmann dépendant de la taille et en 2D peut être écrit :

$$\begin{aligned} \Gamma_{j,l}^{(k)} &= \rho_l m^{(k)} \sum_{i=1}^{N_{\text{sec}}} m^{(i)} \sum_{\alpha=1}^N \sum_{\beta=1}^N w_{\alpha}^{(k)} w_{\beta}^{(i)} |\mathbf{u}_{\alpha}^{(k)} - \mathbf{u}_{\beta}^{(i)}| \\ &\int_{S_{k-1}}^{S_k} \int_{S_{i-1}}^{S_i} S^{3/2} \left(\sqrt{S} + \sqrt{S^*} \right) \kappa_k(S) \kappa_i(S^*) \mathcal{I}_{jl}(S, S^*, \mathbf{u}_{\alpha}^{(k)}, \mathbf{u}_{\alpha}^{(k)} - \mathbf{u}_{\beta}^{(i)}) dS^* dS, \end{aligned} \quad (4.8)$$

avec

$$\mathcal{I}_{jl}(S, S^*, \mathbf{u}, \mathbf{g}) = \int_{-\pi/2}^{\pi/2} \left((u'_1)^j (u'_2)^l - (u_1)^j (u_2)^l \right) \cos \theta d\theta, \quad (4.9)$$

où θ est l'angle entre \mathbf{g} et \mathbf{n} , et

$$u'_1 = u_1 - \lambda(S, S^*) \cos \theta (g_1 \cos \theta - g_2 \sin \theta), \quad (4.10)$$

$$u'_2 = u_2 - \lambda(S, S^*) \cos \theta (g_2 \cos \theta + g_1 \sin \theta), \quad (4.11)$$

avec

$$\lambda(S, S^*) = \frac{(S^*)^{3/2} [1 + \alpha(S, S^*)]}{[(S)^{3/2} + (S^*)^{3/2}]} \quad (4.12)$$

Un choix doit être fait pour κ_k , et les coefficients \mathcal{I}_{jl} peuvent être calculés. On déduit que $\mathcal{I}_{jl}(S, S^*, \mathbf{u}, \mathbf{g})$ est une fonction polynomiale de $\lambda(S, S^*)$ avec des coefficients ne dépendant que de \mathbf{g} et de \mathbf{u} . Par conséquent, un calcul préliminaire, et l'élaboration d'une intégrale de la forme :

$$\mathcal{L}_{kip} = \int_{S_{k-1}}^{S_k} \int_{S_{i-1}}^{S_i} (\lambda(S, S^*))^p S^{3/2} (\sqrt{S} + \sqrt{S^*}) \kappa_k(S) \kappa_i(S^*) dS^* dS$$

sont suffisants pour calculer les termes de collision, sans prendre en compte le choix de la fonction κ_k . Une solution plus simple est de prendre une fonction delta de Dirac pour κ_k dans le terme de collision :

$$\kappa_k(S) = \frac{1}{\rho_l (S_k^m)^{3/2}} \delta(S - S_k^m),$$

où S_k^m est la surface moyenne, qui peut être assimilée à $S_{\text{mean}}^{(k)}$. Ce choix est intéressant de par sa simplicité, mais aussi de par son extension possible pour l'évaporation, ce qui combine les méthodes multi-fluides et QMOM pour les tailles dans l'espace des phases afin d'obtenir une méthode de plus grand ordre ([113]). Le terme de collision dans l'équation Eq. (4.8) peut alors être approximé par

$$\Gamma_{j,l}^{(k)} = \frac{1}{\rho_l} m^{(k)} \sum_{i=1}^{N_{\text{sec}}} m^{(i)} \frac{\sqrt{S_k^m} + \sqrt{S_i^m}}{(S_i^m)^{3/2}} \sum_{\alpha=1}^N \sum_{\beta=1}^N w_{\alpha}^{(k)} w_{\beta}^{(i)} |\mathbf{u}_{\alpha}^{(k)} - \mathbf{u}_{\beta}^{(i)}| \mathcal{I}_{jl}(S_k^m, S_i^m, \mathbf{u}_{\alpha}^{(k)}, \mathbf{u}_{\alpha}^{(k)} - \mathbf{u}_{\beta}^{(i)}) \quad (4.13)$$

où tous les termes des membres de droite peuvent être évalués en utilisant les poids de quadrature ainsi que les vitesses.

4.2.4.3 Méthode numérique et conservation dans l'espace des vitesses

Comme il a été présenté par de Chaisemartin [106], nous utilisons un algorithme splitté pour séparer le transport dans l'espace physique – à travers la convection du transport dans l'espace des phases – des traînées et des collisions. L'intérêt est de conserver les propriétés des schémas utilisés pour les différentes contributions. D'un point de vue numérique, ceci est optimal et crée des capacités de parallélisation élevées. Pour le transport dans l'espace physique nous utilisons également un splitting dimensionnel. Le schéma 1D utilisé est décrit par de

Chaisemartin [106, 110] et se base sur un schéma de type volume-fini cinétique comme décrit par Bouchu *et al.* [114], dans le but de résoudre des systèmes faiblement hyperboliques comme les dynamiques de gaz sans pression. C'est la précision du premier ordre dans l'espace et dans le temps qui préserve l'espace des moments. Dans cette contribution, notre objectif est également de travailler à la frontière de l'espace des moments car nous voulons nous attaquer aux cas où la distribution des vitesses est réduite à une distribution mono-cinétique, où la quadrature proposée dégénère en modèles multi-fluides originaux, et la matrice de covariance peut atteindre la précision du 0 machine.

La préservation de l'espace des moments est également importante durant le transport dans l'espace des phases. Nous voyons dans de Chaisemartin *et al.* [106] que cela requiert de travailler avec des moments centrés. Le système correspondant est le même que celui dans de Chaisemartin *et al.* [106] en y ajoutant les termes collisionnants dans le système (équation 4.13), avec les coefficients \mathcal{I}_{jl} modifiés et dépendants de la vitesse relative à la vitesse moyenne de la section k et des coordonnées des différences de vitesses. Ce système se résout en utilisant une méthode implicite de Runge-Kutta RADAU-IIA d'ordre 5, avec des pas de temps adaptatifs.

4.2.5 Résultats et discussions

Un solveur développé à EM2C⁴-ECP⁵ a été utilisé pour les simulations Eulériennes avec des modèles multi-fluides / multi-vitesses. Une grille de 300×300 a été utilisée avec une seule section pour les cas monodisperses et deux sections pour le cas bidisperse, étant donné que les deux cas sont non évaporants et les collisions conservent la taille des gouttes. Il est à noter que les valeurs de $S_k^m = S_{\text{mean}}^{(k)}$ correspondent à la taille de ces gouttes. Les solutions de référence Lagrangienne sont obtenues avec le DPS, comme expliqué en section 4.2.3. Dans le but d'effectuer des comparaisons satisfaisantes avec les simulations Eulériennes, une analyse statistique Eulérienne des solutions Lagrangiennes est réalisée, en moyennant dans chaque cellule Eulérienne sur plus de 1325 échantillons (ces configurations sont statistiquement stationnaires après le régime de transition).

4.2.5.1 Comparaison Lagrangienne/modèle multi-fluides pour un spray monodisperse

Pour un spray évaporant monodisperse, le modèle Eulérien est celui développé par Fox [110] pour un opérateur de collision BGK ⁶ [115, 116], et Vedula *et al.* [111] pour l'opérateur de Boltzmann, à l'exception de la progression de la quadrature faite par de Chaisemartin [106].

⁴laboratoire d'Energétique Moléculaire et Macroscopique, Combustion

⁵Ecole Centrale Paris

⁶Bhatnagar-Gross-Krook

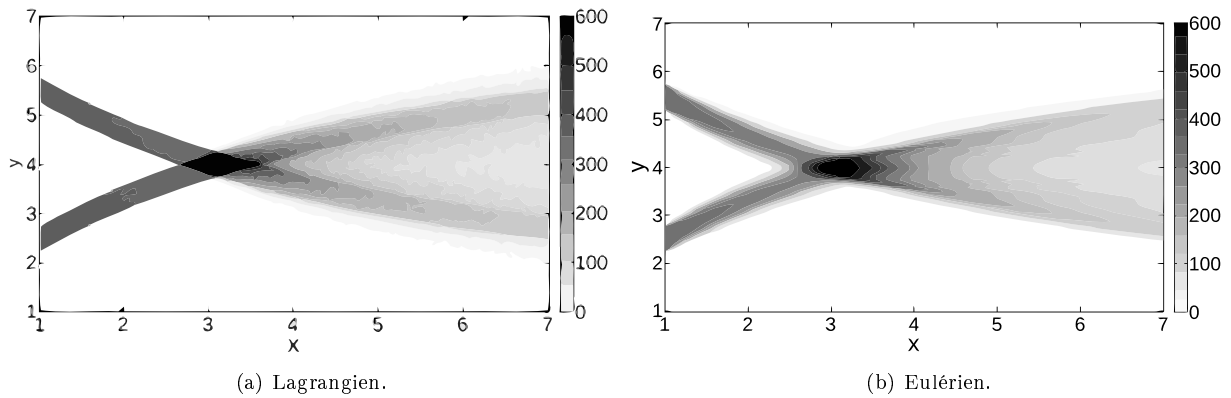


FIG. 4.4: Densité des gouttes pour une simulation de deux jets qui se croisent. Approche Lagrangienne projetée sur une grille Eulérienne (gauche) et modèle multi-fluides multi-vitesses (droite) pour un nombre de Stokes $St = 5.29$, avec collision.

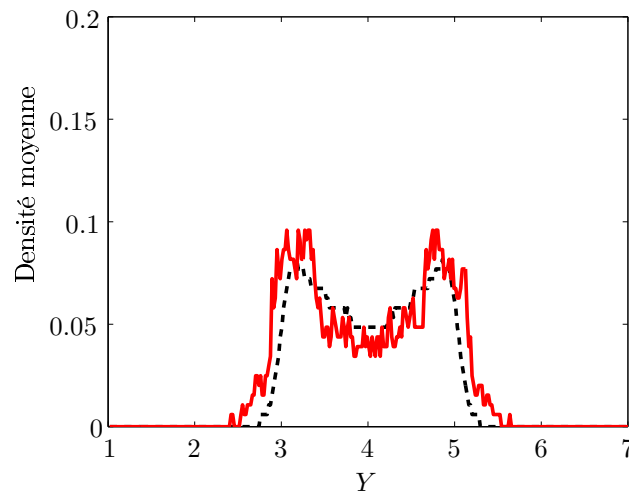


FIG. 4.5: Coupe verticale de la densité moyenne de goutte (U.A.) à l'abscisse $x = 6cm$. Méthode Eulérienne : pointillés noirs, méthode Lagrangienne : ligne rouge.

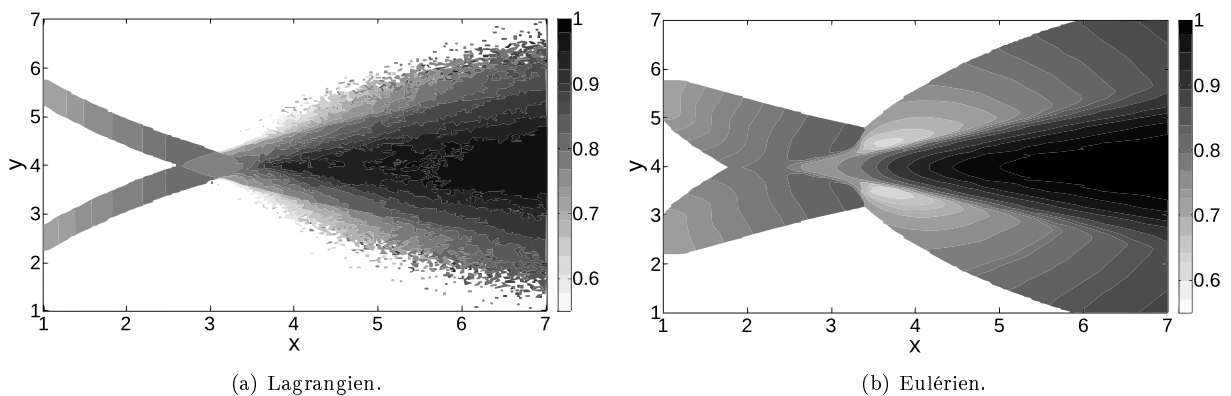


FIG. 4.6: Vitesse moyenne des gouttes pour une simulation de deux jets qui se croisent. Approche Lagrangienne projetée sur une grille Eulérienne (gauche) et modèle multi-fluides multi-vitesses (droite) pour un nombre de Stokes $St = 5.29$, avec collision.

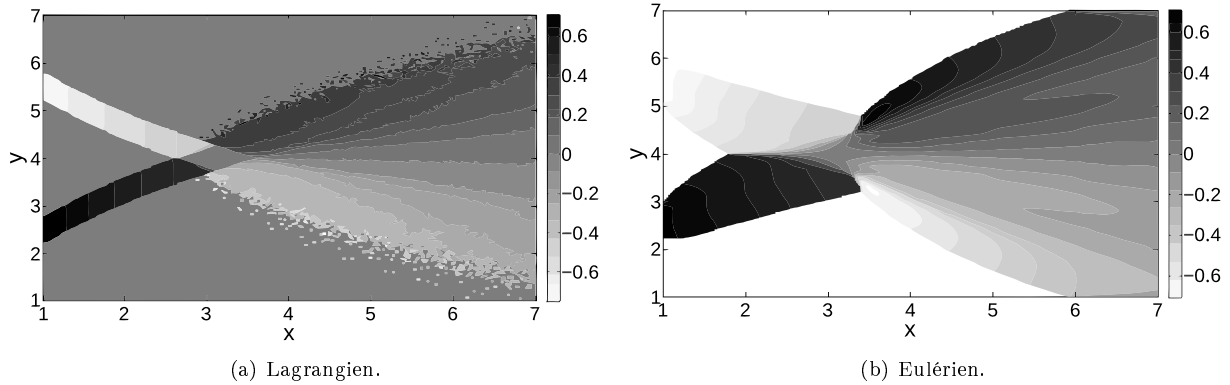


FIG. 4.7: Vitesse moyenne des gouttes sur y pour une simulation de deux jets qui se croisent. Approche Lagrangienne projetée sur une grille Eulérienne (gauche) et modèle multi-fluides multi-vitesses (droite) pour un nombre de Stokes $St = 5.29$, avec collision.

On a montré que le cas d'un nombre de Knudsen infini pouvait être correctement capturé par la méthode décrite en section 4.2.4. Le cas d'un nombre de Knudsen fini est faiblement collisionnant de sorte que certaines gouttes des jets suivent leur trajectoire d'origine comme si elles ne voyaient pas les autres gouttes, alors que ces dernières subissent des collisions et sont déviées de leur trajectoire d'origine. Cela peut s'observer nettement grâce à l'analyse Eulérienne des simulations Lagrangiennes (voir figure 4.4a). La simulation Eulérienne reproduit ce phénomène, comme nous pouvons le voir sur la figure 4.4b, même si une limite n'apparaît pas clairement ; cela est dû à la diffusion numérique induite par la méthode utilisée pour le solveur de transport des gouttes Eulérien. Toutefois les niveaux de densité massique sont très similaires, montrant une très bonne description des collisions. En effet, une coupe verticale de la densité moyenne du spray a été effectuée à une abscisse $x = 6cm$. Celle-ci nous permet de comparer précisément la densité moyenne obtenue par le suivi eulérien du spray et la projection eulérienne du spray lagrangien. Cette coupe est représentée sur la figure 4.5. Nous constatons une très bonne concordance entre le résultat obtenu par la méthode Lagrangienne de référence et par la méthode Eulérienne. On observe de même une augmentation de la densité du spray sur les bords du jet, ainsi qu'une diminution sur l'axe de symétrie de celui-ci. Ce phénomène est reproduit fidèlement par la méthode Eulérienne. De plus, il y a également une très bonne adéquation entre les vitesses moyennes des gouttes calculées par les deux méthodes, comme on peut le voir dans les figures 4.6 et 4.7. Seule la diffusion numérique explique l'élargissement de ces champs, la densité de masse devenant très petite dans des endroits où il n'y a pas de gouttes pour la simulation Lagrangienne. Afin de comparer la distribution de quantité de mouvement moyenne du spray consécutive aux collisions, une moyenne temporelle de la quantité

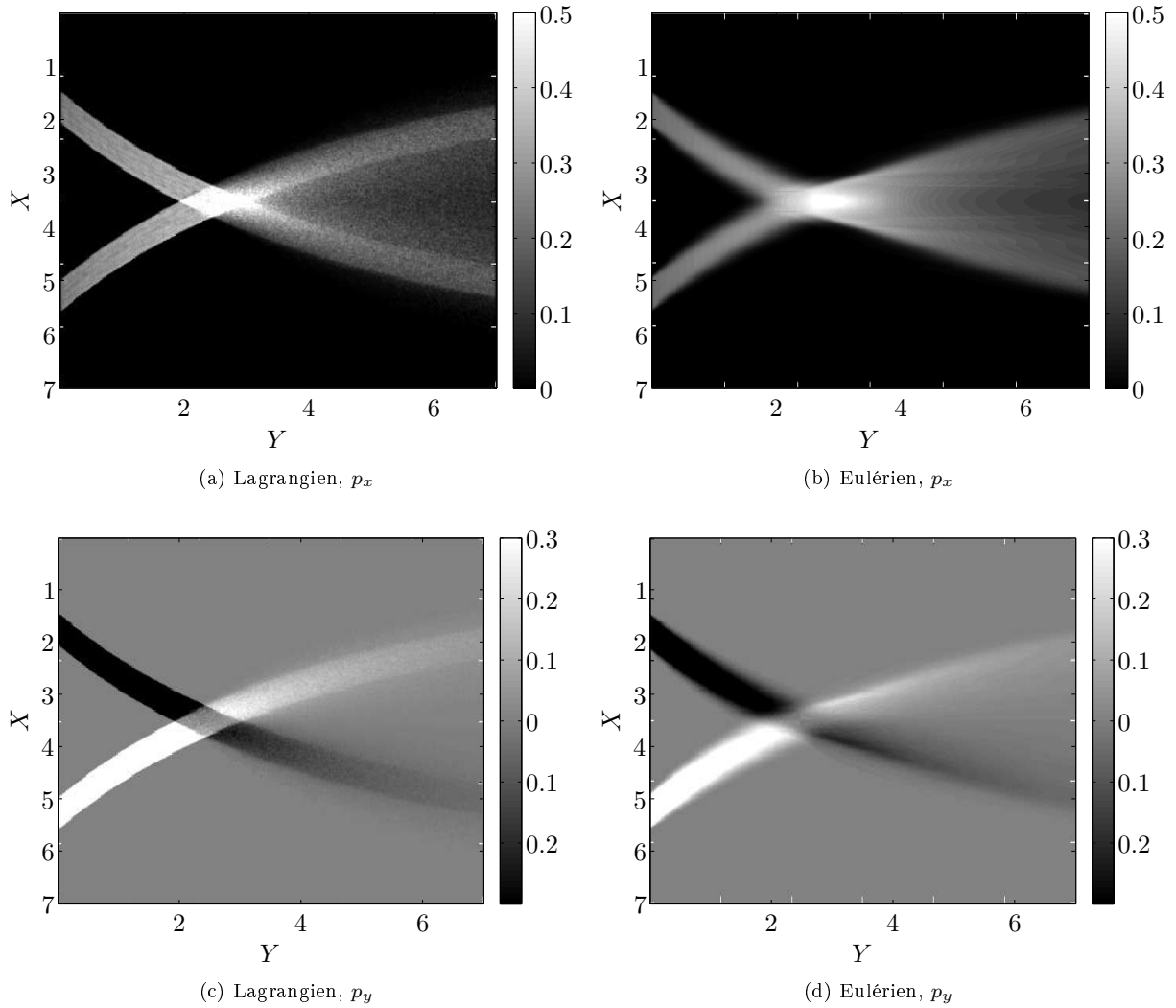


FIG. 4.8: Quantité de mouvement de gouttes pour la simulation de deux jets croisés bi-dispersés en utilisant l'approche DPS moyennée et projetée sur la grille Eulérienne. Les quantités de mouvement selon x sont en haut, selon y en bas. Le résultat obtenu par la méthode Lagrangienne est à gauche, par la méthode Eulérienne est présentée à droite.

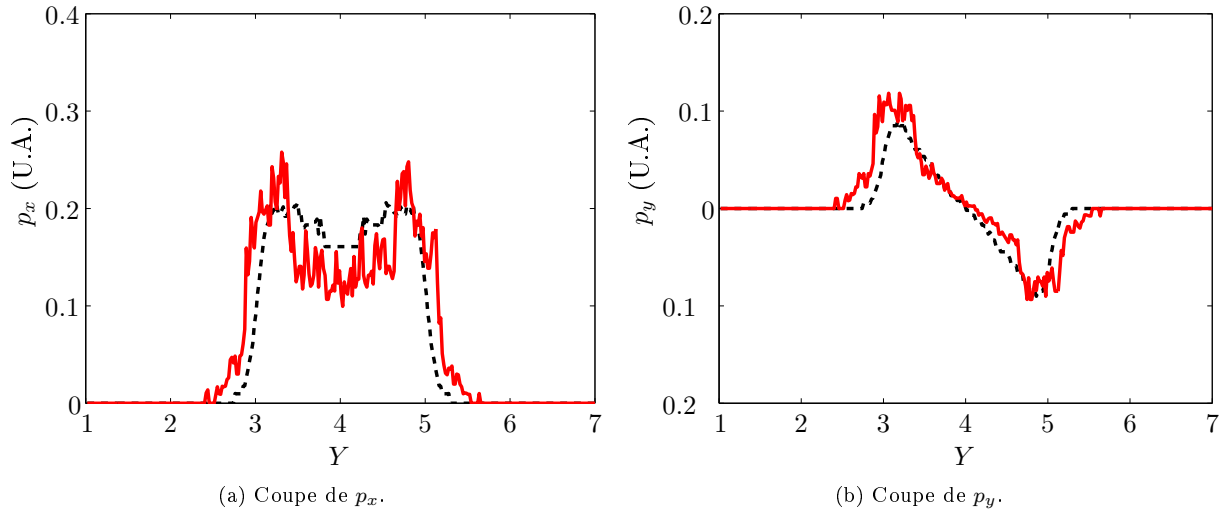


FIG. 4.9: Coupe verticale de la quantité de mouvement moyenne des gouttes (U.A.) à l'abscisse $x = 6\text{cm}$. La quantité de mouvement selon x est à gauche, selon y est à droite. Méthode Eulérienne : pointillés noirs, méthode Lagrangienne : ligne rouge.

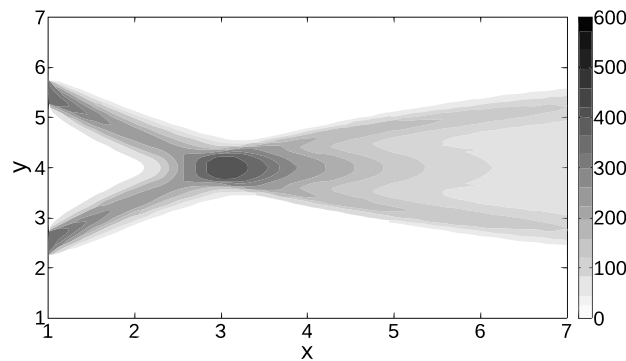


FIG. 4.10: Densité des gouttes Eulériennes de deux jets qui se croisent. Approche BGK avec le modèle multi-fluides multi-vitesses pour un nombre de Stokes $St = 5.29$, avec collision.

de mouvement selon x et selon y est présenté sur la figure 4.8. Une coupe verticale de cette quantité de mouvement (en unités arbitraires) sur x et sur y a été effectuée à $x = 6\text{cm}$. La quantité de mouvement ainsi obtenue sur x est représentée sur la figure 4.9a, et sur y par la figure 4.9b. Nous observons, comme pour la densité moyenne du spray, que la prise en charge Eulérienne du spray permet de rendre compte correctement de ces quantités de mouvement, que ce soit sur l'axe x ou y .

Il faut également comparer la simulation avec les collisions de Boltzmann à celle avec les collisions BGK. Le modèle numérique est décrit par Fox [110] avec la quadrature de de Chai-semartin *et al.* [106]. Le grand avantage du modèle BGK est son plus petit coût, car il est linéaire, alors que le modèle de Boltzmann est quadratique. Le temps de collision caractéris-

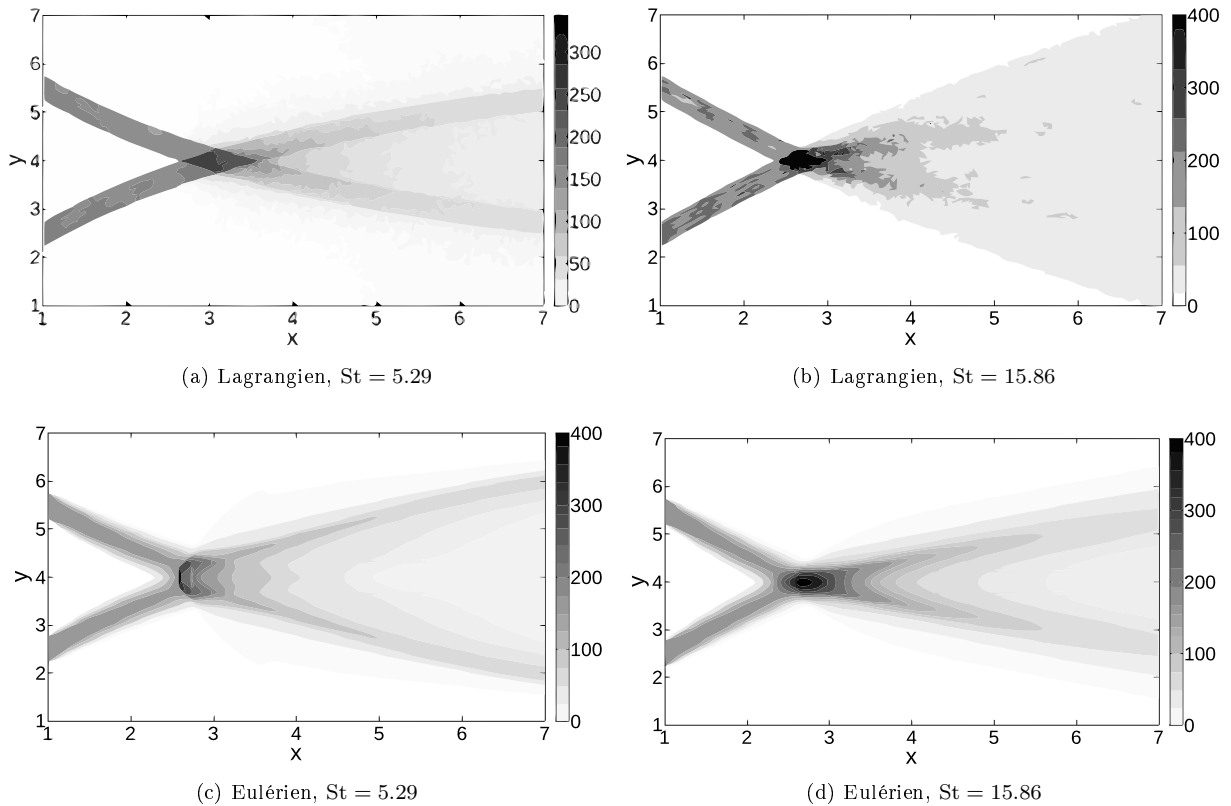


FIG. 4.11: Masse de gouttes pour la simulation de deux jets croisés bi-dispersés en utilisant l'approche DPS moyennée et projetée sur la grille Eulérienne (a) et par la méthode multi-fluides multi-vitesses (b). Les gouttes d'un nombre de Stokes $St = 5.29$ sont sur le côté gauche, les gouttes de nombre de Stokes $St = 15.86$ sur le côté droit.

tique adimensionné est donné par $\tau_{col} = L_0 / (2 d d_0 N_0 n \sqrt{\sigma_{eq}})$ où d est le diamètre adimensionné des gouttes, n est la densité adimensionnée du spray, et σ_{eq} est la dispersion de la distribution de l'équilibre définie par Fox [110]. Le même type de simulation sur une grille 200×200 a été effectué et donne des résultats similaires avec le modèle Eulérien et des collisions de Boltzmann, comme nous pouvons le voir en figure 4.10 pour la densité de masse.

4.2.5.2 Comparaison Lagrangienne/modèle multi-fluides pour un spray bidisperse

Pour le cas bidisperse on utilise des gouttes de différentes masses. Premièrement, le cas non collisionnant est bien reproduit comme on a pu le voir précédemment pour le cas monodisperse, ce qui est prévisible étant donné que cette configuration peut être considérée comme une superposition de deux cas monodisperses, les gouttes n'interagissant pas entre elles. La situation est différente pour le cas collisionnant : les gouttes collisionnent avec d'autres gouttes de même taille et avec des gouttes de taille différente (le seul effet qu'une méthode multi-fluides classique peut prendre en considération). Les vitesses ne sont pas présentées ici, mais les résultats sont

très proches de ceux obtenus pour le cas monodisperse. Concernant la densité de masse, la figure 4.11 montre les résultats pour les simulations Eulériennes et Lagrangiennes, séparant les gouttes en fonction de leur taille. Le comportement des gouttes petites et grosses est le même pour les deux simulations, comme on peut le voir sur la figure 4.11. Il est à noter que les collisions engendrent une propagation des gouttes dans une large zone, dont la largeur dépend du nombre de Stokes. Comparativement au cas monodisperse, le cas bidisperse apparaît comme étant plus collisionnant en raison des grandes différences de vitesse entre les gouttes de différentes tailles.

Le coût des simulations Lagrangiennes et Eulériennes est similaire dans le cas collisionnant, même si la simulation Lagrangienne a été réalisée sur un temps plus long dans le but d'établir des moyennes de temps pour une analyse statistique des résultats. Mais, cette configuration de l'écoulement est favorable à la méthode Lagrangienne, car elle est statistiquement stationnaire de telle façon que les moyennes d'ensemble peuvent être obtenues par une moyenne temporelle, une fois que le régime statistiquement stationnaire est atteint. En effet, l'implémentation des moyennes d'ensemble serait plus coûteuse car elle nécessiterait de répéter la même simulation 1325 fois (en incluant le régime transitoire), dans le but d'obtenir une précision statistique équivalente. La configuration de l'écoulement est également favorable aux simulations Eulériennes : en l'absence d'évaporation, et avec un nombre limité de tailles de gouttes, le nombre de sections est très petit. En effet, le coût de la méthode Eulérienne est quadratique, vis à vis du nombre de sections, tout comme le nombre de fonctions delta utilisé pour la quadrature. Il est à noter qu'aucun opérateur BGK de collision ne semble suffisamment précis pour les cas polydisperses ; par conséquent seul l'opérateur de Boltzmann peut être utilisé. Finalement, nous pouvons noter que le coût de calcul est très sensible à la densité locale de goutte pour le modèle Lagrangien (i.e. quadratique) contrairement au modèle Eulérien. Toutes ces considérations permettent des comparaisons entre des coûts calculs et la configuration choisie.

4.2.6 Conclusion

Dans cette partie nous avons étendu les sprays faiblement collisionnants au modèle Eulérien de de Chaisemartin [106], qui est capable de capturer à la fois la dynamique des sprays polydisperses et la ségrégation préférentielle, ainsi que le croisement de gouttes pour les sprays polydisperses. Nous avons mené une série de comparaisons détaillées avec le solveur Lagrangien pour une configuration $2D$ de croisement de jets et nous avons montré la capacité du modèle Eulérien à reproduire précisément les résultats Lagrangiens, à la fois pour les sprays monodisperses et bidisperses. Nous pouvons ainsi affirmer que nous avons validé le modèle proposé. Au final, nous notons que la représentation quadratique du terme de collision de Boltzmann peut facilement être étendu à des écoulements $3D$ et inclure d'autres paramètres physiques tels que la coalescence et le break-up.

4.3 Rôle de la ségrégation préférentielle sur la dynamique de flamme au coeur d'un spray polydisperse évaporant.

L'utilisation de formulations Euler/Euler robustes et précises pour la modélisation d'écoulement diphasiques réactifs est une étape majeure dans le cadre de la modélisation de la combustion turbulente utilisant des super calculateurs massivement parallèles. Par conséquent, la capacité des modèles multi-fluides Euler/Euler à effectuer toutes les étapes de la combustion turbulente de sprays a été testée et comparée à la formulation classique Lagrangienne. Le modèle multi-fluides et les schémas et algorithmes dédiés sont capables de caractériser correctement la dispersion du spray et sa ségrégation, ainsi que la dynamique d'évaporation guidée par topologie de la fraction massique de fuel liquide. La propagation et la structure d'une flamme en $2D$ et $3D$ dans un écoulement turbulent homogène isotrope forcé a été caractérisée, démontrant la capacité du modèle multi-fluides à simuler de tels écoulements réactifs, apportant des résultats ayant le même niveau d'exactitude que les solutions obtenues grâce au suivi Lagrangien des gouttes.

4.3.1 Introduction

La modélisation de combustion de spray est une étape fondamentale dans la conception de chambres de combustion, qui repose sur la capacité des outils numériques à rapidement simuler et à développer des moteurs à haut rendement et basses émissions polluantes. Cependant, un grand nombre de difficultés physiques et numériques existent à cause de la présence d'échelles

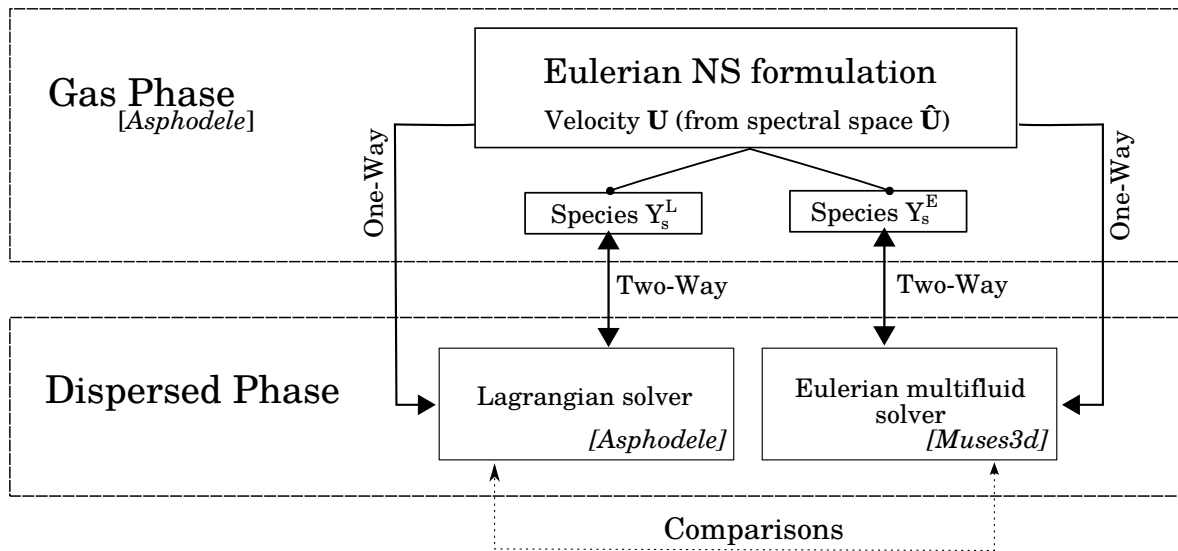


FIG. 4.12: Méthode de couplage entre les codes Eulériens et Lagrangiens. *Muses3D* est un solveur Eulérien pour la phase disperse, tandis que *Asphodele* est un solveur Lagrangien pour le spray et Eulérien pour le gaz.

de temps très différentes lorsque le gaz et la phase disperse se mélangent. Par conséquent, les modèles diphasiques nécessitent un grand nombre de développements et d'améliorations pour caractériser correctement les écoulements complexes à échelle industrielle dans des solveurs CFD. Dans de telles configurations, le gaz, considéré comme continu, est mieux représenté par une formulation Eulérienne. Cependant, dans le cadre d'écoulement en phase disperse, les particules et les gouttes peuvent être modélisées avec une formulation Eulérienne ou Lagrangienne ([117]). Ces deux descriptions sont actuellement très présentes, et ont montré leurs capacités dans plusieurs domaines distincts de simulation d'écoulements diphasiques. Les méthodes Lagrangiennes permettent une prise en charge efficace de la phase polydisperse, une grande efficacité numérique et une simplicité d'implémentation. Néanmoins, dans l'optique de la décomposition de domaines pour le calcul parallèle, cette formulation nécessite l'utilisation de systèmes de partitionnement dynamique très complexes et coûteux à mettre en place ([101]), afin de garantir une bonne répartition des calculs entre les processeurs. Les méthodes Eulériennes sont donc une alternative intéressante aux formulation Lagrangiennes, étant donné que celles-ci présentent l'avantage d'être facilement massivement parallélisables, mais nécessitent une attention particulière sur leur structure mathématique ainsi que sur leur diffusion numérique.

L'objectif de ce travail est d'effectuer les premières comparaisons entre la formulation Euler/Lagrange (EL) et la formulation Euler/Euler (EE) pour un écoulement réactif diphasique partiellement prémélangé. Afin de limiter au maximum les différentes interactions physiques entre l'écoulement, le spray et la flamme, une configuration simple a été sélectionnée : une

turbulence homogène isotrope forcée, dont les caractéristiques principales - l'énergie cinétique et l'échelle intégrale - ont été imposées [118] et restent statistiquement stationnaires durant la simulation grâce à un forçage de la turbulence. Dans cette étude, nous restreignons le gaz à rester à une masse volumique constante pour trois raisons. La première est que le forçage de la turbulence nécessite une résolution spectrale des équations de Navier-Stokes écrites à masse volumique constante. Ensuite, cela permet de ne coupler qu'un seul champ gazeux aux deux solveurs diphasiques distincts, ce qui nous permet de connaître toutes les caractéristiques de la turbulence, et ainsi d'évaluer et comparer l'impact d'une même turbulence sur la dispersion du spray, sur le mélange gazeux et enfin sur la combustion. Enfin, la combustion à fraction massique constante est généralement utilisée dans des études théoriques afin de supprimer l'impact de la dilatation des gaz sur le champ de vitesse gazeux. L'idée permettant de garder la masse volumique constante est de créer une flamme froide. Cela consiste en la résolution des lois d'Arrhenius basées sur la fraction massique des gaz brûlés plutôt que sur la température.

4.3.2 Simulations diphasiques

4.3.2.1 Modèles gazeux et diphasiques utilisés, méthodes numériques

L'ensemble des équations d'évolution sont couplées grâce à l'association de deux codes : *Asphodele* développé au CORIA (Phase gazeuse et solveur Lagrangien de spray) et *Muses3D* développé à EM2C (solveur Eulérien multi-fluides). La méthode de couplage utilisée est représentée sur la figure 4.12. Un premier système d'équations Eulériennes de conservation résout l'évolution du gaz, un second système d'équations Eulériennes multi-fluides de conservation est utilisé pour résoudre l'évolution du spray, tandis qu'un troisième jeu d'EDO correspond à la description Lagrangienne du spray. Des simulations simultanées utilisant une seule évolution gazeuse permet de faire des comparaisons précises de la dynamique du spray et de l'évaporation, pour les modèles EE et EL.

Les restrictions dues au forçage de la turbulence impliquent que la vitesse du gaz est évaluée dans l'espace spectral grâce à l'équation suivante :

$$\frac{\partial \hat{\mathbf{u}}}{\partial t} = \hat{\mathbf{a}} + \frac{f_\kappa}{\tau_f} \hat{\mathbf{u}} \quad , \quad (4.14)$$

où $\hat{\mathbf{a}}$ représente les contributions de Navier-Stokes pour les fluides incompressibles ([119]). La fonction de forçage f_κ , détaillée par Guichard *et al.* [118], est réelle et dépend du temps t et du nombre d'onde κ . Le principe de ce modèle est de relaxer le spectre simulé grâce à un solveur

spectral pour une certaine plage de nombre d'ondes faibles.

L'évolution du mélange air/fuel est détaillée dans l'espace physique de sorte qu'il puisse facilement être couplé avec les descriptions Lagrangiennes et Eulériennes du spray évaporant. L'équation d'évolution pour n'importe quelle espèce s (fuel (f), oxydant (o) ou gaz brûlés (b)) est donné par :

$$\frac{\partial Y_s^\alpha}{\partial t} + \frac{\partial Y_s^\alpha u_i}{\partial x_i} = D \frac{\partial^2 Y_s^\alpha}{\partial x_i^2} + \dot{\omega}_s^\alpha + \delta(s-f) \dot{d}_f^\alpha + \dot{\epsilon}_s^\alpha, \quad (4.15)$$

où D est le coefficient de diffusion des espèces, et la vitesse u_i est obtenue grâce à la transformée de Fourier inverse de la vitesse dans l'espace spectral : $u_i = FT^{-1}(\hat{u}_i)$.

Deux ensembles d'équations gouvernant les espèces totalement indépendantes sont résolues : Y_s^L qui sont couplés avec la description Lagrangienne du spray, et Y_s^E qui sont couplés avec le solveur Eulérien multi-fluides (voir figure 4.12). Seule la vitesse du gaz est commune aux deux formalismes. Le taux de réaction des espèces considérées est noté $\dot{\omega}_s^\alpha$. Ce taux de réaction est obtenu en utilisant une loi d'Arrhenius avec une cinétique à une étape $f + \nu o = (1 + \nu)b$, avec $\nu = 15$ dans notre configuration, ce qui est équivalent au rapport stoechiométrique du n-heptane avec l'air. Comme la densité du gaz est constante, la température reste constante, comme décrit dans le chapitre 2.4.3.3. En effet, une température artificielle T_a^α , estimée en utilisant la fraction massique de gaz brûlé $T_a^\alpha = T_0(1 + 4Y_b^\alpha)$ a été utilisée, avec T_0 la température des gaz frais. Le couplage des solveurs de phases disperses (Lagrangien et Eulérien) est effectué via les termes sources de fuel \dot{d}_f^L et \dot{d}_f^E respectivement. Une correction artificielle $\dot{\epsilon}_s^\alpha$ permet de conserver le mélange à densité constante en supprimant une partie de la fraction massique gazeuse proportionnellement à la masse locale $\dot{\epsilon}_s^\alpha = -Y_s^\alpha \dot{d}_f^\alpha$. Les équations d'évolution des fractions massiques sont résolues par un Runge-Kutta d'ordre 3, qui est également utilisé pour le solveur spectral des moments. Un schéma de différence finie d'ordre 4 est utilisé pour l'estimation des dérivées spatiales. Les conditions limites utilisées sont périodiques, celles-ci étant imposées par le solveur spectral.

Comme expliqué dans l'introduction, une approche Lagrangienne discrète a été utilisée pour prendre en charge le spray dans l'oxydant gazeux. Notons a_k , \mathbf{v}_k et \mathbf{x}_k le diamètre, la vitesse et la position de chaque goutte respectivement. Les relations d'évolution de ces paramètres sont les suivantes :

$$\frac{d\mathbf{x}_k}{dt} = \mathbf{v}_k, \quad (4.16) \quad \frac{d\mathbf{v}_k}{dt} = \frac{(\mathbf{u}(\mathbf{x}_k, t) - \mathbf{v}_k)}{\beta_k^{(v)}}, \quad (4.17) \quad \frac{da_k^2}{dt} = -\frac{a_k^2}{\beta_k^{(a)}}. \quad (4.18)$$

Le vecteur \mathbf{u} représente la vitesse du gaz, pris à la position de la goutte \mathbf{x}_k . Le terme de droite de l'équation 4.17 correspond à la force de traînée appliquée à la goutte, où $\beta_k^{(v)}$ est le temps

caractéristique de relaxation $\beta_k^{(v)} = \tau_p a_k^2 / a_0^2$. Le diamètre de la goutte k est a_k , a_0 étant le diamètre initial des gouttes du spray monodisperse. Le temps caractéristique balistique initial des gouttes est noté τ_p . A la stoechiométrie, la fraction massique initiale de fuel liquide reste inférieure à 10%, la pression peut être considérée constante. Dans de telles configurations, le niveau de saturation permettant de déterminer le taux d'évaporation dépend principalement de la température du gaz autour de la goutte. Afin de corréliser l'évaporation du spray et la propagation de la flamme, la température fictive T_a^α a été utilisée afin de déterminer le nombre de transfert de masse :

$$B = \frac{T_a^\alpha - T_0}{T_b - T_0} \left(\exp \left(\frac{A a_0^2}{\tau_v} \right) - 1 \right) , \quad (4.19)$$

où A est une constante dépendant des propriétés du gaz et du liquide, et où $T_b = T_a(Y_b = 1)$ est la température des gaz brûlés. B est introduit dans l'expression du taux d'évaporation à travers le temps d'évaporation $\beta_k^{(a)}$ défini par $\beta_k^{(a)} = A a_k^2 / \ln(1 + B)$. Le terme de couplage $\dot{d}_f^{L(n)}$ affecte la fraction massique de fuel gazeux grâce à la distribution de la masse Lagrangienne sur le n^{ieme} noeud de la grille Eulérienne. Ce terme Eulérien est déterminé par $\dot{d}_f^{L(n)} = -\rho_d \frac{\pi}{4} \frac{1}{V} \sum_k \alpha_k^{(n)} a_k^3 / \beta_k^{(a)}$, où $\alpha_k^{(n)}$ est le coefficient de distribution de la k^{ieme} goutte sur le noeud n . Si nous considérons tous les noeuds situés autour de la goutte k , nous avons $\sum_n \alpha_k^{(n)} = 1$ afin de conserver la masse lors du couplage EL. Les valeurs de $\alpha_k^{(n)}$ sont déterminées à partir de la distance entre la goutte et le noeud considéré.

Une autre approche est de considérer une description Eulérienne du spray, en utilisant la méthode multi-fluides, développée par Laurent et Massot [11, 120]. Cette méthode a déjà été utilisée pour des nombres de Stokes faibles et modérés. Une comparaison détaillée de la dispersion du spray dans un champ gazeux perturbé avec ces deux méthodes a été effectuée par Kah *et al.* [121], ainsi que par de Chaisemartin [17] en 2D, Freret *et al.* [122] pour les comparaisons 3D. La méthode multi-fluides Eulérienne (EMM) est dérivée d'une discrétisation mono-cinétique. L'espace des phases de la taille des gouttes est discrétisé en plusieurs sections, qui sont régies par un système de lois de conservation pour chaque intervalle $[S_k, S_{k+1}]$:

$$\begin{cases} \partial_t m^k + \partial_{\mathbf{x}} \cdot (m^k \bar{\mathbf{v}}^k) = -(E_1^{(k)} + E_2^{(k)}) m^k + E_1^{(k+1)} m^{(k+1)}, \\ \partial_t (m^k \bar{\mathbf{v}}^k) + \partial_{\mathbf{x}} \cdot (m^k \bar{\mathbf{v}}^k \otimes \bar{\mathbf{v}}^k) = -(E_1^{(k)} + E_2^{(k)}) m^k \bar{\mathbf{v}}^k + E_1^{(k)} m^{(k+1)} \bar{\mathbf{v}}^{(k+1)} + m^k \bar{\mathbf{F}}^k, \end{cases} \quad (4.20)$$

où m^k est la concentration de la masse des gouttes, $\bar{\mathbf{v}}^k$ est la vitesse moyenne de la k^{ieme} section, $E_1^{(k)}$ sont les termes d'échanges entre les sections successives, et $E_2^{(k)}$ sont les termes d'échange

avec la phase gazeuse. La moyenne des forces extérieures est notée $\bar{\mathbf{F}}^k$. Le couplage de masse avec la phase porteuse est donnée par $d_f^E = \sum_{k=1}^{N_S} m^k E_2^{(k)}$, où N_S est le nombre total de sections. Un algorithme de splitting de Strang sépare le transport dans l'espace physique de l'évolution dans l'espace des phases. Le schéma numérique utilisé induit un très faible niveau de diffusion, et est capable de prendre en compte les singularités [17].

4.3.2.2 Configuration DNS et parallélisation

Dans un premier temps, la phase gazeuse turbulente évolue de sorte que ses propriétés statistiques sont stationnaires, grâce à la méthode de forçage FC-DFS [118], qui conserve l'énergie cinétique moyenne à une valeur imposée. Toutes les caractéristiques de la turbulence, ainsi que les paramètres de référence, sont identiques à ceux utilisés par Reveillon et Demoulin [102]. Pendant cette première étape, les particules non évaporantes monodispersées sont dispersées aléatoirement dans le domaine, avec une vitesse initiale nulle. Les forces de traînée vont les mettre en mouvement par la suite. Les propriétés de la turbulence étant fixées, les simulations sont effectuées en imposant le paramètre τ_p . Deux nombres de Stokes $St = \tau_p/\tau_\kappa$, basés sur le temps turbulent de Kolmogorov τ_κ , ont été utilisés : $St = 0.2$ et $St = 1$. Dans le cas 2D, le maillage utilisé dans *Asphodele* est de 256^2 , tandis que celui utilisé dans *Muses3d* est de 600^2 . En 3D, le maillage est identique pour les deux, et est de 128^3 . La discrétisation des sections en taille de goutte utilisée pour l'évaporation dans le modèle multi-fluides est de 10. Les deux codes de calcul ont été optimisés et parallélisés. Le solveur Eulérien *Muses3d* obtient un scaling proche de 1 sur 512 processeurs du cluster Certainty, du Center of Turbulent Research (Université de Stanford, Californie).

4.3.3 Résultats et discussions

L'objectif ici est d'effectuer des comparaisons, aussi bien qualitatives que quantitatives, entre les formulations Lagrangiennes et Eulériennes. Les propriétés intrinsèques à la formulation Lagrangienne permettent de considérer cette méthode comme la référence. L'évaluation du solveur Eulérien multi-fluides est effectuée en trois parties :

1. la capture de la dispersion du spray et sa ségrégation,
2. une évaluation correcte de la topologie de fuel gazeux après évaporation,
3. la caractérisation de la structure de flamme ainsi que ses propriétés.

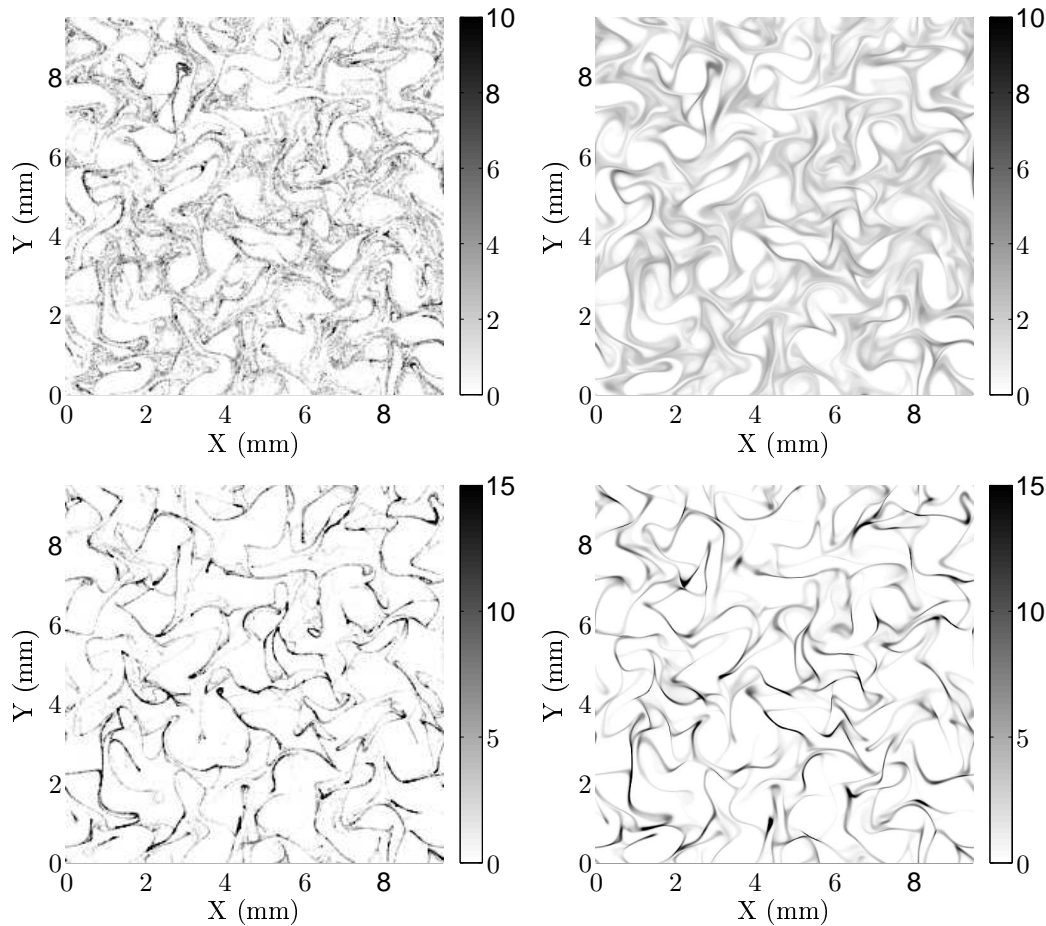


FIG. 4.13: Densité de gouttes obtenue par la formulation Lagrangienne (à gauche) et Eulérienne (à droite) pour un nombre de Stokes $St = 0.2$ (en haut) et $St = 1$ (en bas) pour un temps suffisamment long pour que les tourbillons se retournent un grand nombre de fois, une fois que les gouttes ont atteint un équilibre dynamique.

4.3.3.1 Dispersion et ségrégation du spray

La description Eulérienne multi-fluides de la dynamique du spray est présentée dans cette section pour deux nombres de Stokes distincts, basés sur le temps turbulent de Kolmogorov : $St = 0.2$, qui correspond à de petites gouttes qui se mélangeront dans les plus petites structures turbulentes (figure 4.13-haut); $St = 1$, correspondant à de grosses gouttes, soumises à de fortes ségrégations, et qui ne sont pas affectées par les plus petites échelles turbulentes, mais suffisamment petites pour limiter leur croisement que le modèle Eulérien ne peut capturer (figure 4.13-bas). Dans ce cas, le spray est éjecté du centre des tourbillons et est concentré dans les zones de plus faible vorticit . Ce cas est donc particuli rement adapt  pour tester la robustesse de la m thode multi-fluides. Un nombre de Stokes plus  lev  (sup rieur   l'unit ) induit l' jection des gouttes des tourbillons gr ce   leur inertie, et le croisement de leurs trajectoires appara t

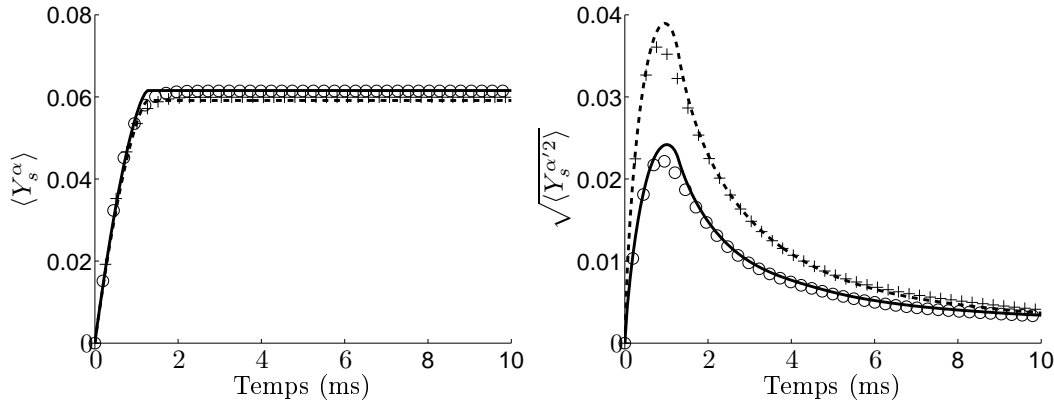


FIG. 4.14: Évolution temporelle de la moyenne (gauche) et de la RMS (droite) de la fraction massique de fuel gazeux des simulations Eulériennes (Y_f^E - symboles) et Lagrangiennes (Y_f^L - lignes), pour un nombre de Stokes $St = 0.2$ (\circ /lignes) et $St = 1$ ($+$ /pointillés).

clairement, comme montré par Reveillon et Demoulin [102]. Afin d'évaluer la description multi-fluides de la dynamique du spray (conditionnée par sa taille), les champs Eulériens multi-fluides de la densité de gouttes sont comparés qualitativement à la densité Eulérienne déterminée, en considérant les gouttes accumulées autour de chaque noeud, pour le même nombre de Stokes, et au même instant, ce qui correspond à une dizaine de temps de retournement de tourbillons (figure 4.13). Les comparaisons qualitatives et quantitatives peuvent être effectuées en observant les zones vides de gouttes ainsi que le niveau de densité. La répartition de ces zones peu chargées en gouttes, obtenues par la formulation Lagrangienne sont très fidèlement reproduites par la méthode multi-fluides. De plus, nous pouvons voir que le champs de densité Eulérienne pour des nombres de Stokes plus élevés présente une excellente concordance avec la répartition Lagrangienne des gouttes (figure 4.13).

4.3.3.2 Évaporation du spray

Une fois l'équilibre dynamique atteint entre le champ gazeux turbulent et la phase dispersée, le temps relatif est réinitialisé à 0 et l'évaporation est activée. Tout d'abord, la chimie n'est pas activée, ce qui permet une comparaison du mélange de fuel évaporé entre les deux formalismes. Les études de mélanges habituelles consistent en la caractérisation de la moyenne et de la RMS⁷ de la fraction de mélange, qui est équivalente à la fraction massique de fuel gazeux dans le cas non réactif. Le temps caractéristique d'évaporation (lorsque les gouttes sont placées dans un gaz à la température des gaz brûlés) est fixé à $\tau_v = 1.26 \text{ ms}$, ce qui correspond à 1.5 temps de retournement de tourbillon. Notons que dans le cas de la propagation d'une flamme, le délai

⁷Root Mean Square

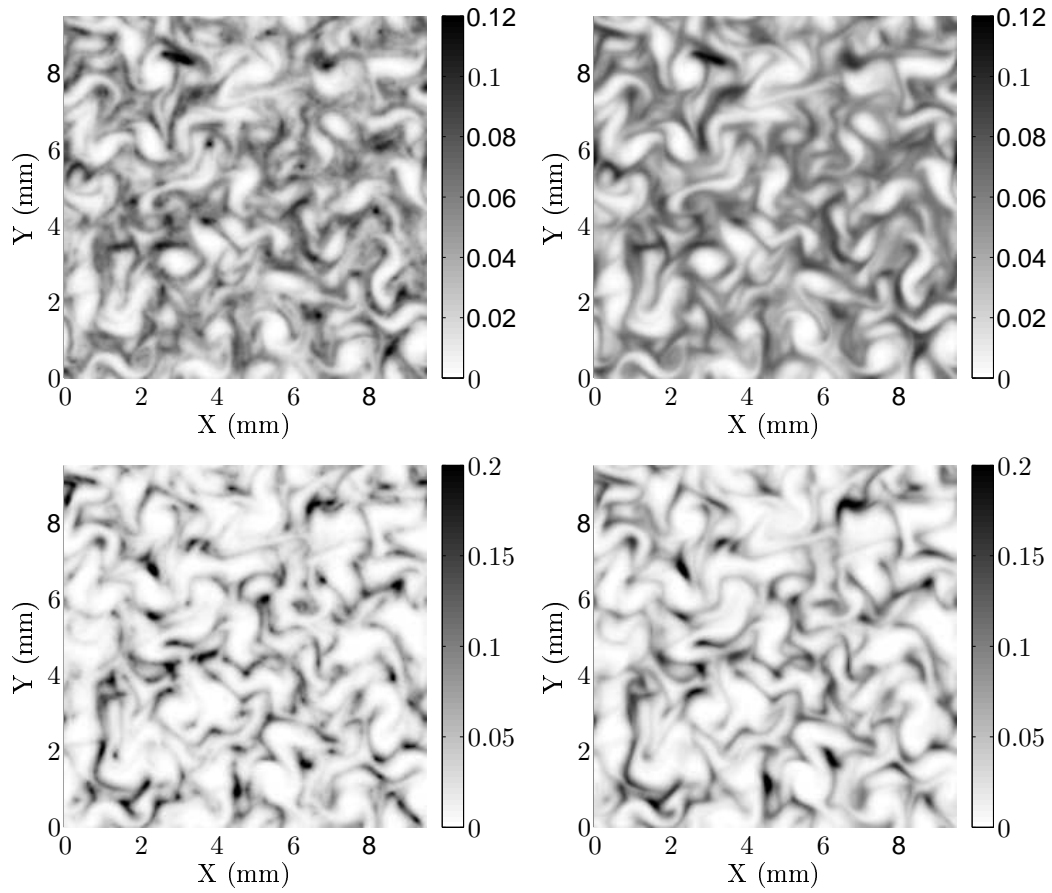


FIG. 4.15: Fraction massique du fuel gazeux obtenu par la formulation Lagrangienne (Y_f^L - gauche) et Eulérienne (Y_f^E - droite) pour un nombre de Stokes $St = 0.2$ (en haut) et $St = 1$ (en bas), à un temps $t = 0.63ms$, soit la moitié du temps caractéristique d'évaporation.

d'évaporation augmente, les gouttes étant initialement dans les gaz frais. Le temps d'évolution de la fraction massique moyenne de vapeur de fuel $\langle Y_s^\alpha \rangle$ issu de l'évaporation du spray placé dans les gaz chaud est tracé sur la figure 4.14 (à gauche). Le nombre de Stokes (et donc la ségrégation préférentielle) n'a aucun effet sur l'évolution de la fraction massique de fuel gazeux moyenne. Cependant, il subsiste une légère variation de la fraction massique de fuel vapeur finale. Cette variation est due à l'hypothèse de densité constante, qui implique une adaptation locale du mélange et qui génère ainsi une erreur de l'ordre de 5%, dépendant de la ségrégation locale de spray. Néanmoins, le point intéressant est que les formulations Lagrangiennes et Eulériennes donnent des résultats similaires. La caractéristique importante dans le cadre de l'étude de la combustion turbulente est de capturer correctement la RMS de la fraction de mélange, qui est un paramètre essentiel dans n'importe quel modèle de combustion turbulente. Nous pouvons voir sur la figure 4.14 (à droite) que l'EMM capture correctement les fluctuations de la fraction massique de fuel gazeux, quelle que soit la dynamique des gouttes. La forte ségrégation dans le cas où le nombre de Stokes $St = 1$ impacte de manière visible la RMS de la fraction de mélange. La capacité de l'EMM à capturer ces fluctuations est très importante. Sur la figure 4.15, nous pouvons voir une capture de la fraction massique de fuel gazeux obtenue par la formulation Lagrangienne et Eulérienne, pour les deux nombres de Stokes considérés, à un temps correspondant à la moitié du temps caractéristique d'évaporation. Le fait que le spray soit initialement monodispersé souligne la qualité des résultats obtenus. En effet, un spray monodispersé correspond à une fonction de Dirac dans l'espace des phases, ce qui est l'un des cas les plus difficiles à simuler avec un modèle multi-fluides, mais qui, ici donne de très bons résultats. L'extension à un spray initialement polydispersé sera probablement un cas plus simple et favorable au modèle Eulérien multi-fluides.

4.3.3.3 Combustion turbulente du spray

Afin d'estimer l'EMM dans le cadre de la combustion de spray, une troisième analyse a été effectuée. Pour ce faire, un petit noyau de gaz brûlés est disposé au centre du domaine de simulation. Comme les gaz sont chauds, les gouttes aux alentours s'évaporent et une flamme apparaît. Une fois encore le temps relatif de l'étude est réinitialisé à 0, lorsque les gouttes sont dans un état d'équilibre dynamique avec le gaz. L'évolution du front de flamme à 3 temps distincts a été représentée sur la figure 4.16 pour les deux formalismes, dans le cas le plus difficile ($St = 1$). Il est évident que le modèle EMM est capable de caractériser la dispersion du spray ainsi que son évaporation de telle sorte que la propagation de la flamme soit correctement capturée en comparaison du cas de référence Lagrangien. Nous pouvons déduire la même chose

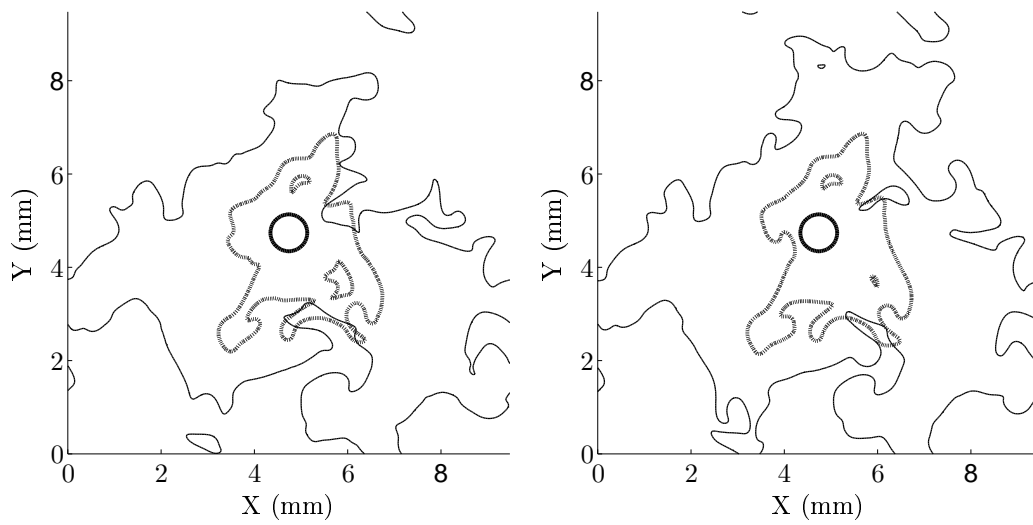


FIG. 4.16: Évolution du front de flamme obtenu par le calcul Lagrangien (gauche), Eulérien (droite), pour un nombre de Stokes $St = 1$ à $t = 0$ (ligne grasse), $t = 6ms$ (ligne pointillée) et $t = 12ms$ (ligne continue).

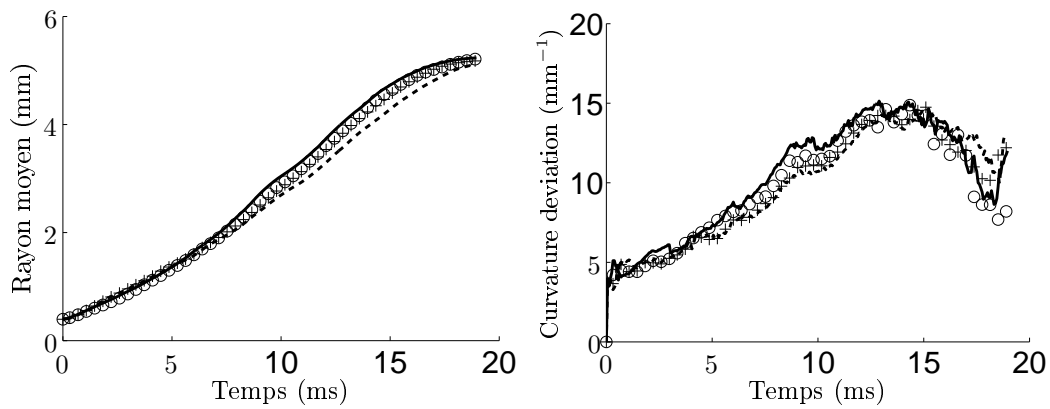


FIG. 4.17: Évolution temporelle du rayon moyen de la flamme (gauche) et sa courbure (droite), pour la formulation Lagrangienne (lignes) et Eulérienne (symboles) pour un nombre de Stokes $St = 0.2$ (lignes et cercles) et $St = 1$ (ligne pointillée et +).

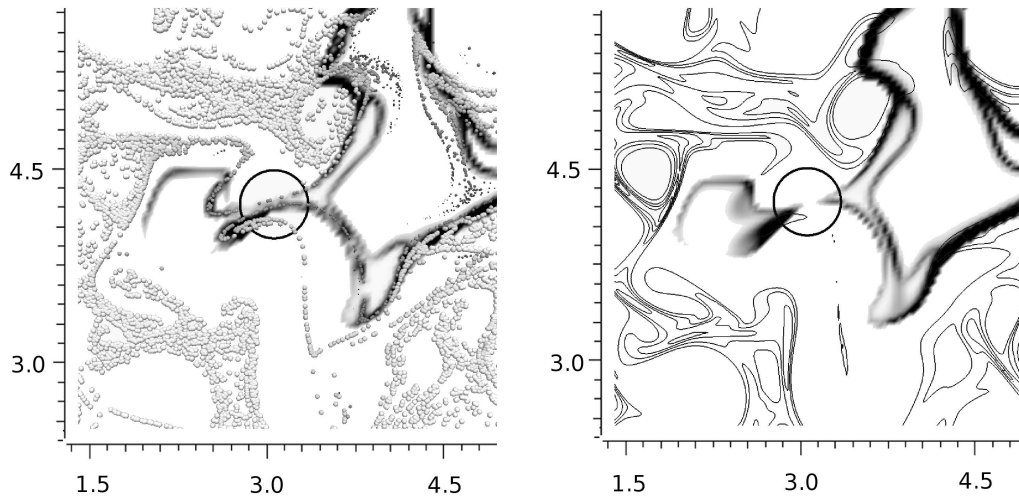


FIG. 4.18: Zoom sur une interaction flamme/flamme conduisant à une extinction locale de celle-ci. Le taux de réaction est tracé avec les gouttes (gauche) et avec l'iso-contour de la densité Eulérienne (droite) pour un nombre de Stokes $St = 0.2$ à un temps $t = 4.67ms$.

du cas où $St = 0.2$ qui n'a pas été tracé ici. Une analyse quantitative de l'évolution du front de flamme a été tracée sur la figure 4.17. Sur la figure de gauche, l'évolution temporelle du rayon moyen de flamme a été tracé. Dans le cas des simulations Lagrangiennes, il est possible d'observer une propagation plus rapide de la flamme lorsque les gouttes sont moins ségréguées. La différence est certes faible, mais reste visible. Le modèle EMM présente quelques difficultés à rendre compte de cette différence mais la structure et la position globale de la flamme restent correctement capturées. Une autre conclusion importante peut être faite concernant l'évolution temporelle de la courbure de flamme avec ces deux formalismes (figure 4.17). La structure de la flamme reste contrôlée principalement par la turbulence et par la ségrégation initiale des gouttes, mais le taux d'évaporation est, quant à lui, contrôlé par la méthode EMM. Nous pouvons en déduire que les interactions flamme/EMM sont correctement prises en charge. C'est un résultat encourageant dans la mesure où c'est la première fois que la méthode EMM est appliquée à la simulation de la combustion turbulente de spray.

Un exemple intéressant d'extinction locale de flamme a été tracé sur la figure 4.18, due à une interaction flamme/flamme. La structure de flamme est identique dans les deux cas, mais l'extinction dans le cas Lagrangien apparaît quelques micro-secondes après l'EMM. Cependant, comme il a été montré auparavant, ces légers écarts n'impactent que très peu sur la structure globale de la flamme et sur ses propriétés (vitesse de propagation et courbure). Sur la même figure, il est possible de voir que le modèle EMM est capable de capturer les zones de gouttes fortement ségréguées, avec le spray qui se répartit sur une ligne fine correspondant à une zone de

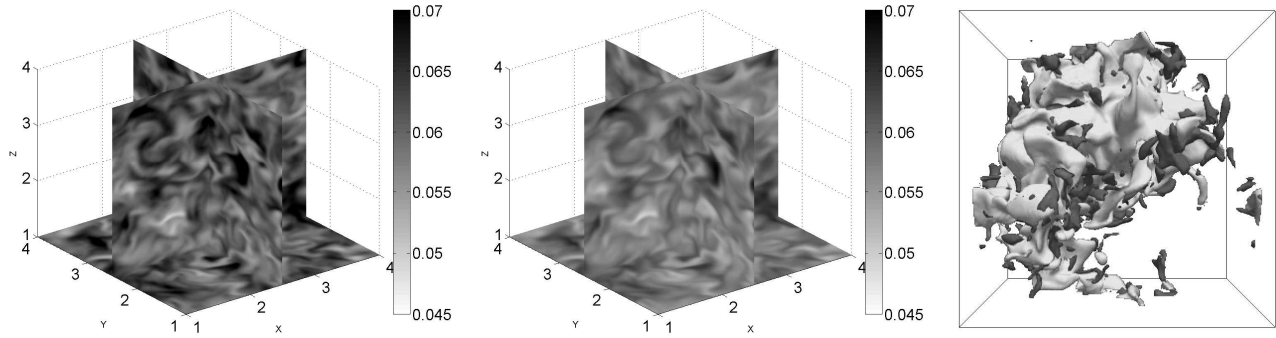


FIG. 4.19: Fraction massique de fuel gazeux obtenu par la formulation Lagrangienne (Y_f^L - gauche) et Eulérienne (Y_f^E - milieu) pour un nombre de Stokes $St = 0.2$ à $t = 6.3$ ms. Capture de l'iso-température/iso- Y_f (droite) montrant le développement de la flamme et des zones d'évaporation avec la description multi-fluides Eulérienne du spray à $t = 12.6$ ms.

vorticité locale très faible. Il est aussi possible d'observer que les structures de flamme complexes sont correctement capturées. Par exemple, sur la partie en haut à droite de la figure, un double front de flamme apparaît, ce qui correspond à une première flamme prémélangée suivie par une flamme de diffusion. De telles flammes ont été analysées par Reveillon et Vervisch [81]. Il est encourageant, d'un point de vue de la combustion turbulente, de voir que l'EMM est capable de reproduire de telles structures de flamme.

Dans le cas de la configuration 3D, nous pouvons remarquer que la comparaison de la fraction massique de fuel gazeux, dans le cas purement évaporant, présente une très forte concordance entre les deux simulations (figures 4.19 à gauche et au milieu). La figure 4.19 à droite représente une capture d'une flamme 3D polydisperse (à cause de l'évaporation) où la dynamique du spray est prise en charge par le modèle Eulérien multi-fluides. Ce couplage spécifique entre la formulation Eulérienne multi-fluides et la formulation Lagrangienne a permis d'évaluer la possibilité de rendre compte correctement des propriétés les plus importantes d'un écoulement diphasique turbulent réactif avec le modèle Eulérien. Le modèle Eulérien est donc capable de reconstituer fidèlement la ségrégation, le micro-mélange turbulent de vapeur de fuel évaporé, mais aussi la structure de flamme et les régimes de combustion. Dans cette étude, un certain nombre d'hypothèses ont dû être posées, la plus importante étant de considérer une densité gazeuse constante. Cependant, le modèle EMM n'est pas basé sur cette hypothèse, et sa capacité à rendre compte des mêmes phénomènes en milieu dilatable ou compressible ne devrait pas modifier sa fonctionnalité. Une étude en milieu dilatable sera effectuée à l'avenir.

4.4 Simulation d'un spray initialement polydisperse sur la dynamique de flamme.

4.4.1 Introduction

Les phénomènes présents selon la taille initiale des gouttes, dans le cas d'un spray initialement monodispersé, sont très différents selon que le nombre de Stokes critique est atteint ou non [104]. Dans un champ turbulent homogène isotrope, les gouttes seront d'autant plus ségréguées que leur nombre de Stokes est élevé. Cette ségrégation a un impact direct sur la topologie de fuel gazeux après son évaporation, et par conséquent sur la structure de la flamme qui se propagera dans ce milieu. La capacité du modèle Eulérien multi-fluides à rendre compte de ces phénomènes et aussi de la propagation d'un front de flamme dans ce milieu a été démontrée. La simulation d'un spray initialement polydisperse, en l'occurrence suivant une loi log-normale, permet une simulation plus réaliste. En effet, les sprays issus des injections, après atomisation, suivent une telle loi. Il a donc paru naturel de tenter de montrer que le modèle Eulérien multi-fluides est apte à simuler de tels sprays dans des écoulements turbulents réactifs. Une comparaison précise entre le modèle multi-fluides et un modèle Lagrangien DPS a été effectuée.

Cependant, de par la nature même d'un spray polydispersé, il est très coûteux de faire des comparaisons statistiques entre ces deux formalismes. En effet, afin d'obtenir une loi statistiquement exploitable, le nombre de gouttes par maille est nécessairement élevé, de l'ordre de la centaine, contrairement au cas monodispersé [104] qui ne nécessitait qu'une seule goutte par maille en moyenne. Les algorithmes de résolution Lagrangiens ont donc dû être optimisés pour pouvoir simuler de tels cas. La capacité à simuler de telles densités de gouttes avec le modèle DPS a permis de comparer par la suite l'évolution qualitative et quantitative du champ de fraction massique de fuel, dans le cas d'une évaporation dans un milieu turbulent. Cela nous a permis, en conclusion de cette étude, la comparaison de la propagation d'un front de flamme dans ce milieu. Ainsi, il est possible de voir jusqu'à quel point le modèle Eulérien multi-fluides est capable de rendre compte de ce type de physique.

Nous travaillons ici en densité constante, ce qui nécessite quelques adaptations de la loi d'évaporation ainsi que de la chimie. Ces modifications sont identiques à celles effectuées par Freret *et al.* [104].

Section	Diamètre ($\times d_0$)	Nombre de Stokes	Nombre de gouttes dans la section par maille
1	0.15	$6.10 \cdot 10^{-3}$	0
2	0.45	$5.50 \cdot 10^{-2}$	15
3	0.75	0.153	27
4	1.05	0.299	22
5	1.35	0.495	14
6	1.65	0.739	8
7	1.95	1.03	5
8	2.25	1.37	2
9	2.55	1.76	1
10	2.85	2.20	0

TAB. 4.1: Récapitulatif du diamètre initial des gouttes de chaque section et de leur nombre de Stokes équivalent.

4.4.2 Simulations diphasiques

4.4.2.1 Configuration DNS et parallélisation

Dans un premier temps, la phase gazeuse turbulente évolue de sorte que ses propriétés statistiques sont stationnaires, grâce à la méthode de forçage FC-DFS [118], qui conserve l'énergie cinétique moyenne à une valeur imposée. Toutes les caractéristiques de la turbulence, ainsi que les paramètres de référence, sont identiques à ceux utilisés par Reveillon et Demoulin [102]. Pendant cette première étape, les particules non évaporantes polydispersées, selon une loi log-normale, sont dispersées aléatoirement dans le domaine, avec une vitesse initiale nulle. Les forces de traînée vont les mettre en mouvement par la suite. Les propriétés de la turbulence étant fixées, les simulations sont effectuées en imposant le paramètre τ_p . Le nombre de Stokes d'une goutte de diamètre d_0 est $St = \tau_p/\tau_\kappa = 0.2714$. Les gouttes sont distribuées dans 10 sections, dont les diamètres sont répertoriés dans le tableau 4.1. Les nombres de Stokes des gouttes de chacune de ces sections sont dans ce même tableau. Les trois dernières sections sont au delà du nombre de Stokes critique, les sept premières sont en deçà.

Les dimensions des domaines $2D$ sont de $9.46mm \times 9.46mm$ discrétisés en 512^2 , et de $9.46mm \times 9.46mm \times 9.46mm$ discrétisés en 128^3 en $3D$.

4.4.3 Résultats et discussions

L'objectif ici est d'effectuer des comparaisons, aussi bien qualitatives que quantitatives, entre les formulations Lagrangiennes et Eulériennes. Les propriétés intrinsèques à la formulation Lagrangienne permettent de considérer cette méthode comme la référence. L'évaluation du solveur Eulérien multi-fluides est effectuée en trois parties :

1. la capture de la dispersion du spray et sa ségrégation,

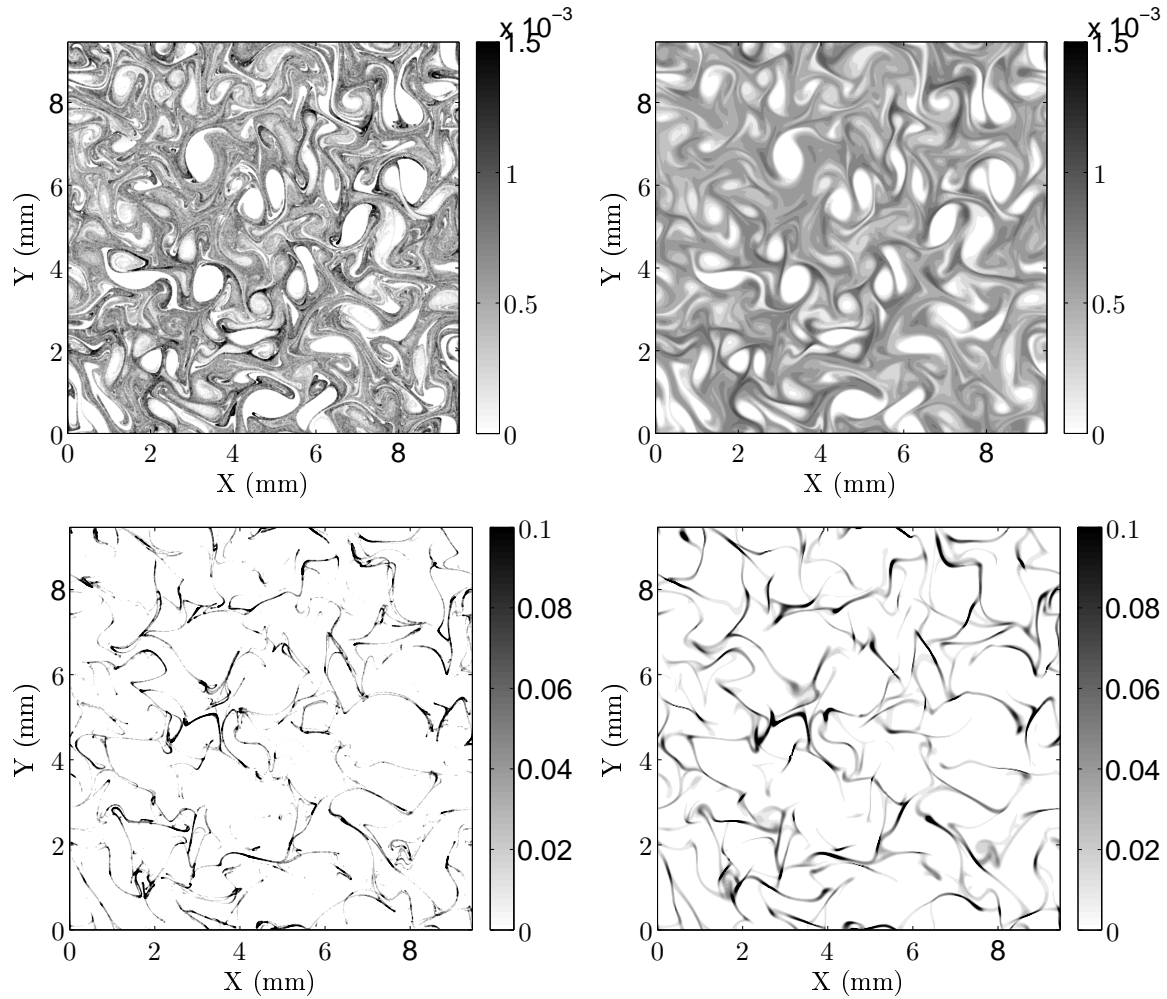


FIG. 4.20: Densité Eulerienne 2D de gouttes dans le cas Lagrangien (à gauche) et Eulerien (à droite) pour la deuxième section (en haut) ainsi que la huitième (en bas) au temps $t = 12.6 \text{ ms}$.

2. une évaluation correcte de la topologie de fuel gazeux après évaporation
3. la caractérisation de la structure de flamme ainsi que ses propriétés.

4.4.3.1 Dispersion et ségrégation du spray polydispersé

Dans la mesure où les gouttes n'interagissent pas entre elles – même indirectement grâce au couplage 1-way – chaque section de diamètre de goutte peut être considérée indépendamment des autres. Ainsi, les sections dont les gouttes présentent un nombre de Stokes très faible ne vont faire apparaître qu'une faible ségrégation, de manière similaire à celle observée par Freret *et al.* [104]. Les sections dont les gouttes possèdent un nombre de Stokes élevé vont se ségréguer de manière importante. Afin d'observer ces deux principaux phénomènes, la décision a été prise d'étudier la section 2 (nombre de Stokes faible) ainsi que la section 8 (nombre de Stokes

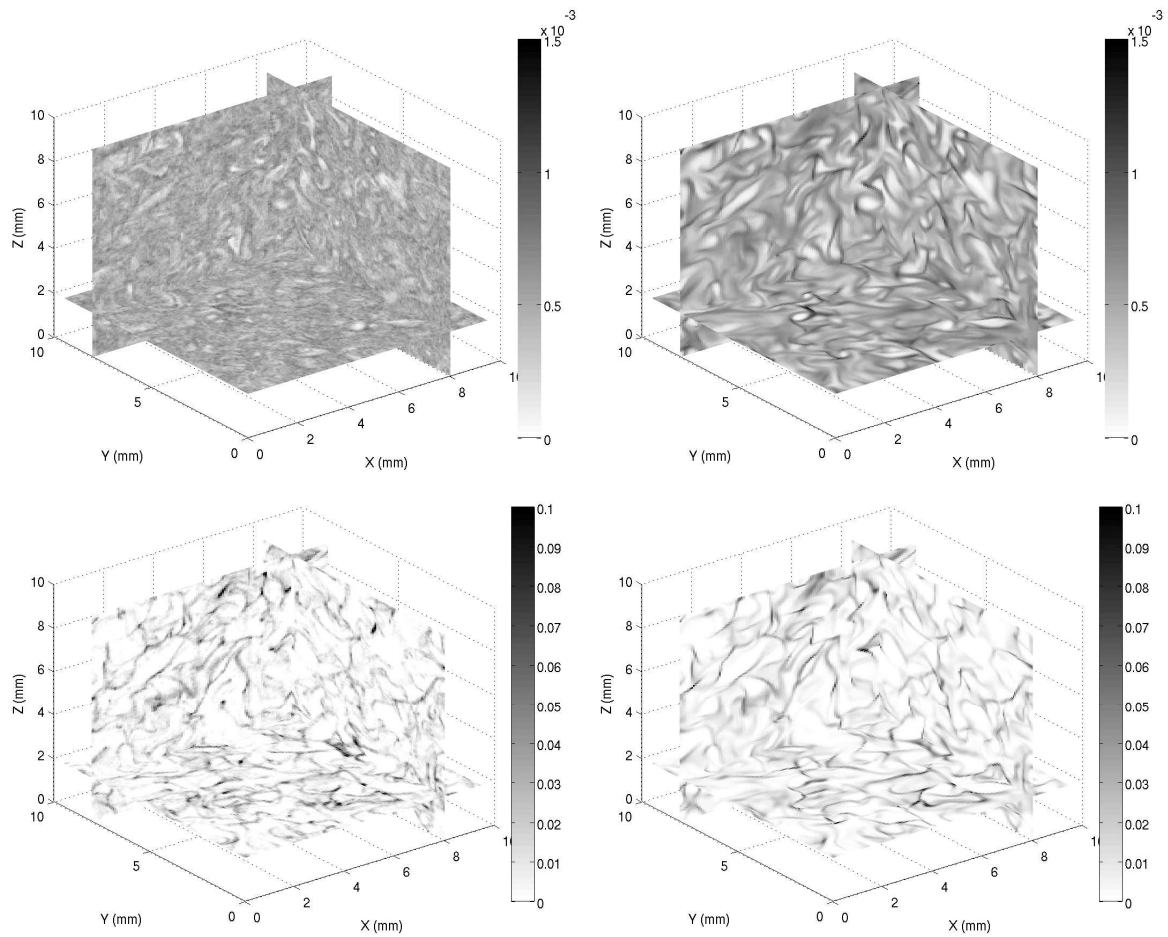


FIG. 4.21: Densité Eulérienne 3D de gouttes dans le cas Lagrangien (à gauche) et Eulérien (à droite) pour la deuxième section (en haut) ainsi que la huitième (en bas) au temps $t = 12.6$ ms.

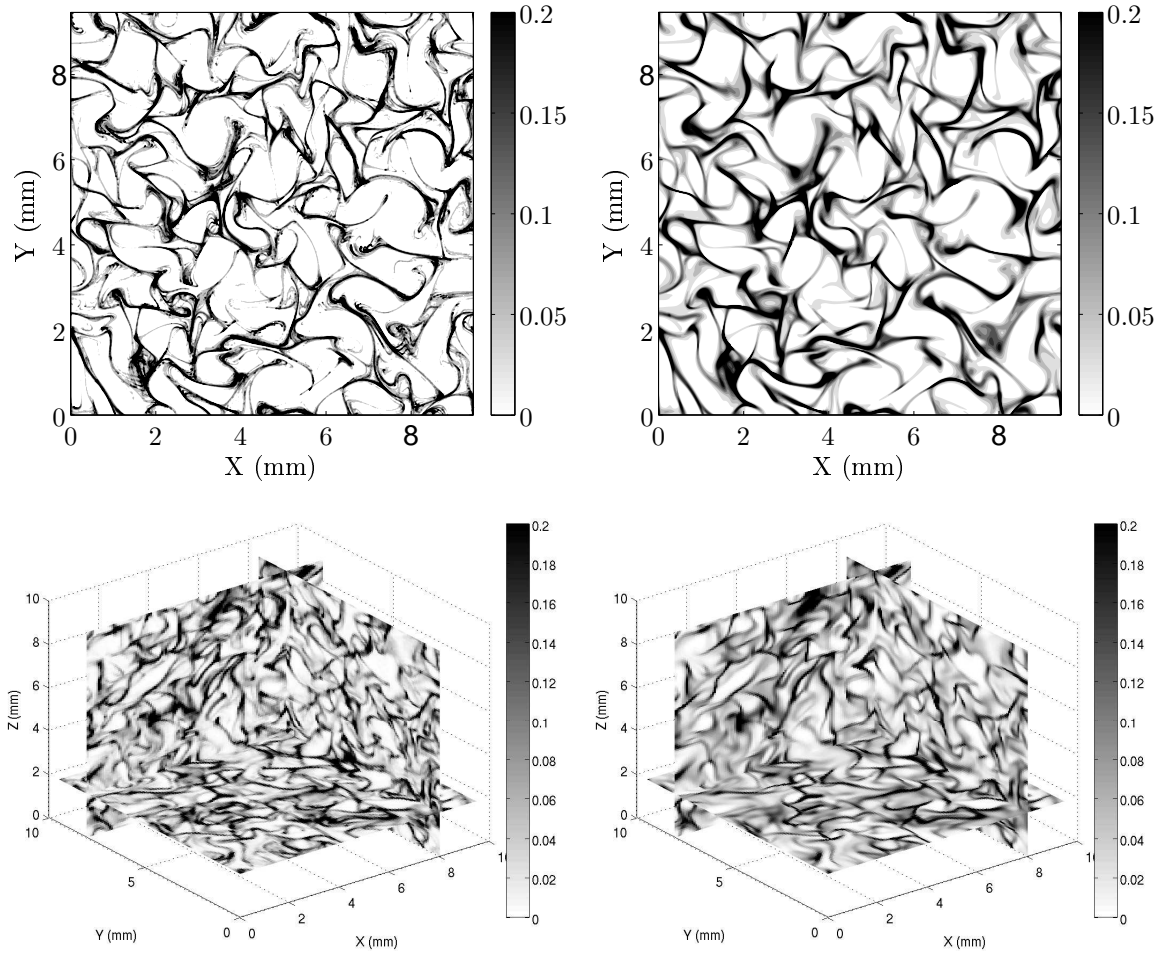


FIG. 4.22: Densité Eulerienne totale de gouttes dans le cas Lagrangien (à gauche) et Eulerien (à droite) dans le cas 2D (en haut) ainsi que dans le cas 3D (en bas) pris à $t = 12.6 \text{ ms}$.

élevé). La densité Eulérienne de gouttes de la deuxième section ($St = 0.055$) en $2D$ a été représentée sur le graphique 4.20-haut (à gauche pour la formulation Lagrangienne, à droite pour la formulation Eulérienne), pris $12.6\ ms$ après leur mise en mouvement. Nous pouvons remarquer que dans le cas Lagrangien, les contours de la densité de goutte ne sont pas aussi flagrants que ceux obtenus par la formulation Eulérienne. En effet, le nombre de gouttes dans cette section restant faible (15 gouttes par maille) et les gouttes restant très dispersées, les statistiques locales de densité de goutte sont nécessairement bruitées. La densité Eulérienne de gouttes de la huitième section ($St = 1.37$) en $2D$ est tracée sur le graphique 4.20-bas, pris $12.6\ ms$ après leur mise en mouvement. Contrairement au cas précédent où les gouttes ont un nombre de Stokes faible, la comparaison entre les deux formalismes est nettement meilleure. En effet, malgré un nombre plus faible de gouttes de cette taille (2 dans cette section et par maille au temps $t = 0$), les gouttes vont se ségréguer de manière très importante, ce qui implique un changement spatial brutal de la densité de goutte. Par conséquent, le bruit dû au formalisme Lagrangien est beaucoup plus faible.

Les mêmes conclusions peuvent être tirées sur les captures instantanées en 3 dimensions, présentées sur le graphique 4.21, qui représente la densité de goutte Lagrangienne (à gauche) et Eulérienne (à droite) pour la deuxième section (en haut) et la huitième section (en bas).

Malgré le bruit issu du formalisme Lagrangien qui permet difficilement une comparaison avec le formalisme Eulérien dans le cas d'un nombre de Stokes $St = 0.055$, nous pouvons voir que la densité totale de goutte est très similaire entre la simulation utilisant le modèle Euler multi-fluides et la simulation utilisant le modèle DPS (figure 4.22-haut pour la $2D$, 4.22-bas pour la $3D$, le Lagrangien à gauche et l'Eulérien à droite). Cette grande similitude est nécessaire pour le phénomène d'évaporation que nous avons traité par la suite. En effet, ce sont ces densités de gouttes qui serviront de champ de départ pour la simulation de l'évaporation et de la combustion effectuées aux paragraphes 4.4.3.2 et 4.4.3.3.

De plus, une analyse fine de l'évolution temporelle de l'écart type de la densité de goutte a été effectuée pour les sections 2, 5 et 8. Ces évolutions sont représentées sur la figure 4.23. Nous voyons que pour la 2^e section (en rouge), l'évolution temporelle de l'écart type atteint un maximum relativement faible, comparé à celui atteint par les sections 5 et 8. En effet, les gouttes de cette section présentant un très faible nombre Stokes ($St = 5.5 \cdot 10^{-2}$), celles-ci vont être très peu ségréguées. Pour les deux dernières sections (5 et 8), nous constatons que le formalisme Eulérien atteint un maximum qui ne dépend plus du nombre de Stokes des gouttes. En effet, ce maximum est imposé par la diffusion spatiale du formalisme Eulérien. De plus, nous pouvons constater que la 8^e section présente un maximum de l'écart type plus faible que la section 5

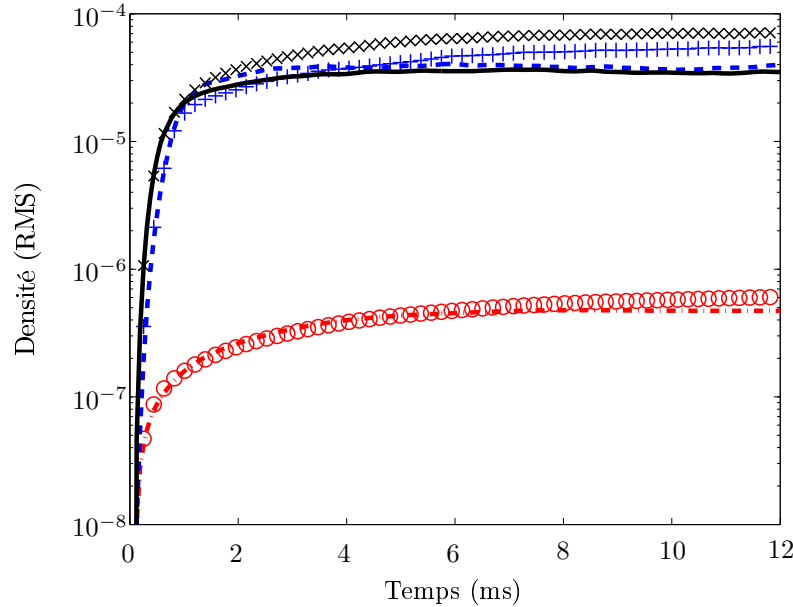


FIG. 4.23: Evolution temporelle de l'écart type de la densité de gouttes dans le domaine pour plusieurs sections (section 2 ($St = 5.5 \cdot 10^{-2}$) en rouge, section 5 ($St = 0.495$) en noir et section 8 ($St = 1.37$) en bleu). La formulation Lagrangienne est en symboles, la formulations Eulérienne en lignes.

obtenue par le formalisme Lagrangien. Cela s'explique par le fait qu'au delà du nombre de Stokes critique ($St_c = 1.05$ [17]), les trajectoires des gouttes présentent des croisements, ce qui contribue à un brassage de leur densité qui n'est pas présent en deçà pour les gouttes dont le nombre de Stokes est inférieur au nombre de Stokes critique. Ce phénomène n'est pas apparent avec le formalisme Eulérien. En effet, la prise en charge de croisements de trajectoires implique la nécessité d'un modèle multi-vitesse, or ce modèle n'a pas été utilisé ici.

4.4.3.2 Évaporation du spray polydispersé

Une fois le spray ségrégué, effectué dans la partie précédente, le temps est réinitialisé à $t = 0$ et l'évaporation est active. Lors de cette évaporation, le terme source est fait de sorte que la masse volumique du gaz reste constante, mais que le mélange évolue de manière normale. Ceci permet de maintenir le forçage de la turbulence. Dans cette partie, la chimie ne sera pas activée. Les espèces présentes sont donc de l'oxydant et du fuel. La plupart des études portant sur la caractérisation d'un mélange oxydant et de fuel gazeux utilise la fraction de mélange – qui dans notre cas non réactif est strictement identique à la fraction massique de fuel gazeux. Nous comparerons deux captures instantanées de fuel gazeux prises pendant l'évaporation des gouttes en 2 et 3 dimensions, ainsi que l'évolution temporelle du minimum, maximum et moyenne de la fraction massique de fuel gazeux dans le domaine. Le temps caractéristique d'évaporation

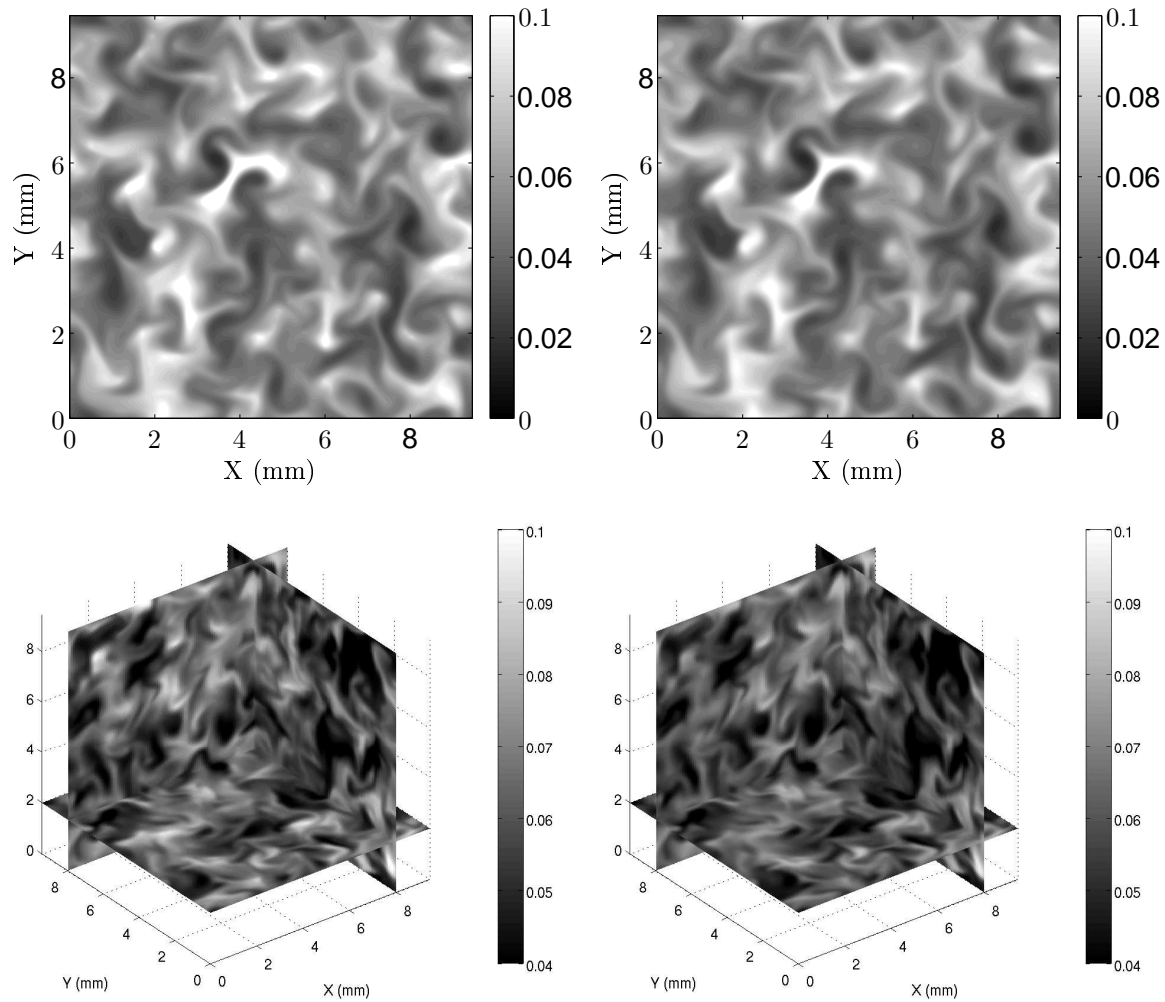


FIG. 4.24: Fraction massique du fuel gazeux obtenu par la formulation Lagrangienne (Y_f^L - gauche) et Eulérienne (Y_f^E - droite) dans le cas 2D (en haut) et 3D (en bas), à un temps $t = 2.52 \text{ ms}$.

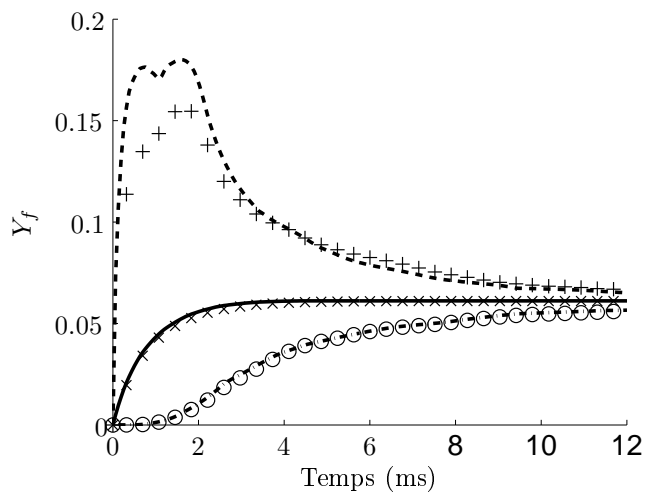


FIG. 4.25: Évolution du minimum, du maximum et de la moyenne de la fraction massique du fuel gazeux obtenu par la formulation Lagrangienne (symboles) et Eulérienne (lignes) au cours du temps.

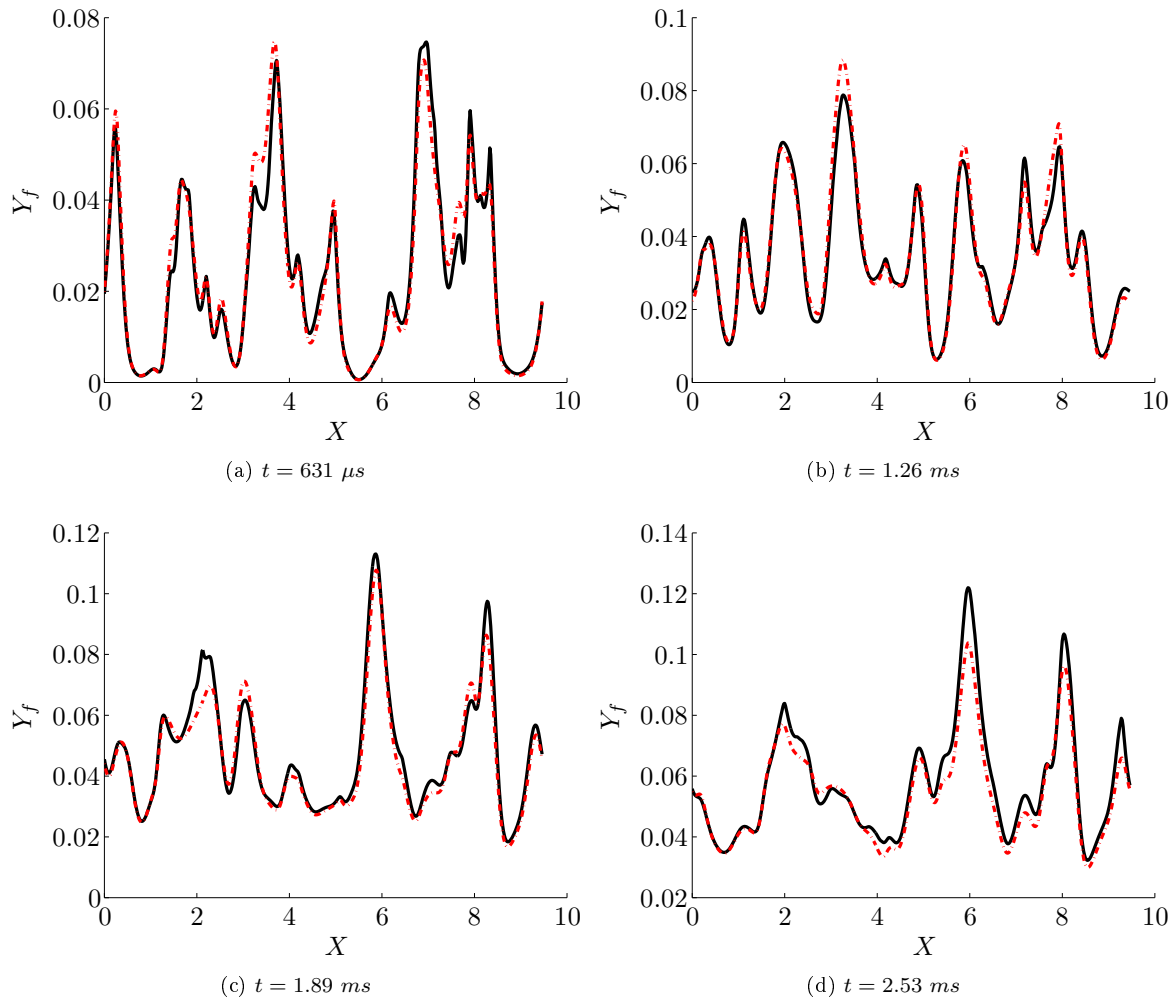


FIG. 4.26: Coupe horizontale de la fraction massique du fuel gazeux. La formulation Eulérienne est en pointillés rouges, la formulation Lagrangienne en lignes noires.

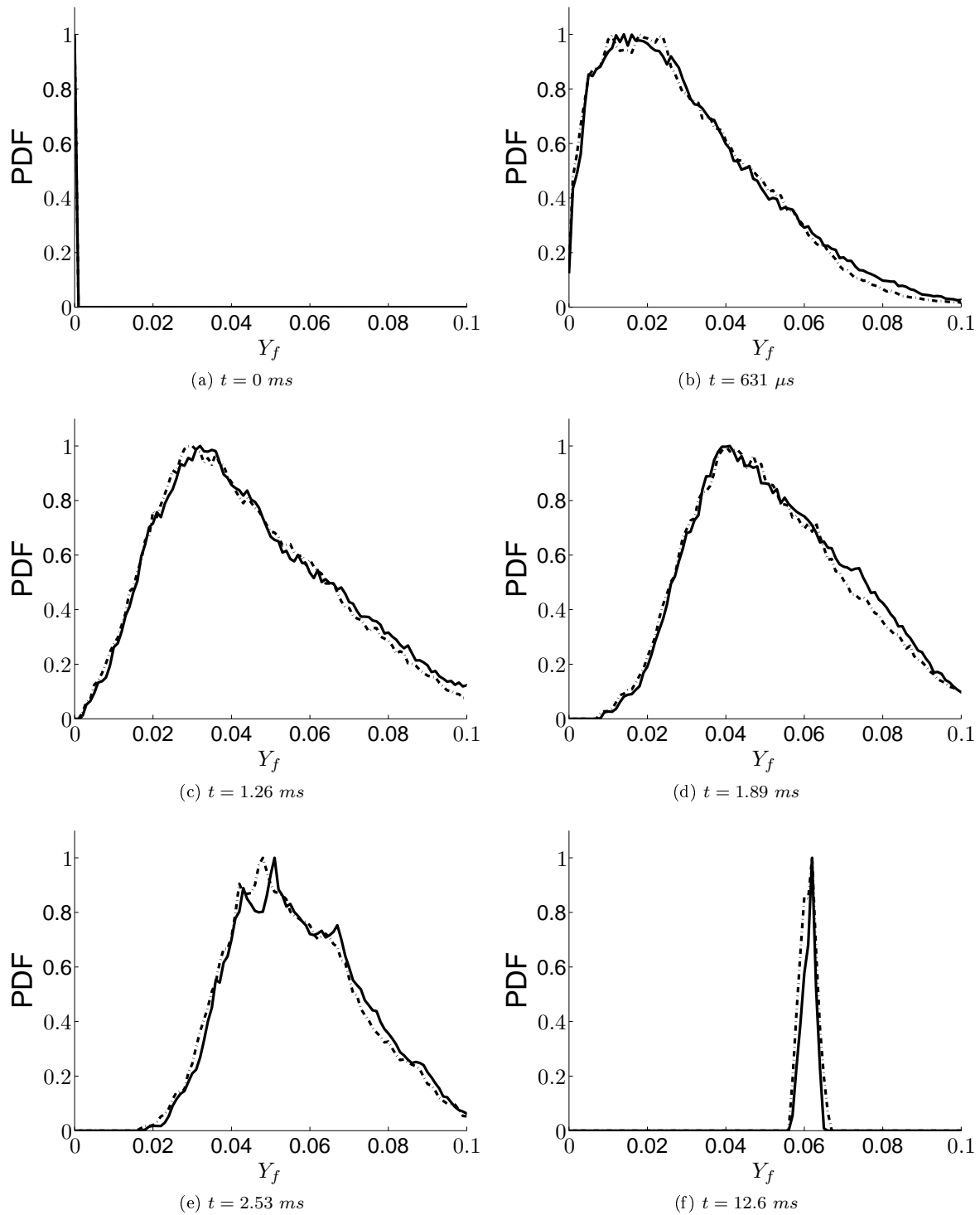


FIG. 4.27: PDF de la fraction massique du fuel gazeux obtenu par la formulation Lagrangienne (lignes) et Eulérienne (pointillés).

τ_v est constant et fixé à 0.631 ms , ce qui correspond approximativement à $3/4$ du temps de retournement d'un tourbillon. Deux captures instantanées des champs de fraction massique sont prises à $t = 2.52 \text{ ms}$. A cet instant, toutes les gouttes d'un diamètre inférieur à $2 d_0$ sont complètement évaporées, soit l'intégralité des sections 1 à 7. Le champ de fraction massique dans le cas Lagrangien est représenté sur la figure 4.24-gauche en haut, l'Eulérien sur la figure 4.24-droite en haut en $2D$. En $3D$, ces champs sont sur la figure 4.24-gauche en bas pour le Lagrangien, 4.24-droite en bas pour l'Eulérien. Nous constatons que ces champs sont très similaires. Cela montre la très bonne capacité du modèle Eulérien multi-fluides à rendre compte correctement de l'évolution du diamètre des gouttes dans l'espace des phases, ainsi que de leur transport. L'évolution temporelle du minimum, maximum et la moyenne de la fraction massique de fuel est présentée sur le graphique 4.25. Concernant le minimum de la fraction massique de fuel, on constate sur le graphique 4.22 qu'il existe des zones du domaine où il n'y a pas de gouttes. Dans ces zones, aucun terme source de fuel gazeux n'est présent. Le minimum visible sur le graphique 4.25 correspond donc à l'évolution du fuel dans ces zones. Son augmentation ne sera guidée que par le transport et la diffusion du fuel gazeux déposé dans les endroits où le spray est présent. La manière dont le fuel gazeux est transporté est donc peu influencée par les faibles différences qu'il pourrait y avoir entre les deux formalismes. A l'inverse, le maximum se situe dans une zone proche de la densité maximale de goutte. Il dépend donc du transport des gouttes dans cette zone, ainsi que du niveau de densité de goutte dans cette zone. La ponctualité des termes sources issus du suivi Lagrangien des gouttes implique une élévation locale très importante du fuel gazeux. La légère diffusion numérique due à la méthode Eulérienne implique la présence d'un maximum légèrement moins élevé que dans le cas Lagrangien. Enfin, concernant l'évolution de la fraction massique moyenne de fuel, celle-ci ne dépend pas de la ségrégation des gouttes, mais uniquement de la loi de distribution initiale des diamètres de gouttes et de la loi d'évaporation, qui en l'occurrence est une loi en d^2 . Par rapport à un spray monodispersé évaporant [104] de taille d_0 , la fraction massique de fuel gazeux va évoluer plus lentement. La bonne concordance de cette moyenne entre les deux formalismes montre la très bonne capacité du modèle Eulérien multi-fluides à rendre compte de l'évolution de la distribution de taille des gouttes.

Afin de conforter nos observations, quatre coupes de la fraction massique gazeuse de fuel ont été effectuées à une ordonnée $y = 4.73 \text{ mm}$, au centre du domaine. Ces coupes représentent la fraction massique obtenue par le formalisme Lagrangien et Eulérien pour quatre temps distincts (figure 4.26). Nous observons un très bonne concordance entre ces fractions massiques obtenues. Quelques détails néanmoins sont observables, à savoir la présence de maxima plus

élevés dans le cas Lagrangien que dans le cas Eulérien. En effet, de part la diffusion numérique inhérente à la méthodologie Eulérienne ainsi qu’au bruit dû à la méthodologie Lagrangienne, il existe quelques endroits dans le domaine où la densité de goutte obtenue par la méthodologie Lagrangienne est nettement plus élevée que celle obtenue par le solveur Eulérien. Cela se traduit par une plus grande quantité de fuel liquide disponible en ces endroits. Lors de l’évaporation, cette disponibilité de fuel liquide va donc entraîner une plus grande quantité de fuel gazeux. Nous remarquons de même l’effet inverse : à quelques endroits la fraction massique de fuel gazeux obtenue par la méthodologie Eulérienne est plus élevée que celle obtenue par la méthodologie Lagrangienne. La raison de cette différence est tout autre. Comme nous l’avons vu dans le paragraphe précédent, le fait de ne pas avoir utilisé le schéma Eulérien multi-vitesse entraîne localement la création de mini delta-chocs, donc une accumulation de goutte, là où elles devraient se croiser. Ce phénomène ne se produit que pour des gouttes dont le nombre de Stokes est supérieur au nombre de Stokes critique. Ces accumulations locales induisent, lors de l’évaporation, une plus grande quantité de fuel gazeux.

Enfin, les PDF de la fraction massique de fuel gazeux dans le domaine ont été tracées sur la figure 4.27. Celle-ci présente un pic de Dirac centré en $Y_f = 0$ au temps initial (figure 4.27a). Longtemps après l’évaporation (figure 4.27f), le mélange du fuel gazeux étant très avancé, la PDF de la fraction massique de fuel gazeux va être très resserrée et est centré sur $Y_f = 0.0625$, valeur de fraction massique de fuel liquide que nous avons initialement. Lors de l’évaporation, les PDF sont obtenues par le formalisme Lagrangien et Eulérien sont très semblables (figures 4.27b, 4.27c, 4.27d, 4.27e). Cela nous permet de confirmer que la répartition spatiale de fuel gazeux suite à l’évaporation du spray est très similaire entre les deux formalismes utilisés ici.

4.4.3.3 Propagation d’un front de flamme dans le domaine

Les mêmes champs ségrégués obtenus dans la section 4.4.3 ont été utilisés comme base de départ à l’étude de la propagation d’un front de flamme. Cette fois-ci, la loi d’évaporation du spray est une loi dépendant de la température locale, et non plus une loi en d^2 . Un point chaud est appliqué au centre du domaine. Ce point chaud va entraîner l’évaporation du spray à cet endroit, et donc du fuel gazeux. Le mélange de fuel gazeux et d’oxydant déjà présent va ensuite brûler là où la température est suffisante pour que le terme source chimique soit suffisamment significatif. Un front de flamme va rapidement apparaître, puis se propager dans le spray en mouvement. Le taux de réaction dans le domaine a été tracé sur la figure 4.28-gauche en haut pour la formulation Eulérienne et sur la figure 4.28-droite en haut pour la simulation Lagrangienne, en $2D$. Cette capture a été effectuée à un temps $t = 2.52 \text{ ms}$ après le début de

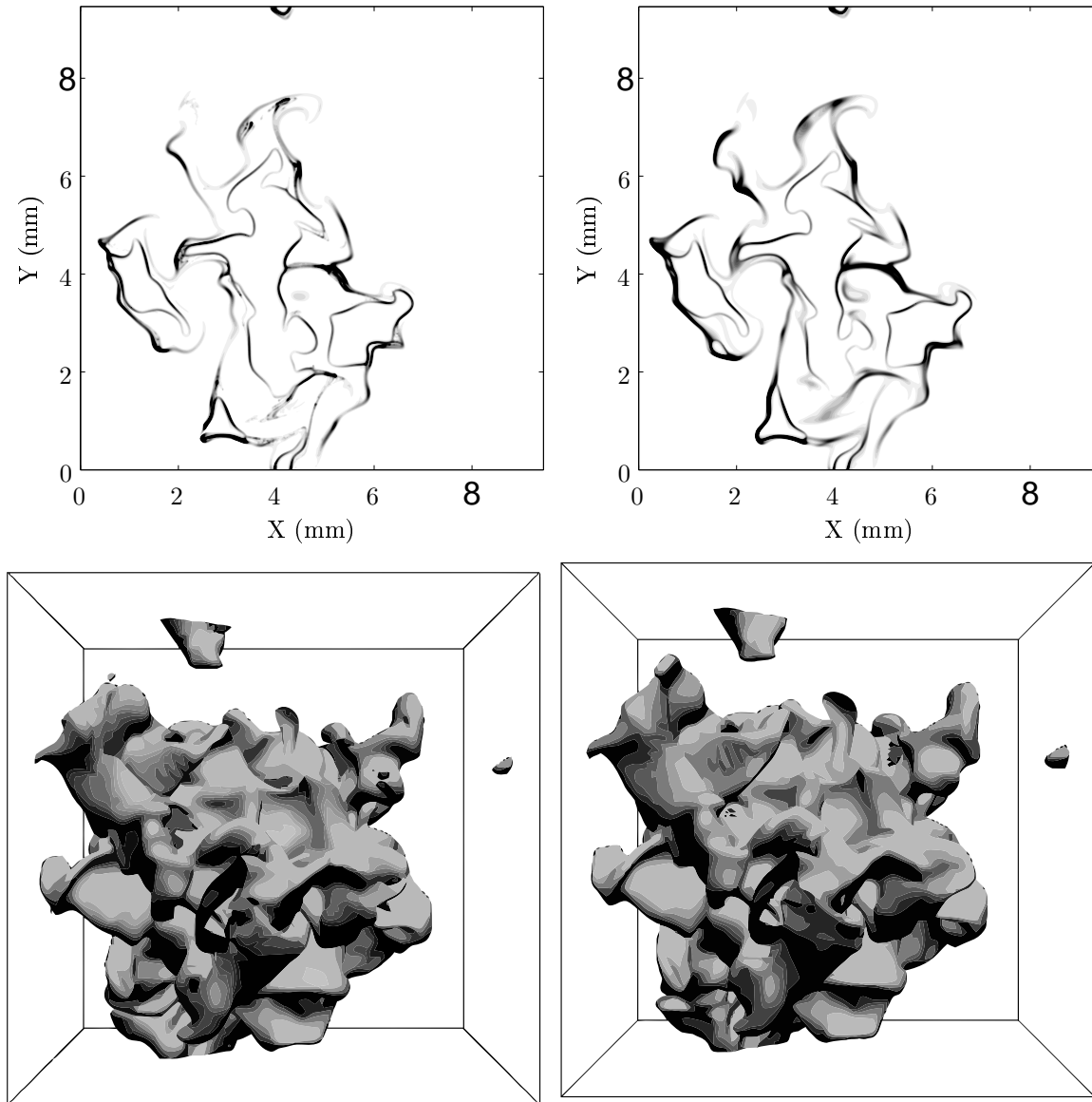


FIG. 4.28: Captures instantanées du taux de réaction dans le domaine $2D$ (en haut) dans le cas Lagrangien (à gauche) et Eulérien (à droite) pris à $t = 2.52 \text{ ms}$; ainsi que les captures instantanées du taux de réaction dans le domaine $3D$ (en bas) dans le cas Lagrangien (à gauche) et Eulérien (à droite) pris à $t = 6.31 \text{ ms}$.

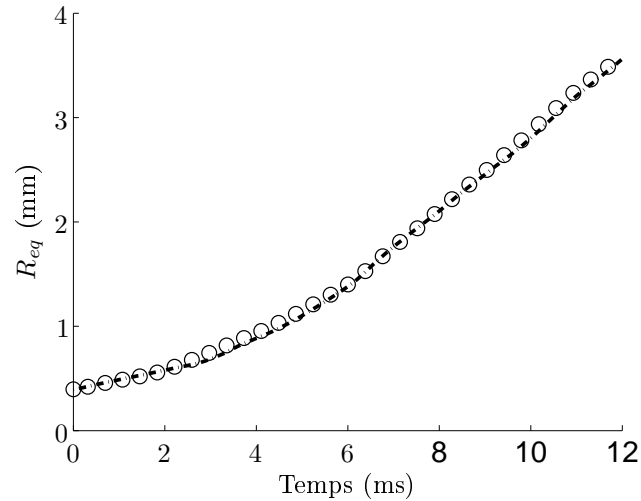


FIG. 4.29: Évolution temporelle du rayon équivalent de la flamme. Formulation Eulérienne (lignes) et Lagrangienne (cercles).

l'allumage. Nous constatons que ces deux champs sont très semblables. Le léger bruit visible pour le cas Lagrangien est dû à la ponctualité des termes source. Cela permet de montrer que le modèle Eulérien multi-fluides est capable d'interagir fidèlement avec un milieu turbulent et réactif, et de rendre compte fidèlement du spray évaporant dans ce type de cas. Les deux types de flamme apparaissent sur ce graphique : des flammes prémélangées et des flammes de diffusion. Cela permet de montrer que même des caractéristiques complexes de flamme peuvent être fidèlement reproduites avec la formulation Eulérienne.

La même simulation a été effectuée en $3D$. Les iso-contours de flamme ont été tracés pour une capture instantanée de la flamme. Ces deux iso-contours sont présentés sur la figure 4.28-gauche en bas pour le cas Lagrangien, et 4.28-droite en bas pour le cas Eulérien. Le temps de simulation de ces captures est de $t = 6.31 \text{ ms}$. Nous constatons que ces deux iso-contours présentent des formes très similaires, ce qui nous conduit à la même conclusion que dans le cas $2D$ présenté ci-dessus. Plusieurs autres captures ont été effectuées pour mettre en apparence les phénomènes complexes qui apparaissent, à savoir la présence de flammes de diffusion et de prémélange. Ces captures sont représentées sur la figure 4.30, où ces phénomènes présentent les mêmes particularités entre le formalisme Lagrangien et Eulérien.

Finalement, l'évolution temporelle du rayon de flamme équivalent R_{eq} a été tracée en $2D$ sur le graphique 4.29. Nous constatons que la vitesse de propagation de la flamme est identique pour le cas Lagrangien et Eulérien, ce qui confirme nos conclusions précédentes.

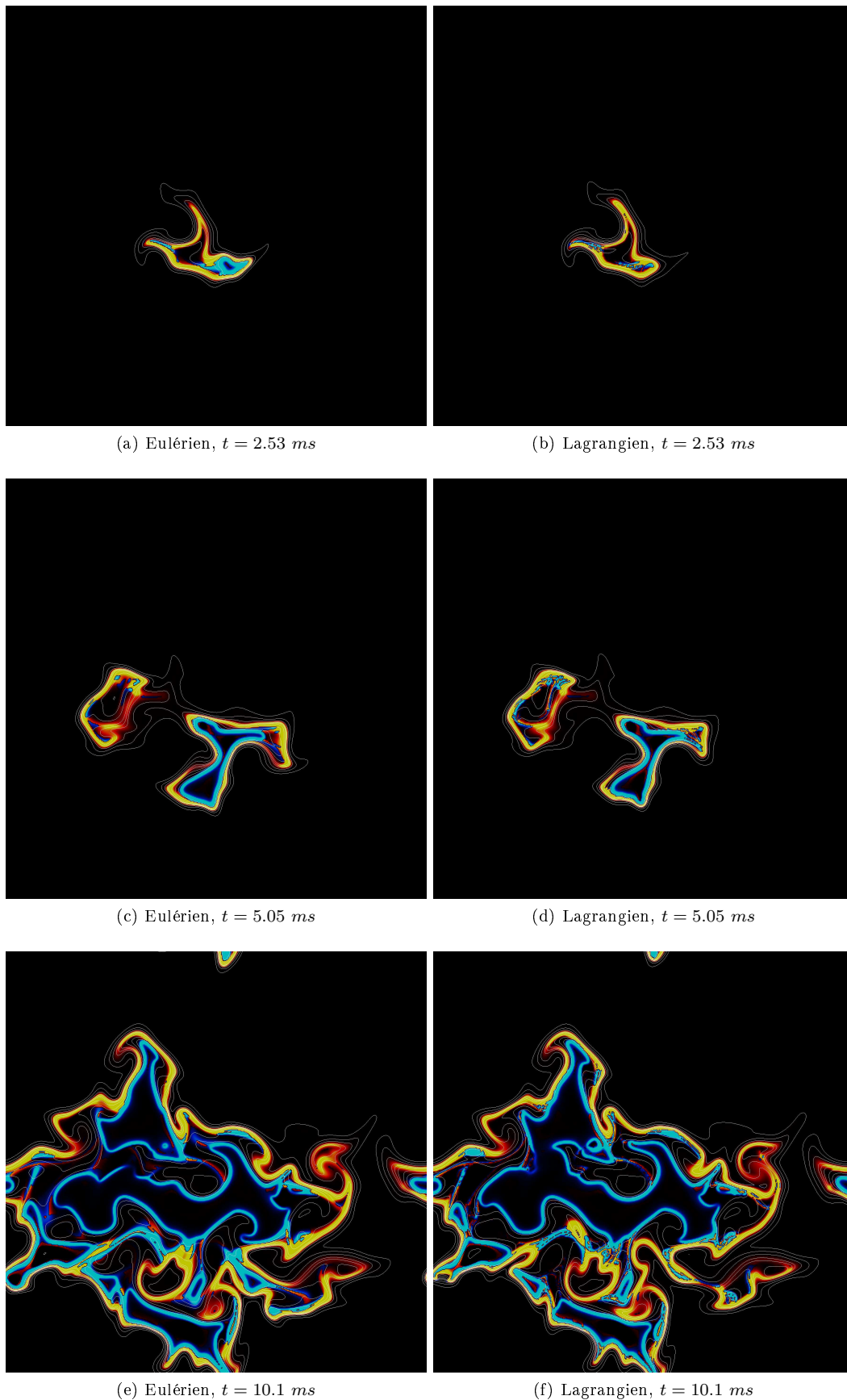


FIG. 4.30: Captures instantanées des taux de réaction de prémélange (en rouge) et de diffusion (en bleu) à différents instants (croissant de haut en bas) pour la formulation Eulerienne (à gauche) et Lagrangienne (à droite). Les iso-contours de fraction massique de fuel gazeux sont en blanc.

4.4.3.4 Conclusion

La capacité du modèle Eulérien multi-fluides à rendre compte fidèlement de l'évaporation d'un spray initialement polydispersé a été montrée et testée ici. Les comparaisons ont montré que la ségrégation, ainsi que l'évaporation – en présence ou non de combustion – sont fidèlement représentées par le modèle Eulérien. Les caractéristiques complexes d'un front de flamme – telles que l'apparition de flammes prémélangées et de diffusion – ont été correctement rendues. De plus, les caractéristiques globales de la flamme, tel que la vitesse de propagation, sont identiques.

Il est possible d'étendre cette étude à un cas dilatable, afin de voir si les effets thermiques sont compatibles avec ce formalisme et s'il est possible de simuler des phénomènes encore plus proches de la physique avec cette méthode.

Chapitre 5

Conclusion

On ne fait jamais attention à ce qui a été fait; on ne voit que ce qui reste à faire.

Marie Curie

Les travaux effectués durant cette thèse ont eu pour objectif de développer des méthodes numérique permettant d'effectuer des simulations dédiées à la combustion diphasique sur les machines actuelles.

Le solveur utilisé ainsi que les principaux outils développés ont été décrits dans le deuxième chapitre : les lois classiques de l'aérodynamique, ainsi que celles de la phase disperse, de la chimie et des corps immergés. Les lois aérodynamiques utilisées sont les équations de Navier Stokes auxquelles a été appliquée l'approximation bas nombre de Mach, les vitesses gazeuses mise en jeu étant faibles devant la vitesse du son. Une méthode de chimie simple à une étape permettant la simulation de flammes partiellement prémélangées – riches ou pauvres – a été détaillée et a été améliorée dans cette partie. Cette méthode a permis de simuler des flammes dans les études effectuées par la suite. La méthode de suivi de la phase disperse Lagrangienne a été parallélisée, ce qui a permis la simulation de géométries de taille importante. L'algorithme utilisé pour la gestion des collisions élastiques entre les gouttes a été implémenté et une optimisation a été proposée. Cet algorithme a permis la simulation de collision de sprays qui se croisent. L'optimisation proposée pourra servir de base pour des travaux à venir. Enfin, la méthode utilisée pour insérer un corps immergé chaud (cylindre, sphère ou polygone 2D quelconque) dans le domaine est décrite dans le chapitre 2.4.1. Afin de mettre en oeuvre et de tester les outils précédemment décrits, la simulation parallèle d'un cylindre chauffé en présence d'une injection diphasique a été mise en oeuvre. Nous avons pu observer le développement d'une flamme, dont les caractéristiques sont différentes en fonction de la balistique des gouttes injectées.

Dans le troisième chapitre, l'étude détaillée d'une flamme diphasique 1D a été effectuée en fonction de deux paramètres : la richesse liquide et le temps caractéristique d'évaporation. Nous avons pu constater l'apparition de flammes de diffusion lors de sa propagation. Une première étude sur sa vitesse a été détaillée. Puis, une seconde étude sur l'équilibre thermodynamique au sein de cette flamme a aussi été réalisée. La compréhension de ces phénomènes est très importante, aussi bien dans la prévision de l'émission de polluants que dans le cadre d'une optimisation de rendement. Les hypothèses utilisées dans cette configuration 1D étant restrictives (gouttes immobiles, nombre de groupe constant, nombre de Lewis unitaire), il sera nécessaire d'envisager le même type d'étude en considérant des gouttes mobiles. Un test a été effectué et de nouveaux phénomènes physiques sont apparus (apparition de groupes de gouttes régulièrement disposés). Il serait donc possible d'utiliser les conclusions proposées dans cette partie et de les élargir pour tenter d'expliquer les phénomènes qui pourront apparaître dans des cas où certaines restrictions seraient levées.

Le quatrième chapitre a porté sur le développement de modèles diphasiques pour l'étude de la combustion turbulente diphasique. Nous avons implémenté la méthode de suivi Lagrangien, ce qui a permis de tester le modèle Eulérien multi-fluides / multi-vitesses de suivi de spray. Cette étude a aussi donné lieu à une importante collaboration avec l'équipe de Marc Massot du laboratoire EM2C-ECP et la mise en oeuvre de projets de recherche au CTR (Center for Turbulence Research) à l'Université de Stanford, Californie. L'utilisation du suivi Lagrangien a ainsi été utilisé en 2008 pour valider la capacité du modèle Eulérien multi-vitesses à simuler des croisements de paquets de gouttes [18]. Cette mise à l'épreuve du modèle Eulérien a été effectuée dans le cas de croisements de gouttes issues d'un spray mono et bi-dispersé dans un environnement gazeux en mouvement. La capacité du modèle Eulérien multi-vitesses à simuler ces croisements a été confirmée. La validation du même modèle dans le cas d'une combustion turbulente de spray mono-dispersé [104] a ensuite été effectuée. Celle-ci a consisté en une étude de la ségrégation, comparativement au modèle Lagrangien du solveur *Asphodele*, puis à une étude du mélange une fois le spray rendu évaporant. Enfin, une étude sur la propagation d'un front de flamme dans ce milieu a été menée avec les deux formalismes aux fins de comparaison. Cette étude novatrice a permis de comparer le modèle Eulérien d'un spray évaporant, phénomène qui n'était pas pris en compte dans l'étude précédente. La propagation d'un front de flamme dans ce milieu est très sensible aux phénomènes de ségrégation et d'évaporation. Cependant, le modèle Eulérien multi-fluides a rendu compte fidèlement de ces phénomènes pour permettre une bonne concordance des résultats. La dernière étude a porté sur les mêmes analyses effectuées sur un spray initialement polydispersé (chapitre 4.4.3). Plusieurs perspectives

à ces travaux sont possibles. L'une d'elles, en cours, est d'effectuer un auto-allumage proche de celui effectué durant la thèse de Bouali [123] en formulation Lagrangienne avec ce modèle Eulérien multi-fluides. D'autres phénomènes qui n'ont pas été étudiés ici mettront le modèle Eulérien multi-fluides multi-vitesses à l'épreuve, en particulier la diffusion numérique ainsi que les modèles two-way en énergie. Cela nécessitera de plus l'utilisation d'une chimie complexe et de plusieurs optimisations, actuellement en cours.

En annexe de ce travail (chapitre 6.1), l'étude des propriétés d'un spray traversé par une onde de choc a été effectuée. Celle-ci a consisté à placer un spray monodispersé dans un domaine 1D dans lequel une onde de choc se propage. Un modèle analytique de la densité de gouttes ainsi que de leur vitesse dans la zone post-choc a été développé et comparé aux résultats numériques dans le cas 1-way. Dans le cas où la rétroaction entre les gouttes et le spray est active (cas 2-way), des simulations numériques ont également été effectuées. Des comportements globaux et asymptotiques ont été analytiquement déduits et comparés. Un phénomène important, à savoir l'apparition d'un pic de densité en entrée de brouillard dans le cas 2-way, a été mis en avant et expliqué analytiquement. Cette étude a permis de montrer d'autres effets qui apparaissent dans le cas 2-way et qui ne sont pas visibles dans le cas 1-way, par exemple un changement de la vitesse moyenne du spray. Cette étude peut être améliorée en effectuant les mêmes simulations en 2D, ce qui fera apparaître des phénomènes transverses qui ne sont pas visibles dans le cas 1D.

Chapitre 6

Annexes

Les petites choses ont leur importance ; c'est toujours par elles qu'on se perd.

Dostoïevski Fiodor Mikhaïlovitch

6.1 Interaction choc / nuage de gouttes

Les pressions d'injection augmentent de façon significative dans les moteurs, et ceci d'autant plus rapidement que des verrous technologiques sont levés. En effet, cela permet d'améliorer les phénomènes d'atomisation des carburants liquides. Ainsi, l'effet de la compressibilité sur l'écoulement ne peut plus être complètement négligé. Dans certaines configurations, la coalescence de ces ondes de compression va engendrer des ondes de choc [124] dans un milieu diphasique. Ce chapitre s'attache à étudier un des effets des ondes de choc sur des sprays.

6.1.1 Introduction

Sans être exhaustif, après le passage d'une onde de choc, une goutte isolée va se déformer, subir des forces de traînée, et si les conditions aérodynamiques sont défavorables, subir une atomisation secondaire et donner naissance à des gouttes-filles [124, 125, 126].

La surface d'échange se trouvera augmentée. Les effets des transferts de masse (évaporation) et thermiques peuvent alors fortement influencer localement l'état thermodynamique post-choc du gaz porteur ¹.

Dans le cas où les réactions chimiques sont présentes, la zone d'évaporation/réaction peut être couplée à la propagation de l'onde de choc. C'est la détonation diphasique [129] dont une étude

¹Ces phénomènes sont au coeur de la problématique d'atténuation des ondes de choc par des brouillards [127, 128]

remarquable a été effectuée par Roy et Frolov [130]. L'objectif de cette étude est de caractériser les transferts de quantité de mouvement entre phases dans le cas unidimensionnel. Dans le cas multidimensionnel, des ondes de choc transverses sont présentes, ce qui entraîne l'apparition de points triples diphasiques se propageant dans un milieu non homogène en concentration [129]. Une onde de choc diphasique est une onde de choc auto-similaire partiellement dispersée [131], i.e. une onde de choc portée principalement par la phase continue, à laquelle est couplée une zone de relaxation des vitesses. On négligera les transferts de masse et d'énergie. Dans une formulation one-way, un modèle analytique sera construit et quantifiera les effets du gaz porteur sur la phase dispersée. On s'intéressera plus particulièrement à la zone d'interaction entre le front de choc et l'interface gaz/milieu diphasique. Les différences et la caractérisation de certains paramètres dans le cas de la formulation two-way seront mises en évidence par des équations bilan et à l'aide de simulations numériques.

6.1.2 Configuration 1D

6.1.2.1 Caractéristiques du gaz

Le domaine utilisé ici pour étudier l'interaction choc - spray est mono-dimensionnel. On peut alors distinguer 2 zones : la zone post-choc (1) et la zone anté-choc (2) (cf figure 6.1).

Le piston se déplace à partir du temps $t = 0^+$ à une vitesse V_p , engendrant une onde de choc allant à une vitesse V_s dans le milieu 2. Soit M_s le nombre de Mach de cette onde de choc. On prendra $\gamma = 1.47$, valeur de la constante adiabatique de l'air aux conditions normales de température et de pression.

Connaissant la vitesse du son dans le milieu 2, notée c_2 , on obtient la vitesse du piston V_p par la relation suivante :

$$\frac{2}{\gamma + 1} \frac{M_s^2 - 1}{M_s} = \frac{V_p}{c_2} \quad ; \quad V_s = M_s c_2 . \quad (6.1)$$

Un écoulement gazeux dans le milieu 1 va s'établir à la vitesse du piston. Ses caractéristiques thermodynamiques sont données par les relations suivantes :

$$\frac{T_1}{T_2} = \left(\frac{2}{\gamma + 1} \right)^2 \frac{1}{M_s^2} \left(1 + \frac{\gamma - 1}{2} M_s^2 \right) \left(\gamma M_s^2 - \frac{\gamma - 1}{2} \right) , \quad (6.2)$$

$$\frac{p_1}{p_2} = \frac{2}{\gamma + 1} \left(\gamma M_s^2 - \frac{\gamma - 1}{2} \right) , \quad (6.3)$$

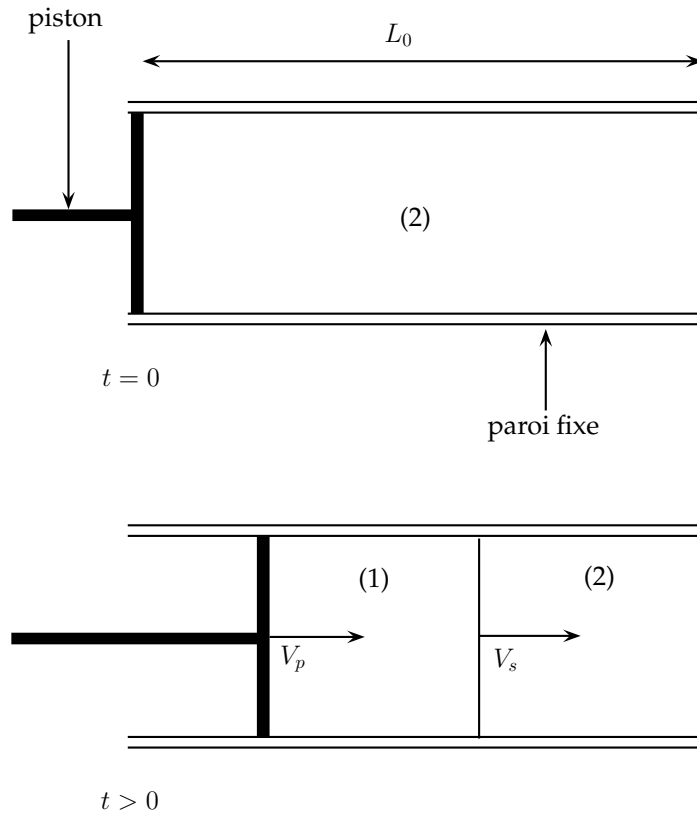


FIG. 6.1: Génération d'une onde de choc instationnaire

Caractéristiques du gaz		
	Milieu 1	Milieu 2
$V(m/s)$	58.21	0
$\rho(kg/m^3)$	1.2120	1.04
$p(Pa)$	$1.25 \cdot 10^5$	10^5
$T(K)$	396.40	370.07

TAB. 6.1: Caractéristiques du gaz pré et post choc.

et enfin :

$$\frac{\rho_1}{\rho_2} = \frac{p_1 T_2}{p_2 T_1} . \quad (6.4)$$

Les propriétés du gaz ont été choisies de sorte que $M_s = 1.1$.

Le récapitulatif des caractéristiques du gaz dans les zones 1 et 2 sont données dans le tableau 6.1.

6.1.2.2 Caractéristiques des particules

Les particules sont aléatoirement disposées dans le domaine. Leur diamètre sera spécifié pour chaque simulation.

On détermine la force de traînée de la goutte due à son environnement ; puis en appliquant

la première loi de Newton, on arrive à déterminer sa vitesse.

Pour déterminer la manière dont la goutte va évoluer dans le gaz, nous utilisons la force qu'exerce un fluide de vitesse $\mathbf{u}(\mathbf{X}, t)$ sur une goutte se situant en \mathbf{X} , de vitesse $\mathbf{V}(t)$ et de surface $S = 4\pi a^2$, avec a le diamètre de la goutte.

La forme générale de l'équation du mouvement est déduite du principe fondamental de la dynamique :

$$m_d \frac{d\mathbf{V}}{dt} = \sum \mathbf{F} , \quad (6.5)$$

avec $m_d = \pi \rho_d a^3 / 6$ la masse de la particule.

Seul le terme de traînée intervient dans cette équation, les autres forces sont négligées. En particulier, la force de Basset est négligé vu le très fort ratio de masses volumiques de la phase porteuse et dispersée. Il est défini par :

$$\mathbf{T} = \frac{\pi}{8} \rho_g a^2 C_D |\mathbf{u}(\mathbf{X}, t) - \mathbf{V}| (\mathbf{u}(\mathbf{X}, t) - \mathbf{V}) , \quad (6.6)$$

avec respectivement $\mathbf{u}(\mathbf{X}, t)$ la vitesse du gaz à la position de la goutte, et C_D le coefficient de traînée de la goutte, défini par :

$$C_D = \frac{24}{Re_p} , \quad Re_p = \frac{\rho_d |\mathbf{u}(\mathbf{X}, t) - \mathbf{V}|}{\mu} . \quad (6.7)$$

Re_p est le nombre de Reynolds particulaire, lié à l'écoulement autour de la goutte et à l'interaction de celle-ci sur cet écoulement. Le coefficient de traînée est celui de Stokes pour un écoulement laminaire autour de la goutte. Il n'est pas représentatif des écoulements post-choc dans les sprays. Nous l'avons cependant conservé pour des raisons de traçabilité analytique.

On obtient donc l'équation du mouvement pour chaque goutte :

$$\frac{d\mathbf{V}}{dt} = \frac{18\mu}{\underbrace{\rho_p a^2}_{1/\tau_p}} (\mathbf{u}(\mathbf{X}, t) - \mathbf{V}) , \quad \text{avec } \tau_p = \frac{\rho_p a^2}{18\mu} . \quad (6.8)$$

Les gouttes utilisées ici ont un diamètre variant de $10nm$ à $50\mu m$. Le tableau 6.2 donne le diamètre des gouttes ainsi que leur temps balistique τ_p équivalent.

6.1.2.3 Équations Euler/gaz - Lagrange/particules

Dans le cadre d'une formulation two-way, on ne peut plus négliger les transferts de quantité de mouvement sur le gaz.

Diamètre	τ_p
10nm	$1.57510^{-10}s$
1 μm	1.575 μs
10 μm	157.5 μs
20 μm	630 μs
50 μm	3.937ms

TAB. 6.2: Liste des diamètres d de goutte et temps caractéristique de relaxation τ_p équivalent.

Afin d'estimer l'impact des gouttes sur le fluide, on utilise la conservation de la quantité de mouvement. Pour un volume de fluide \mathcal{V} contenant une particule dont la variation de vitesse est $\frac{d\mathbf{V}}{dt}$, on retranche à la vitesse au fluide la quantité suivante :

$$\frac{d\mathbf{u}}{dt} = -\frac{m_d}{\rho_d \mathcal{V}} \frac{d\mathbf{V}}{dt} . \quad (6.9)$$

6.1.3 Interaction spray/choc - théorie

6.1.3.1 Détermination analytique de la vitesse Eulérienne du brouillard

En one-way, l'évolution des gouttes, décrite dans la section 6.1.2.2 (page 171), nous permet de connaître analytiquement leur vitesse et position en fonction du temps lorsqu'elles sont soumises à un champ de vitesse constant. Connaissant la vitesse de propagation du choc $V_s = M_s c$ – avec c la vitesse du son du milieu (2) – et la vitesse du gaz derrière le choc u_g , on peut déduire la vitesse et la distance parcourue par une goutte en fonction du temps t' pendant lequel elle a été exposée au gaz se déplaçant à u_g .

$$\begin{cases} V(t', \tau_p, u_g) = u_g (1 - e^{-t'/\tau_p}) , \\ X(t', \tau_p, u_g) = \int_0^{t'} V(t, \tau_p, u_g) dt = u_g (t' - \tau_p (1 - e^{-t'/\tau_p})) . \end{cases} \quad (6.10)$$

A partir de ces équations, il est possible de remonter aux caractéristiques Eulériennes du spray. Prenons un point quelconque dans le brouillard à un instant t , à l'abscisse x , noté (x, t) .

L'origine des temps correspond au début de l'interaction du brouillard, initialement à $x = 0$ avec le choc. Pour chaque point (x, t) du diagramme (cf fig 6.2), deux configurations sont possibles selon qu'il a subi le passage du choc ($x \geq M_s c t$) ou non.

Il est possible de connaître les positions et durées initiales de chaque goutte. Soient x' la distance parcourue par la goutte après interaction avec le choc et t' la durée écoulée. Alors la distance parcourue par la goutte pendant t' est $x' = X(t') = x - x_0$. De plus, la distance parcourue par l'onde de choc est $M_s c t' = M_s c t - x_0$.

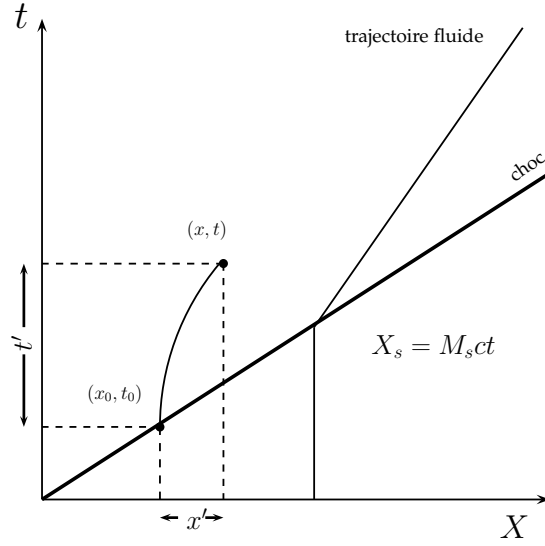


FIG. 6.2: Diagramme (x, t) du système avec X_s la position du choc, x' la distance parcourue par une goutte initialement à x_0 et t' la durée de l'interaction de la goutte avec le choc.

Les deux inconnues x' et t' satisfont les deux équations suivantes :

$$\begin{cases} X(t', \tau_p, u_g) = x - x_0 , \\ M_s c t' = M_s c t - x_0 . \end{cases} \quad (6.11)$$

En soustrayant ces deux équations, on obtient

$$u_g \tau_p \left(e^{-t'/\tau_p} - 1 \right) + M_s c t - x = (M_s c - u_g) t' . \quad (6.12)$$

En résolvant cette équation (cf. Annexe 6.1.6), on obtient

$$t'(x, t, u_g) = \tau_p \mathcal{W} \left(\frac{u_g \exp \left(\frac{u_g \tau_p - M_s c t + x}{\tau_p (M_s c - u_g)} \right)}{M_s c - U_g} \right) + \frac{M_s c t - u_g \tau_p - x}{M_s c - u_g} , \quad (6.13)$$

avec \mathcal{W} la fonction de Lambert [132]. Elle permet d'inverser la fonction $\alpha \exp(\alpha) = \beta$. \mathcal{W} vérifie alors $\alpha = \mathcal{W}(\beta)$. Il est donc possible d'avoir la vitesse Eulérienne du brouillard :

$$u(x, t, \tau_p, u_g) = V(t'(x, t, u_g), \tau_p, u_g) = u_g \left(1 - \exp(-t'(x, t)/\tau_p) \right) . \quad (6.14)$$

6.1.3.2 Détermination analytique de la longueur de pénétration du brouillard

Il est possible, en utilisant la conservation de la masse, de déterminer les caractéristiques globales du spray en zone post-choc. Si l'on suppose que le temps t de l'interaction du choc

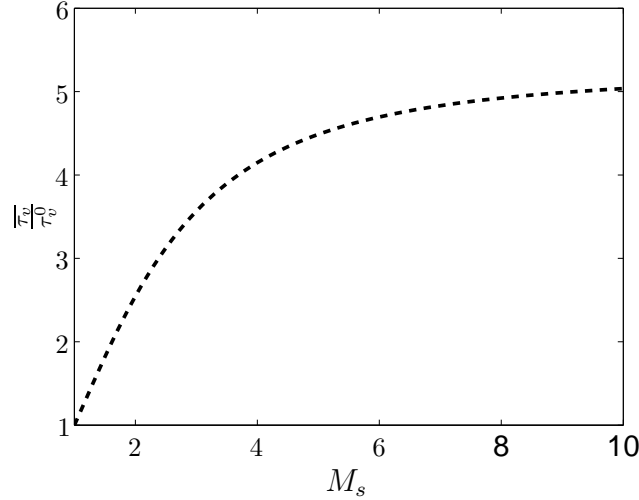


FIG. 6.3: Évolution de $\overline{\tau}_v/\tau_v^0$ en fonction de M_s .

avec le brouillard est très grand devant le temps de relaxation τ_p , le déplacement de la première particule peut être approché par $X(t, \tau_p/t \rightarrow 0) = u_g t$. Cela nous permet de déterminer la longueur du brouillard après le passage du choc :

$$L(t, \tau_p/t \rightarrow 0, u_g) = M_s c t - X(t, \tau_p/t \rightarrow 0, u_g) = (M_s c - u_g) t . \quad (6.15)$$

Étant donné que les gouttes incompressibles initialement dans un brouillard de longueur $M_s c t$ se retrouvent dans un brouillard de longueur $(M_s c - u_g) t$, on en déduit que la fraction massique de gouttes post-choc $\overline{\tau}_v$ est liée à la fraction massique de gouttes pré-choc τ_v^0 par

$$\overline{\tau}_v(t, \tau_p, u_g) = \tau_v^0 \frac{M_s c}{M_s c - u_g} . \quad (6.16)$$

Ces longueurs de spray initiales et post-choc sont représentées par la figure 6.4. A l'aide de la relation 6.1, on arrive à

$$\frac{\overline{\tau}_v}{\tau_v^0} = \frac{1}{\frac{\gamma-1}{\gamma+1} + \frac{2}{\gamma+1} \frac{1}{M_s^2}} . \quad (6.17)$$

$\frac{\overline{\tau}_v}{\tau_v^0}$ a été tracé en fonction de M_s sur la figure 6.3. On observe que lorsque $M_s \rightarrow \infty$, $\frac{\overline{\tau}_v}{\tau_v^0}$ tend vers $(\gamma + 1)/(\gamma - 1) = 5.25$, valeur que $\frac{\overline{\tau}_v}{\tau_v^0}$ ne pourra pas dépasser.

Dans le cas où les gouttes ont une inertie qui ne peut plus être négligée, alors on obtient le taux de charge moyen après passage du choc (en combinant les équations 6.10 et 6.15) :

$$\overline{\tau}_v(t, \tau_p, u_g) = \tau_v^0 \frac{M_s c}{M_s c - u_g + u_g \frac{\tau_p}{t} (1 - \exp(-t/\tau_p))} . \quad (6.18)$$

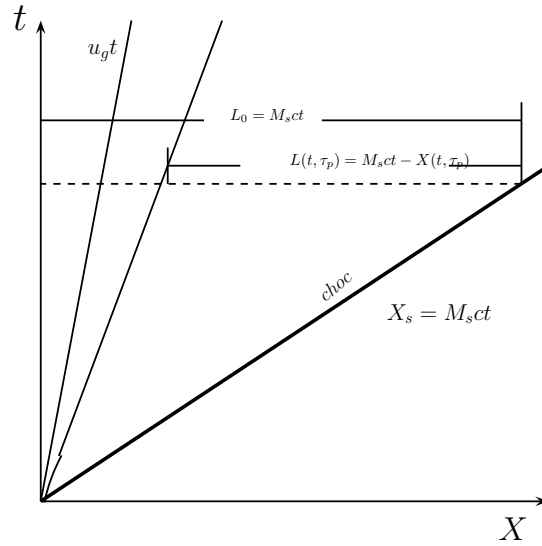


FIG. 6.4: Longueur du brouillard pré et post spray.

Les relations 6.16 et 6.18 impliquent qu'il y a donc une certaine accumulation des gouttes après le passage d'une onde de choc, au niveau de l'interface perméable gaz/milieu diphasique.

6.1.3.3 Détermination analytique de la densité Eulérienne du brouillard

Afin de poursuivre cette étude, une hypothèse doit être posée. Supposons que les gouttes sont régulièrement disposées initialement à une distance Δx_0 les unes des autres. Le brouillard est donc initialement constitué d'un réseau cubique de gouttes. Le taux de charge volumique τ_v^0 de ce brouillard est donc le rapport entre le volume occupé par les gouttes divisé par le volume de gaz correspondant.

La configuration initiale des gouttes et le taux de charge initial sont représentés par la figure 6.5.

On montre que dans une maille cubique, ce taux de charge vaut :

$$\tau_v^0 = \frac{\pi a^3}{6 \Delta x_0^3} . \quad (6.19)$$

Or, le choc se propageant sur la direction x , on en déduit que

$$\tau_v(t, \tau_p, u_g) = \frac{\pi a^3}{6 \Delta x_0^2 \Delta x(t, \tau_p, u_g)} . \quad (6.20)$$

De plus, d'après la section 6.1.2.2 (page 171), on a :

$$\tau_p = \frac{18 \mu}{\rho a^2} . \quad (6.21)$$

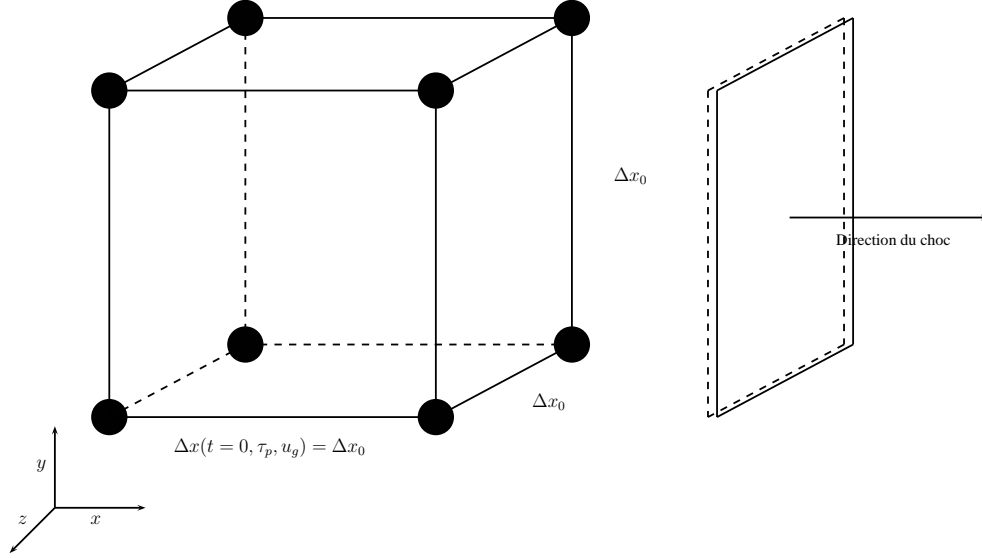


FIG. 6.5: Distance initiale entre les gouttes

Prenons deux gouttes 1 et 2 voisines sur x , de positions initiales X_2^0 et X_1^0 telles que $X_2^0 - X_1^0 = \Delta x_0$. Grâce à la section précédente, il nous est possible de connaître le temps t' pendant lequel ces gouttes ont été soumises au passage du choc. Notons $\Delta t = \Delta x_0 / M_s c$ le temps que mettra le choc pour parcourir la distance entre les 2 gouttes. La distance entre ces deux gouttes en fonction de t' est donc

$$\begin{aligned} \Delta x(t', \tau_p, u_g) &= X_2(t' - \Delta t, \tau_p, u_g) - X_1(t', \tau_p, u_g) , \\ &= (X_2^0 + X(t' - \Delta t, \tau_p, u_g)) - (X_1^0 + X(t', \tau_p, u_g)) , \\ &= \Delta x_0 + X(t' - \Delta t, \tau_p, u_g) - X(t', \tau_p, u_g) . \end{aligned} \quad (6.22)$$

A partir des équations 6.10, 6.19, 6.21 et 6.22, on en déduit que

$$\Delta x(t', \tau_p, u_g) = \Delta x_0 \left(1 - \frac{u_g}{M_s c} \right) + u_g \tau_p \exp(-t'/\tau_p) \left(\exp \left(\sqrt{\frac{18\mu}{\rho\tau_p}} \sqrt[3]{\frac{\pi}{6\tau_v^0}} \frac{1}{M_s c \tau_p} \right) - 1 \right) . \quad (6.23)$$

De plus, comme $\tau_v(t', \tau_p) \propto 1/\Delta x(t', \tau_p)$ (d'après l'équation 6.20), alors on en déduit que

$$\frac{\tau_v(t', \tau_p, u_g)}{\tau_v^0} = \left[\left(1 - \frac{u_g}{M_s c} \right) + \underbrace{\sqrt{\frac{18\mu}{\rho\tau_p}} \sqrt[3]{\frac{\pi}{6\tau_v^0}} u_g \tau_p \exp(-t'/\tau_p) \left(\exp \left(\sqrt{\frac{18\mu}{\rho\tau_p}} \sqrt[3]{\frac{\pi}{6\tau_v^0}} \frac{1}{M_s c \tau_p} \right) - 1 \right)}_A \right]^{-1} . \quad (6.24)$$

A ce stade, nous pouvons tirer deux conclusions importantes. La première est que le coefficient

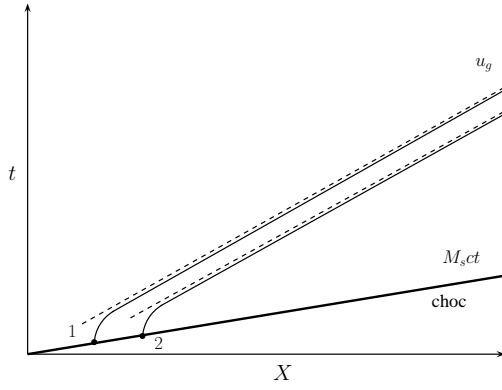


FIG. 6.6: 1-way

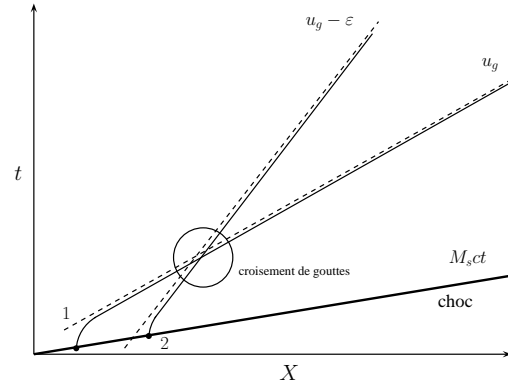


FIG. 6.7: 2-way

FIG. 6.8: Trajectoire des gouttes au passage du choc en 1 et 2-way

\mathcal{A} est nécessairement positif. Par conséquent, nous avons systématiquement

$$\tau_v(t', \tau_p, u_g) < \tau_v^0 \frac{M_{sc}}{M_{sc} - u_g} = \tau_v^{max}, \quad (6.25)$$

qui est la valeur maximale théorique de la densité post choc estimée par 6.18. Donc, quelque soit les paramètres physiques utilisés, en one-way, la densité maximale de goutte pouvant apparaître est majorée par la densité moyenne qu'aurait un spray de très faible inertie.

La seconde conclusion est que, pour des τ_p faibles, nous avons $\mathcal{A} \rightarrow 0$. Dans ce cas, la densité de goutte après le choc tend à être constante et égale à τ_v^{max} , comme nous l'avons démontré dans le paragraphe 6.1.3.2 (page 174).

Par conséquent, quelle que soit l'inertie de la goutte, la densité maximale apparaissant dans le brouillard post-choc se produit pour un spray où $\tau_p \rightarrow 0$. Finalement, nous pouvons constater la non linéarité de $\frac{\tau_v(t', \tau_p)}{\tau_v^0}$ en fonction de τ_v^0 , t et x .

6.1.3.4 Extension de la théorie à l'interaction 2-way

Dans la mesure où les interactions entre les gouttes et le gaz existent, la vitesse du gaz après le passage de la première goutte implique que cette vitesse diminue. En effet, la quantité de mouvement étant conservée au passage de chaque goutte, la vitesse du gaz va diminuer en amplitude d'une valeur $\epsilon(u_g)$. La goutte suivante aura donc une vitesse asymptotique de $u_g - \epsilon(u_g)$. Les différences notables entre le 1-way et le 2-way sont représentées par les figures 6.6 et 6.7, montrant l'apparition probable de collisions ou d'accumulation entre les gouttes dans le cas 2-way. Dans ce cas, la fraction volumique des gouttes augmentera significativement à l'extrémité du brouillard. En effet, la vitesse de gaz post-choc n'ayant pas encore été ralentie

par la présence des gouttes lors de son entrée dans le brouillard, c'est à cet endroit que la vitesse de glissement des gouttes sera la plus élevée. C'est donc aussi à cet endroit que le gaz perdra le plus de quantité de mouvement et que ε sera le plus élevé.

Étant donné que la densité de gouttes ainsi que leur vitesse en two-way n'a pas de solution analytique, nous pouvons tenter de déterminer des caractéristiques moyennes du brouillard et du gaz derrière l'onde de choc.

Nous tenterons de déterminer la vitesse moyenne du gaz post-choc \tilde{u}_g . Tout d'abord, considérons un élément de volume \mathcal{V} dans lequel initialement se trouve un volume $\tau_v^0 \mathcal{V}$ de gouttes. Nous ferons cette analyse dans le cas où les gouttes ont atteint la vitesse du gaz post-choc \tilde{u}_g . En posant l'hypothèse que l'énergie cinétique de ce volume correspond à l'énergie cinétique du gaz seul s'il n'y avait pas de gouttes, on obtient directement, par conservation de l'énergie :

$$\rho_g u_g^2 \mathcal{V} = \rho'_g \tilde{u}_g^2 \mathcal{V}' + \tau_v^0 \mathcal{V}' \rho_d \tilde{u}_g^2, \text{ où } \mathcal{V}' \simeq \mathcal{V} \left(1 - \frac{u_g}{M_s c}\right) \text{ et } \frac{\rho'_g}{\rho_g} = \frac{p_1 T_2}{p_2 T_1} = \frac{(\gamma + 1) M_s^2}{2 + (\gamma - 1) M_s^2}, \quad (6.26)$$

avec ρ_d la masse volumique de la goutte. D'où

$$\tilde{u}_g = \frac{u_g}{\sqrt{1 - \frac{u_g}{M_s c} \sqrt{\frac{(\gamma+1)M_s^2}{2+(\gamma-1)M_s^2} + \tau_v^0 \frac{\rho_d}{\rho_g}}}}. \quad (6.27)$$

En reprenant le taux de charge volumique moyen donné par l'expression 6.18, on obtient :

$$\tilde{\tau}_v = \tau_v^0 \frac{M_s c}{M_s c - \tilde{u}_g}. \quad (6.28)$$

Il est possible de montrer qu'un pic de densité apparaît à l'extrémité du brouillard. Tout d'abord, considérons une goutte se trouvant à l'extrémité du brouillard à gauche. Celle-ci sera soumise à un gaz dont la vitesse est u_g au temps $t = 0$. Alors, $t' = t$. Prenons une seconde goutte à sa droite, dont nous considérons que la vitesse du gaz après le passage du choc sera constant et égal à $u_g - \epsilon$. En considérant l'équation 6.22, il est possible de déterminer le pic de densité à l'extrémité du brouillard. En effet, nous avons

$$\begin{aligned} \Delta x(t, \tau_p, u_g) &= X_2(t - \Delta t, \tau_p, u_g - \epsilon) - X_1(t, \tau_p, u_g), \\ &= (X_2^0 + X(t - \Delta t, \tau_p, u_g - \epsilon)) - (X_1^0 + X(t, \tau_p, u_g)), \\ &= \Delta x_0 + X(t - \Delta t, \tau_p, u_g - \epsilon) - X(t, \tau_p, u_g). \end{aligned} \quad (6.29)$$

Il est dès lors possible d'exprimer $\Delta x(t, \tau_p, u_g)$:

$$\Delta x(t, \tau_p, u_g) = \Delta x_0 \left(1 - \frac{u_g}{M_s c} \right) + u_g \tau_p \exp(-t/\tau_p) \left(\exp \left(\sqrt{\frac{18\mu}{\rho \tau_p}} \sqrt{\frac{\pi}{6\tau_v^0}} \frac{1}{M_s c \tau_p} \right) - 1 + \frac{\epsilon}{u_g} \right) + \epsilon (t - \tau_p) . \quad (6.30)$$

On peut démontrer que $\Delta x(t, \tau_p, u_g)$ s'annule pour une certaine valeur de $t > 0^2$ si $\Delta x_0 \left(1 - \frac{u_g}{M_s c} \right) < \tau_p \epsilon$. Or, si $\Delta x(t, \tau_p, u_g)$ s'annule, alors nous obtenons une singularité de la densité à l'entrée du brouillard. Les résultats numériques donnés ici n'en rendront pas compte, simplement car l'hypothèse $\epsilon = \text{cste}$ permet de donner une idée du phénomène mais est physiquement incorrecte. En effet, la vitesse du gaz à la droite de la première goutte n'est pas constante et égale à $u_g - \epsilon$ mais est strictement croissante et varie continûment de $u_g - \epsilon$ à u_g . On peut montrer en effet que $\epsilon(t) = \frac{u_g \tau_v^0 \rho_d}{\rho} (1 - \exp(-t/\tau_p))$, avec ρ la masse volumique du gaz dans la zone post-choc.

6.1.4 1D - résultats numériques

Les comparaisons entre la théorie développée dans la section précédente et les simulations ont été effectuées ici. Nous étudions tout d'abord les différences entre les résultats théoriques et numériques de la vitesse des gouttes dans le brouillard dans le cas sans couplage de quantité de mouvement (1-way). La vitesse des gouttes et la vitesse du gaz ont été tracées pour cinq diamètres distincts : $d = \{10 \text{ nm}, 1 \mu\text{m}, 10 \mu\text{m}, 20 \mu\text{m}, 50 \mu\text{m}\}$, après un temps de simulation de $t = 1.756 \text{ ms}$, pour un nombre de Mach $M_s = 1.1$. Dans le cas de très petites gouttes ($d = 10 \text{ nm}$ et $d = 1 \mu\text{m}$), on peut estimer que leur vitesse sera égale à celle du gaz qui les entoure. Par conséquent, nous constatons sur les figures 6.9a et 6.9b deux zones : la zone pré-choc où la vitesse des gouttes et la vitesse du gaz sont toutes les deux nulles ; et la zone post-choc où la vitesse des gouttes et du gaz sont toutes les deux égale à u_g .

Dans le cas où l'inertie des gouttes ne peut plus être négligée, celles-ci accélèrent afin d'atteindre progressivement la vitesse du gaz. La durée nécessaire pour que les gouttes tendent vers la vitesse du gaz u_g est d'autant plus grande que τ_p est élevé (cf. figures 6.9c, 6.9d et 6.9e), soit que le diamètre est grand.

Nous constatons une très bonne concordance entre la vitesse analytique donnée par l'équation 6.14 et les résultats numériques, présentés sur la figure 6.9.

Concernant le taux de charge volumique des gouttes après le passage du choc, nous avons vu que dans le cas 1-way, celle-ci était donnée par l'équation 6.24. Cette équation nous a permis

$$^2 t = \tau_p \left[\mathcal{W} \left(\left(\frac{-u_g}{\epsilon} (\exp(\Delta x_0 / (M_s c \tau_p)) - 1) \right) \exp \left(1 - \frac{\Delta x_0}{\tau_p \epsilon} \left(1 - \frac{u_g}{M_s c} \right) \right) \right) - \frac{\Delta x_0 \left(1 - \frac{u_g}{M_s c} \right)}{\tau_p \epsilon} + 1 \right]$$

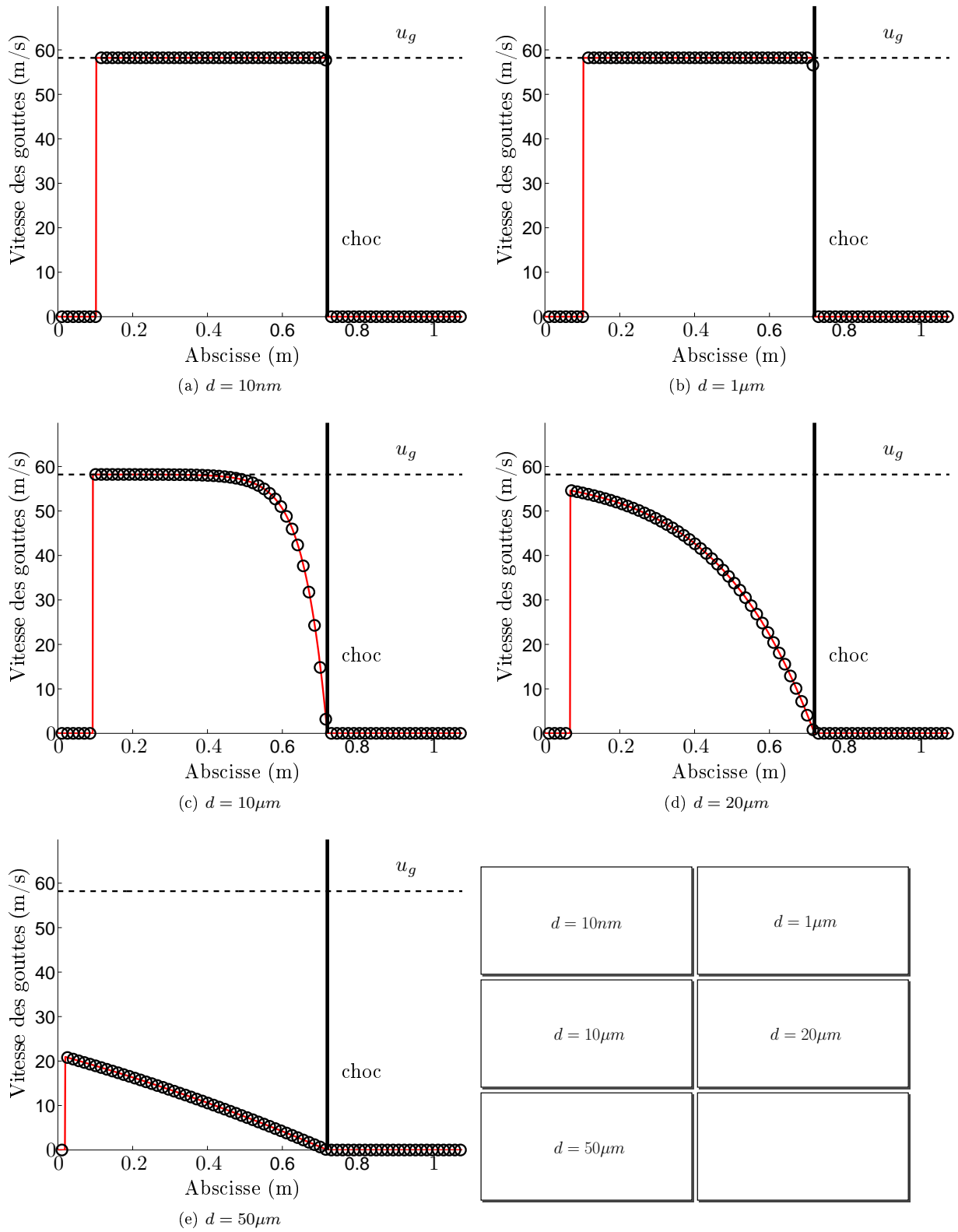


FIG. 6.9: Vitesse Eulérienne des gouttes en 1-way. Résultats numériques (○), théoriques (—) ainsi que leur majoration (u_g) pour différents diamètres. $t = 1.756ms$, $M_s = 1.1$, $u_g = 58.21m/s$

de déterminer le taux de charge maximum dans la zone post-choc (équation 6.25).

La figure 6.10 nous montre les résultats numériques (courbes bleues), ainsi que la solution analytique (équation 6.24 : ligne rouge), le taux de charge maximum analytique (équation 6.25 : τ_v^{max}) et le taux de charge initial dans la zone pré-choc (τ_v^0).

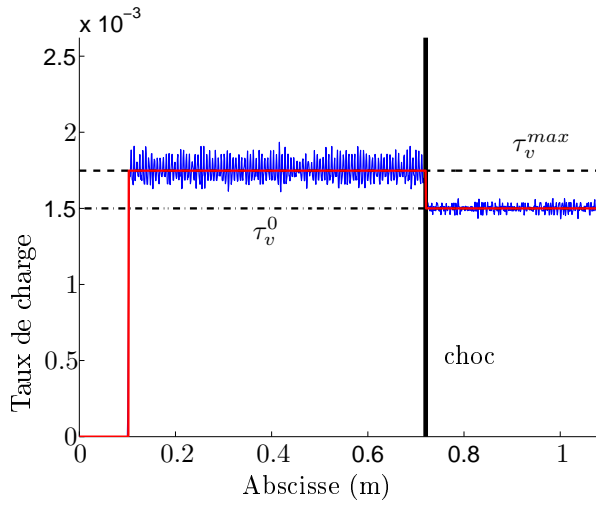
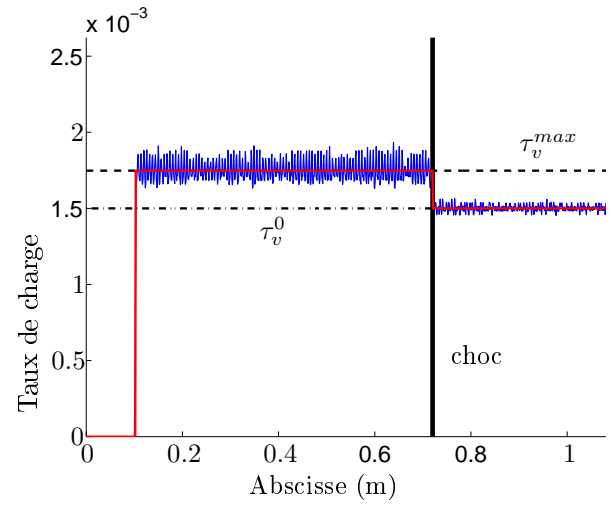
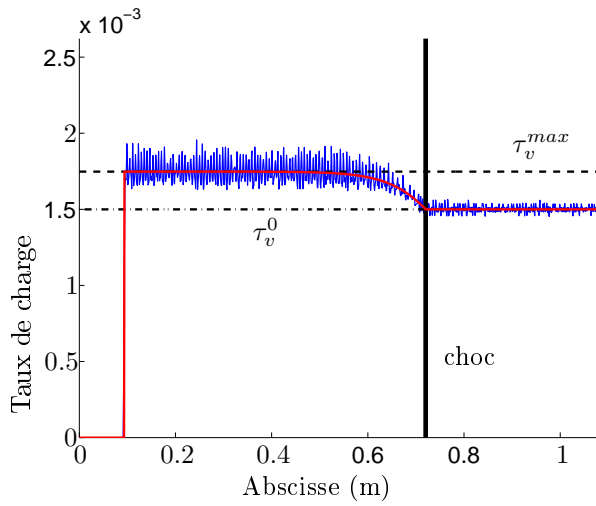
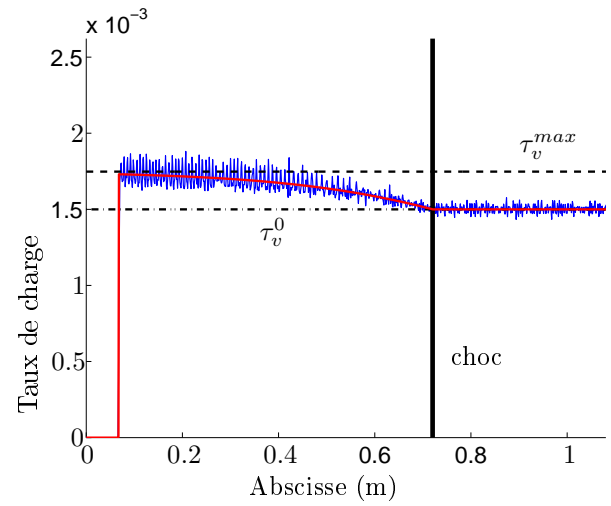
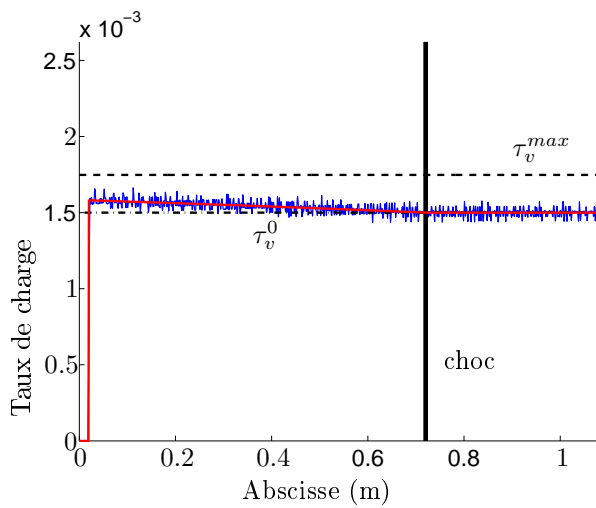
Tout d'abord, nous constatons que le résultat numérique peut dépasser localement la limite maximale théorique que nous avons déterminé. En effet, de part le formalisme Lagrangien utilisé, un bruit (naturel) apparaît. Lors de la distribution des gouttes, celles-ci étant aléatoirement disposées, il existe des zones où le taux de charge est plus élevé que celui prescrit, et d'autres zones où il est plus faible. En moyenne, le taux de charge est égal à celui imposé. Ainsi, à ce bruit près, nous constatons un très bon accord entre le taux de charge spatial provenant du résultat numérique et du taux de charge déterminé analytiquement par l'équation 6.24. Ce taux de charge tend vers la limite maximale donnée par l'équation 6.25.

Nous pouvons constater, comme précédemment, que le taux de charge tend d'autant plus rapidement vers τ_v^{max} que les gouttes sont petites, et donc que leur inertie est faible. En effet, si on considère leur inertie comme très faible ($\tau_v/t \rightarrow 0$), les gouttes passeront quasi-instantanément d'une vitesse nulle à une vitesse u_g au passage du choc. Nous avons vu que le taux de charge augmentera, mais de manière uniforme (figures 6.10a et 6.10b), tandis que pour des inertie plus élevées, leur taux de charge augmenteront progressivement vers τ_v^{max} et-ce d'autant plus lentement que les gouttes sont grosses (figures 6.10c, 6.10d et 6.10e).

Néanmoins, nous constatons un très bon accord entre l'estimation théorique de la densité de goutte et du résultat numérique.

Nous venons de voir que les relations établies dans un formalisme one-way sont validées par les résultats de simulations numériques. Nous avons donc naturellement tenté d'étendre cette théorie en 2-way. Malgré l'absence de solution analytique, un bilan énergétique a permis de déduire quelques caractéristiques de la vitesse et de la densité de gouttes. Ces simulations ont été effectuées pour des diamètres $d = \{10 \mu m, 20 \mu m, 50 \mu m\}$. Les résultats numériques sont présentés pour un temps $t = 1.756 ms$. Tout d'abord, nous analysons la vitesse des gouttes du brouillard. Celle-ci est représentée sur la figure 6.11.

Tout d'abord, nous remarquons que contrairement au cas 1-way, un pic de vitesse se produit à l'entrée du brouillard, une fois que le choc l'a traversé. Ceci est expliqué dans la section précédente : de part le couplage 2-way, les premières gouttes vont ralentir le gaz qui entraînera les gouttes suivantes. Par conséquent, la vitesse de gaz qui porte les gouttes dans le brouillard n'est plus constant et diminue au fur et à mesure que celui-ci entraîne des gouttes. Cette diminution de proche en proche va impliquer une vitesse différente pour les gouttes qui se

(a) $d = 10nm$ (b) $d = 1\mu m$ (c) $d = 10\mu m$ (d) $d = 20\mu m$ (e) $d = 50\mu m$

$d = 10nm$	$d = 1\mu m$
$d = 10\mu m$	$d = 20\mu m$
$d = 50\mu m$	

FIG. 6.10: Fraction volumique de gouttes en 1-way. Résultats numériques (—), théoriques (---) ainsi que leur minoration (τ_v^0) et majoration (τ_v^{max}) pour différents diamètres. $t = 1.756ms$

succèdent. Celles-ci ayant une vitesse tendant vers la vitesse du gaz, elles vont tendre à aller vers u_g sur le bord gauche du brouillard (le gaz n'ayant pas été ralenti avant), pour tendre en moyenne vers \tilde{u}_g au sein du brouillard. Ce pic de vitesse est visible sur les figures 6.11a et 6.11b. Dans le cas 6.11c, nous constatons que le pic n'est pas apparent. Cela est dû au fait que les gouttes sont très balistiques, et que le pic n'est pas encore formé car les gouttes sont encore en cours d'accélération. Ce pic sera visible dès lors que les gouttes dépasseront la vitesse \tilde{u}_g .

Il est aussi intéressant de noter que le comportement des gouttes se distinguent en deux zones. La première zone est le pic de vitesse dû à la diminution de la vitesse du gaz en entrée du brouillard, comme nous l'avons vu précédemment. Le second est l'augmentation progressive de la vitesse des gouttes lorsque l'on s'éloigne de l'onde de choc. Cette augmentation de vitesse est similaire à celle obtenue dans le cas 1-way, à ceci près que la vitesse asymptotique des gouttes n'est plus $u_g = 58.21m/s$ mais $\tilde{u}_g = 39.0m/s$. Cette vitesse limite est visible sur les figures 6.11a et 6.11b où l'on constate un plateau de vitesse des gouttes avant le pic de vitesse.

Finalement, l'étude du taux de charge de gouttes dans le gaz porteur a été effectué en 2-way. De même que pour la vitesse du brouillard, une solution analytique du taux de charge n'a pu être déterminée. C'est pourquoi seuls des comportements globaux ont pu être déterminés par une méthode similaire à précédemment.

Tout d'abord, nous remarquons qu'à l'instar de la vitesse dans le brouillard, le taux de charge de goutte possède lui aussi un pic proche du bord du brouillard. Ce phénomène est expliqué par la figure 6.5 : les gouttes à l'extrémité du brouillard seront mises en mouvement avant leur voisines de droite. Elles se rapprocheront donc entre elles, et ce d'autant plus que leur inertie est faible. En effet, le déplacement effectué par la première goutte avant que la deuxième soit touchée par l'onde de choc sera d'autant plus grand que la première goutte est légère, sa mise en mouvement se faisant sur un temps plus court. Nous pouvons constater par exemple que dans le cas $d = 10\mu m$ (figure 6.12a) le pic de densité atteint une valeur plus élevée que dans le cas où $d = 20\mu m$ (figure 6.12b).

La densité de gouttes atteinte avant ce pic est plus faible que celle atteinte dans le cas 1-way. En effet, puisque la vitesse à l'équilibre énergétique \tilde{u}_g est inférieure à la vitesse u_g du cas 1-way. Le taux de charge dans ce milieu (i.e. loin du bord du brouillard et loin de l'onde de choc) ne tendra plus vers τ_v^{max} mais plutôt vers $\tilde{\tau}_v$ (cf équation 6.28). Dans le cas où les gouttes sont très inertielles (figure 6.12c), le temps écoulé depuis le début de la simulation ($t = 1.756$) étant faible devant $\tau_p = 3.937ms$, les gouttes n'auront pas le temps d'atteindre la vitesse du gaz porteur. L'entraînement des gouttes n'est pas complètement établi, nous ne voyons donc pas le pic de densité dû à la variation de vitesse à gauche, ni le plateau de densité dans le brouillard.

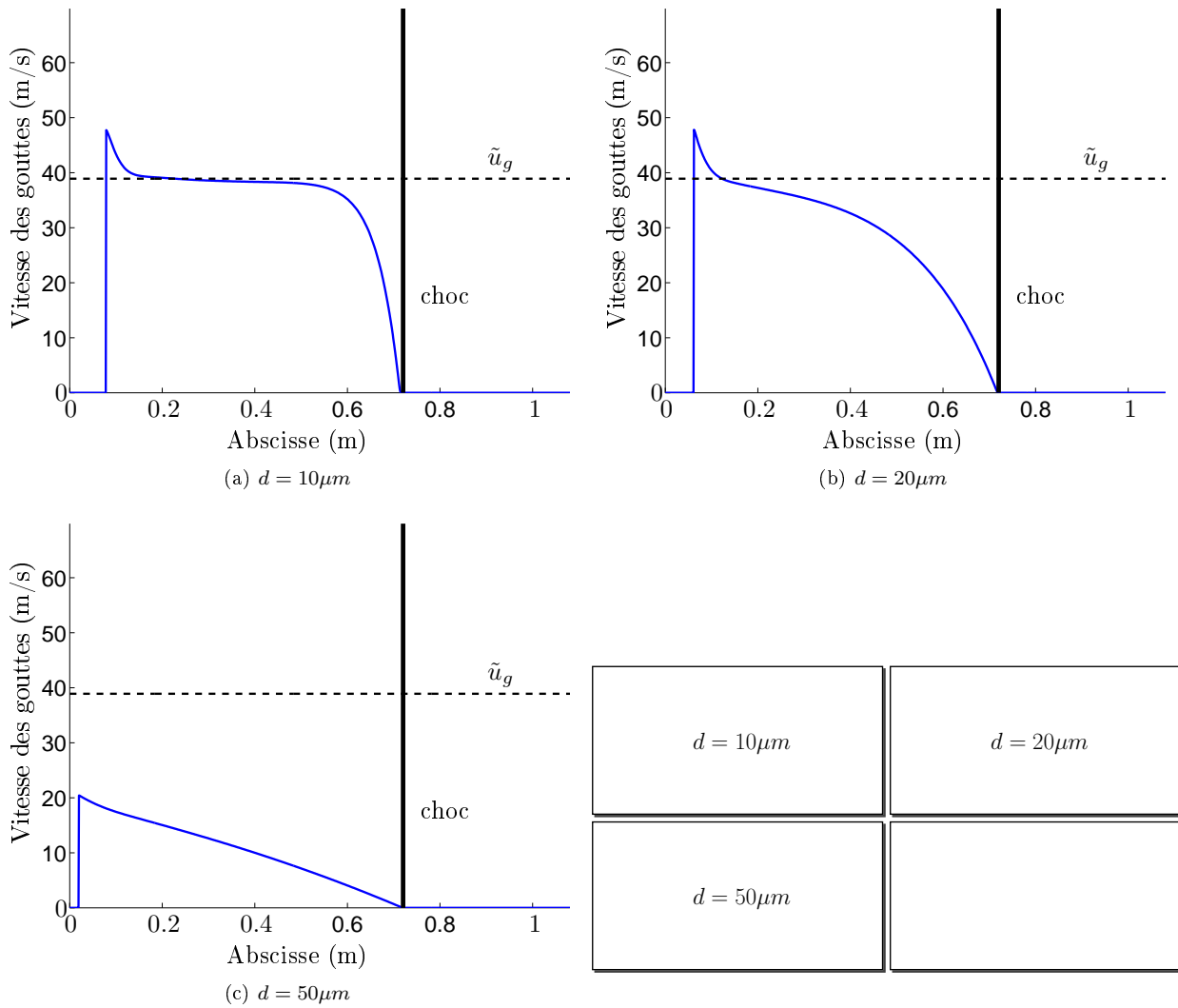


FIG. 6.11: Vitesse Eulérienne des gouttes en 2-way. Résultats numériques (—) ainsi que la vitesse moyenne du gaz post-choc \tilde{u}_g (Eq. 6.27) pour différents diamètres. $t = 1.756ms$

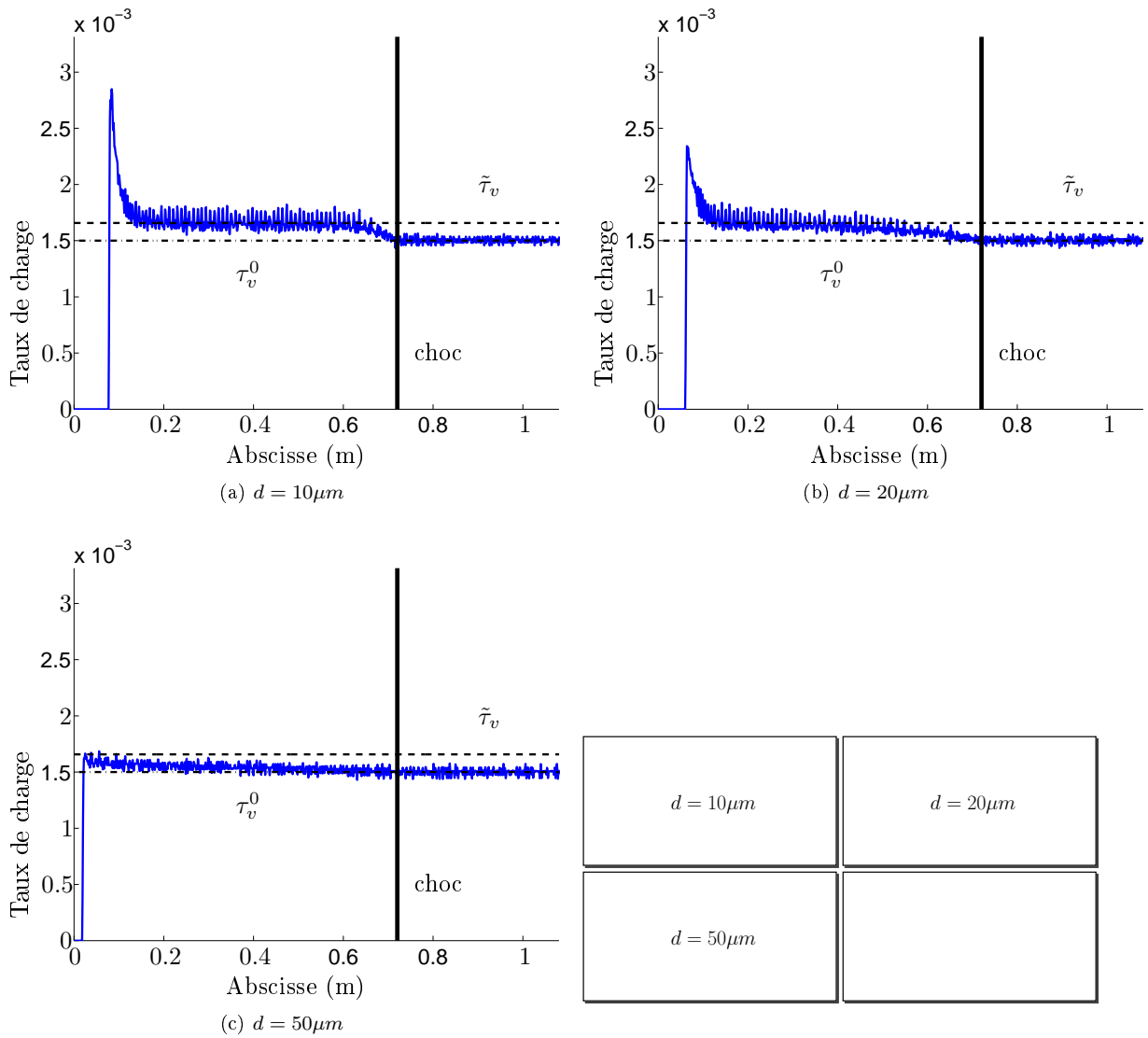


FIG. 6.12: Fraction volumique de gouttes en 2-way. Résultats numériques (—) ainsi que leur minoration (τ_v^0) et la densité moyenne des gouttes post-choc \tilde{u}_g (Eq. 6.27) pour différents diamètres. $t = 1.756ms$

6.1.5 Conclusion

Nous venons de voir que la présence d'une onde de choc dans un brouillard de gouttes peut avoir un impact non négligeable sur la modification de sa topologie. Nous avons réussi à déterminer un modèle permettant de déduire la topologie de ce brouillard lors de sa traversée en fonction du temps et du temps caractéristique des gouttes τ_p dans le cas 1-way. Nous avons de même réussi à montrer numériquement une augmentation significative de la densité de gouttes à l'interface gaz/milieu diphasique. Une accumulation de particules va se produire au niveau de cette interface perméable. La détermination des caractéristiques du brouillard dans le cas d'une traversée d'un choc permettra plusieurs études par la suite. Une première étude a déjà été effectuée dans le cas d'une détonation dans un milieu chargé en particules solides [129], i.e. pour des nombres de Mach gaz aux alentours de 6. Cependant, dans le cas d'auto-allumage d'un brouillard de fuel en présence d'une onde de choc, les gouttes en évaporation vont entraîner une modification de la température du gaz.

6.1.6 Annexe : Résolution de l'équation 6.12

Nous partons de l'équation 6.12 :

$$t'(M_s c - u_g) = u_g \tau_p \left(\exp \left(-\frac{t'}{\tau_p} \right) - 1 \right) + M_s c t - x . \quad (6.31)$$

Nous obtenons rapidement :

$$\Rightarrow \left[\frac{t'}{\tau_p} - \frac{M_s c t - x - u_g \tau_p}{\tau_p (M_s c - u_g)} \right] \exp \left(\frac{t'}{\tau_p} - \frac{M_s c t - x - u_g \tau_p}{\tau_p (M_s c - u_g)} \right) \exp \left(\frac{M_s c t - x - u_g \tau_p}{\tau_p (M_s c - u_g)} \right) = \frac{u_g}{M_s c - u_g} \quad (6.32)$$

On pose $\alpha = \frac{t'}{\tau_p} - \frac{M_s c t - x - u_g \tau_p}{\tau_p (M_s c - u_g)}$ ainsi que $\beta = \frac{u_g}{M_s c - u_g} \exp \left(-\frac{M_s c t - x - u_g \tau_p}{\tau_p (M_s c - u_g)} \right)$.

L'équation précédente peut donc se ré-écrire sous la forme $\alpha \exp(\alpha) = \beta$. On obtient, grâce à la fonction \mathcal{W} de Lambert [132], $\alpha = \mathcal{W}(\beta)$.

Par conséquent, $\frac{t'}{\tau_p} - \frac{M_s c t - x - u_g \tau_p}{\tau_p (M_s c - u_g)} = \mathcal{W} \left[\frac{u_g}{M_s c - u_g} \exp \left(-\frac{M_s c t - x - u_g \tau_p}{\tau_p (M_s c - u_g)} \right) \right]$.

On obtient bien l'équation 6.13 :

$$t' = \tau_p \mathcal{W} \left[\frac{u_g}{M_s c - u_g} \exp \left(-\frac{M_s c t - x - u_g \tau_p}{\tau_p (M_s c - u_g)} \right) \right] + \frac{M_s c t - x - u_g \tau_p}{M_s c - u_g} . \quad (6.33)$$

6.2 Normalisation

Nous introduisons tout d'abord les grandeurs utilisées par la suite pour normaliser les équations d'évolutions de la section 2.2.1 (page 25).

$$\left\{ \begin{array}{ll} x_i = L_0 x_i^+ & u_i = u_0 u_i^+ , \\ t = \frac{L_0}{u_0} t^+ & \rho = \rho_\infty \rho^+ , \\ T = T_\infty T^+ & p = \rho_\infty \frac{R}{W_\infty} T_\infty p^+ , \\ Cp = Cp_\infty Cp^+ & \mu = \mu_\infty \mu^+ , \\ h_{s,k} = h_{s,k,\infty} h_{s,k}^+ = Cp_\infty T_\infty h_{s,k}^+ & W = W_\infty W^+ , \\ R = R_\infty R^+ . & \end{array} \right. \quad (6.34)$$

Les grandeurs annotées X_0 correspondent aux termes permettant de passer des dimensions de code aux dimensions physiques. Les termes annotés X_∞ sont les grandeurs de référence pour la thermodynamique.

Loi d'état.

Sachant que le gaz est considéré comme parfait dans cette étude, la relation entre la pression $P[Pa]$, sa masse volumique $\rho[kg.m^{-3}]$, sa température $T[K]$, sa masse molaire $W[kg.mol^{-1}]$ et la constante des gaz parfaits $R[J.K^{-1}]$ est :

$$p = \rho \frac{RT}{W} . \quad (6.35)$$

Une fois normalisée, cette équation devient

$$p^+ = \rho^+ \frac{T^+}{W^+} . \quad (6.36)$$

De plus, la détermination du nombre de Mach nous est donnée par

$$u_0^2 = M^2 \gamma_\infty (Cp_\infty - Cv_\infty) T_\infty = Cp_\infty T_\infty M^2 (\gamma_\infty - 1) . \quad (6.37)$$

Vitesses de correction avec les espèces.

Les vitesses de correction des espèces, donnée par l'équation 2.5 devient :

$$V_i^C = \sum_{k=1}^{N_S} \frac{\mu_\infty \mu^+}{\rho_\infty \rho^+ Sc_k} \frac{\partial Y_k}{\partial x_0 x_i^+} = u_0 \sum_{k=1}^{N_S} \frac{\mu^+}{\rho^+ Re Sc_k} \frac{\partial Y_k}{\partial x_i^+} \quad (6.38)$$

$$= u_0 \sum_{k=1}^{N_S} D_k^\bullet \frac{\partial Y_k}{\partial x_i^+} = u_0 V_i^{C+} \quad \text{avec} \quad V_i^{C+} = \sum_{k=1}^{N_S} D_k^\bullet \frac{\partial Y_k}{\partial x_i^+} . \quad (6.39)$$

Vitesse de correction avec l'énergie.

De même pour la vitesse de correction de l'énergie, donnée par l'équation 2.7, et en utilisant la relation 6.37, on obtient :

$$E_i^C = \frac{u_0^3 \rho_\infty}{M^2 (\gamma_\infty - 1)} \rho^+ \sum_{k=1}^{N_S} h_{S,k}^+ D_k^\bullet \frac{\partial Y_k}{\partial x_i^+} = \frac{u_0^3 \rho_\infty}{M^2 (\gamma_\infty - 1)} E_i^{C+} . \quad (6.40)$$

Conservation de la masse.

En partant de l'équation de la conservation de la masse :

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial \rho u_i}{\partial x_i} = 0 , \quad (6.41)$$

et en remplaçant par les relations 6.34, il est possible de normaliser cette équation :

$$\frac{\partial \rho^+}{\partial t^+} + \frac{\partial \rho^+ u_i^+}{\partial x_i^+} = 0 . \quad (6.42)$$

Conservation de la quantité de mouvement.

Sur le même principe que la conservation de la masse, en partant de l'équation 2.1, et en remplaçant par les relations 6.34, il est possible de normaliser cette équation. Tout d'abord le terme de pression qui donne

$$\frac{\partial p}{\partial x_j} = \frac{\rho_\infty u_0^2}{\gamma_\infty M^2 x_0} \frac{\partial p^+}{\partial x_j^+} . \quad (6.43)$$

Les autres termes ne présentent pas de difficultés majeures :

– le terme d'évolution temporelle de la quantité de mouvement :

$$\frac{\partial \rho u_j}{\partial t} = \frac{\rho_\infty u_0^2}{x_0} \frac{\partial \rho^+ u_j^+}{\partial t^+} . \quad (6.44)$$

– le terme convectif :

$$\frac{\partial \rho u_i u_j}{\partial x_i} = \frac{\rho_\infty u_0^2}{x_0} \frac{\partial \rho^+ u_i^+ u_j^+}{\partial x_i^+} , \quad (6.45)$$

– le tenseur des contraintes visqueuses :

$$\begin{aligned} \tau_{ij} &= \mu \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right) - \frac{2}{3} \mu \frac{\partial u_k}{\partial x_k} \delta_{ij} \\ &= \frac{\mu_\infty u_0}{x_0} \left[\mu^+ \left(\frac{\partial u_i^+}{\partial x_j^+} + \frac{\partial u_j^+}{\partial x_i^+} \right) - \frac{2}{3} \mu^+ \frac{\partial u_k^+}{\partial x_k^+} \delta_{ij} \right] . \end{aligned} \quad (6.46)$$

Par conséquent, nous obtenons :

$$\frac{\partial \tau_{ij}}{\partial x_i} = \frac{\rho_\infty u_0^2}{x_0} \frac{\partial \tau_{ij}^+}{\partial x_i^+} \quad \text{avec} \quad \tau_{ij}^+ = \mu^+ \left(\frac{\partial u_i^+}{\partial x_j^+} + \frac{\partial u_j^+}{\partial x_i^+} \right) - \frac{2}{3} \mu^+ \frac{\partial u_k^+}{\partial x_k^+} \delta_{ij} . \quad (6.47)$$

A partir de ces différents termes normalisés, nous obtenons l'équation d'évolution de la quantité de mouvement normalisée :

$$\frac{\partial \rho u_j^+}{\partial t^+} + \frac{\partial \rho^+ u_i^+ u_j^+}{\partial x_i^+} = -\frac{1}{\gamma M^2} \frac{\partial p^+}{\partial x_j^+} + \frac{\partial \tau_{ij}^+}{\partial x_i^+} . \quad (6.48)$$

Conservation des espèces.

En utilisant la même méthode que pour le transport de la quantité de mouvement, nous partons de l'équation de transport des espèces 2.4. En remplaçant dans cette équation les grandeurs

physiques par les grandeurs normalisées, nous obtenons :

$$\frac{\rho_\infty u_0}{x_0} \frac{\partial \rho^+ Y_k}{\partial t^+} + \frac{\rho_\infty u_0}{x_0} \frac{\partial \rho^+ (u_i^+ + V_{k,i}^+) Y_k}{\partial x_i^+} = \frac{\rho_\infty}{x_0^2} \frac{\partial}{\partial x_i^+} \left[\rho D \frac{\partial Y}{\partial x_i^+} \right] + \dot{\omega}_k . \quad (6.49)$$

Le terme de diffusion doit être traité différemment. Sachant que nous avons $Sc = \frac{\mu}{\rho D}$ et $Re_0 = \frac{\rho_\infty u_0 x_0}{\mu_\infty}$, nous obtenons :

$$\frac{\rho_\infty}{x_0^2} D = \frac{\rho_\infty u_0}{x_0^2 u_0} \frac{\mu}{\rho Sc} = \frac{\rho_\infty u_0}{x_0} D^\bullet . \quad (6.50)$$

Nous obtenons finalement :

$$\frac{\partial \rho^+ Y_k}{\partial t^+} + \frac{\partial \rho^+ (u_i^+ + V_{k,i}^+) Y_k}{\partial x_i^+} = \frac{\partial}{\partial x_i^+} \left[\rho D^\bullet \frac{\partial Y}{\partial x_i^+} \right] + \dot{\omega}_k^+ , \text{ avec } \dot{\omega}_k = \frac{\rho_\infty u_0}{x_0} \dot{\omega}_k^+ . \quad (6.51)$$

Transport de l'énergie sensible.

L'énergie sensible est normalisée par :

$$e_s = \int_{T_\infty T_0^+}^{T_\infty T^+} C p_\infty C p^+ d(T_\infty T^+) - \frac{R_\infty R^+ T_\infty T^+}{W_\infty W^+} = C p_\infty T_\infty e_s^+ . \quad (6.52)$$

Nous pouvons donc normaliser l'équation de transport de l'énergie sensible 2.6. Les termes de cette équation se normalisent de la manière suivante :

– normalisation de l'évolution de l'énergie sensible :

$$\frac{\partial \rho e_{su}}{\partial t} + \frac{\partial \rho u_i e_{su}}{\partial x_i} = \frac{\partial \rho_\infty \rho^+ C p_\infty T_\infty e_{su}^+}{\partial \frac{x_0 t^+}{u_0}} + \frac{\partial \rho_\infty \rho^+ u_0 u_i^+ C p_\infty T_\infty e_{su}^+}{\partial x_0 x_i^+} \quad (6.53)$$

$$= \frac{\rho_\infty u_0^3}{x_0 M^2 (\gamma_\infty - 1)} \left(\frac{\partial \rho^+ e_{su}^+}{\partial t^+} + \frac{\partial \rho^+ u_i^+ e_{su}^+}{\partial x_i^+} \right) , \quad (6.54)$$

– normalisation du terme de conductivité thermique :

$$\frac{\partial}{\partial x_i} \left(\lambda \frac{\partial T}{\partial x_i} + E_i^C \right) = \frac{\partial}{\partial x_0 x_i^+} \left(\lambda \frac{\partial T_\infty T^+}{\partial x_0 x_i^+} + \frac{u_0^3 \rho_\infty}{M^2 (\gamma_\infty - 1)} E_i^{C+} \right) \quad (6.55)$$

$$= \frac{\rho_\infty u_0^3}{x_0} \frac{1}{M^2 (\gamma_\infty - 1)} \frac{\partial}{\partial x_i^+} \left(\lambda^\bullet \frac{\partial T^+}{\partial x_i^+} + E_i^{C+} \right) , \quad (6.56)$$

– normalisation du terme de pression :

$$\frac{\partial p u_i}{\partial x_i} = \frac{\partial \rho_\infty \frac{R}{W_\infty} T_\infty p^+ u_0 u_i^+}{\partial x_0 x_i^+} = \frac{\rho_\infty u_0^3}{\gamma_\infty M^2 x_0} \frac{\partial p^+ u_i^+}{\partial x_i^+}. \quad (6.57)$$

En rassemblant tout ces termes et en simplifiant, nous obtenons l'équation de transport de l'énergie sensible normalisée :

$$\frac{\partial \rho^+ e_{su}^+}{\partial t^+} + \frac{\partial \rho^+ u_i^+ e_{su}^+}{\partial x_i^+} = \frac{\partial}{\partial x_i^+} \left(\lambda \frac{\partial T^+}{\partial x_i^+} + E_i^{C+} \right) - \frac{\gamma_\infty - 1}{\gamma_\infty} \frac{\partial p^+ u_i^+}{\partial x_i^+} \quad (6.58)$$

$$+ M^2 (\gamma_\infty - 1) \frac{\partial \tau_{ij}^+ u_i^+}{\partial x_j^+} + \dot{\omega}_{es}^+, \quad (6.59)$$

avec $\dot{\omega}_{es}^+ = \frac{x_0}{\rho_\infty u_0^3} M^2 (\gamma_\infty - 1) \dot{\omega}_{es}$.

Bibliographie

- [1] J. Réveillon and L. Vervisch. Accounting for spray vaporization in non-premixed turbulent combustion modeling : A single droplet model (sdm). *Combustion and flame*, 1 :75–90, 2000.
- [2] S. Chandrasekhar. Hydrodynamic and hydromagnetic stability. *Oxford University Press.*, pages 11–14, 1961.
- [3] T. Poinsot and D. Veynante. Theoretical and numerical combustion. 2005.
- [4] R. Fox. In computational models for turbulent multiphase reacting flows. *CISM Courses and Lectures. Springer Verlag.*, 2007.
- [5] F. Laurent. Numerical analysis of eulerian multi-fluid models in the context of kinetic formulations for dilute evaporating sprays. *M2AN Math. Model. Numer. Anal.*, pages 431–468, 2006.
- [6] F.A. Williams. Spray combustion and atomization. *Physics of Fluids*, 1 :541–545, 1958.
- [7] F. Laurent. Modélisation mathématique et numérique de la combustion de brouillards de gouttes polydispersés. *Ph. D. thesis, Université Claude Bernard, Lyon 1.*, 2002.
- [8] G. Dufour. Modélisation multi-fluide eulérienne pour les écoulements diphasiques à inclusions dispersées. *Ph. D. thesis, Université Paul Sabatier Toulouse III.*, 2002.
- [9] W.A. Sirignano. Fluid dynamics and transport of droplets and sprays. *Cambridge University Press.*, 1999.
- [10] J. Greenberg, I. Silverman and Y. Tambour. On the origin of spray sectional conservation equations. *Combustion and Flame*, 93 :90–96, 1993.
- [11] F. Laurent and M. Massot. Multi-fluid modeling of laminar poly-dispersed spray flames : origin, assumptions and comparison of the sectional and samplig methods. *Comb. Theory and Modelling*, 5 :537–572, 2001.

- [12] X. Pialat. *Développement d'une méthode hybride eulérienne-lagrangienne pour la modélisation numérique de la phase particulaire dans les écoulements turbulents gaz-particules*. PhD thesis, École Nationale Supérieure de l'Aéronautique de Toulouse, 2007.
- [13] M. Massot, J. Reveillon, S. de Chaisemartin and F. Laurent. Evaluation of eulerian multi-fluid versus lagrangian methods for ejection of polydisperse evaporating sprays by vortices. *Journal of Computational physics*, 2004.
- [14] H. Y. Kim, S. S. Yoon and John C. Hewson. Effect of initial conditions of modeled pdfs on droplet characteristics for coalescing and evaporating turbulent water spray used in fire suppression applications. *Fire Safety Journal*, 2007.
- [15] S. Pascaud. *Vers la simulation aux grandes échelles des écoulements turbulents diphasiques réactifs : application aux foyers aéronautiques*. PhD thesis, Institut National polytechnique de Toulouse.
- [16] L. Fréret, F. Laurent, S. De Chaisemartin, D. Kah, R.O. Fox, P. Vedula, O. Thomine and M. Massot. Eulerian moment models for polydisperse weakly collisional sprays : model and validation. In *Proceedings of the Summer program, Center of Turbulence Research*, 2010.
- [17] S. De Chaisemartin. *Modèles Eulériens et simulation numérique de la dispersion turbulente de brouillards qui s'évaporent*. PhD thesis, EM2C, 2009.
- [18] L. Fréret, F. Laurent, S. de Chaisemartin, D. Kah, R.O. Fox, P. Vedula, J. Reveillon, O. Thomine and M. Massot. Turbulent combustion of polydisperse evaporating sprays with droplet crossing : Eulerian modeling of collisions at finite knudsen and validation. In *Proceedings of the Summer Program 2008, Center of Turbulence Research, Stanford University*, 2008.
- [19] C. Saulnier. *Modélisation numérique tridimensionnelle de l'écoulement réactif triphasique gaz-goutte-particule au sein d'un réacteur à lit fluidisé FFC*. PhD thesis, Ecole doctorale TYFEP, 2006.
- [20] A. Majda and J. Sethian. The derivation and numerical solution of the equations for zero mach number combustion. *Combustion Science and Technology.*, 42 :185–205, 1985.
- [21] A. W. Cook and J. Riley. Direct numerical simulation of a turbulent reactive plume on a parallel computer. *Journal of Computational Physics*, 129 :263–283, 1996.
- [22] H.N. Najm, P.S. Wyckoff and O.M. Knio. A semi-implicite numerical scheme for reacting flow. *Journal of Computational Physics*, 143(2) :381–402, 1998.

- [23] T. Alazard. Low mach number limit of the full navier-stokes equations. *ArXiv*, 2005.
- [24] E. Feireisl and A. Novotny. The low mach number limit for the full navier-stokes-fourier system. *Arch. Rational Mech. Anal.*, 186 :77–107, 2007.
- [25] J. Ouazzani and Y. Garrabos. A new numerical algorithm for low mach number supercritical fluids. *ArXiv*, 2007.
- [26] A. Hujeriat, F.-K. Thielemann, J. Dusek and A. Nusser. Compressed low mach number flows in astrophysics : a non-linear newtonian numerical solver. *Astronomy and Astrophysics*, 2008.
- [27] A.S. Almgren, J.B. Bell, C.A. Rendleman and M. Zingale. Low mach number modeling of type 1a supernovae. *ArXiv*, 2005.
- [28] A.S. Almgren, J.B. Bell, C.A. Rendleman and M. Zingale. Low mach number modeling of type 1a supernovae, II energy evolution. *ArXiv*, 2006.
- [29] M. M.T. Wang and T. W.H. Sheu. An element-by-element bicgstab iterative method for three-dimensional steady navier-stokes equations. *Journal of Computational and Applied Mathematics*, 79 :147–165, 1997.
- [30] P. Wesseling and C.W. Oosterlee. Geometric multigrid with applications to computational fluids dynamics. *Journal of Computational and Applied Mathematics*, 128 :311–334, 2001.
- [31] C.S. Peskin. The fluid dynamics of heart valves : Experimental, theoretical and computational methods. *Annu. Rev. Fluid. Mech.*, 14 :235–259, 1982.
- [32] M. Briscolini and P. Santangelo. Development of the mask method for incompressible unsteady flows. *J. Comput. Phys.*, 84 :57–75, 1989.
- [33] R. Mittal and G. Iaccarino. Immersed boundary methods. *Annu. Rev. Fluid Mech.*, 37 :239–261, 2005.
- [34] M. Tyagi, S. Roy, A.D. Harvey III and S. Acharya. Simulation of laminar and turbulent impeller stirred tanks using immersed boundary method and large eddy simulation technique in multi-block curvilinear geometrics. *Chemical Engineering Science*, 31 :368–377, 2010.
- [35] A. Posa, A. Lippolis, R. Verzicco and E. Balaras. Large-eddy simulations in mixed-flow pumps using an immersed-boundary method. *Computer and Fluids*, 47 :33–43, 2011.
- [36] M. Meyer, S. Hickel and N.A. Adams. Assessment of implicit large-eddy simulation with a conservative immersed interface method for turbulent cylinder flow. *International Journal of Heat and Fluid Flow*, 31 :368–377, 2010.

- [37] J. Yang and E. Balaras. An embedded-boundary formulation for large-eddy simulation of turbulent flows interacting with moving boundaries. *Journal of Computational Physics*, 215 :12–40, 2006.
- [38] M.L.V. Pitteway and R.J. Botting. Integer circles, etc. – three move extension of bresenham’s algorithm. *Computer graphics and image processing*, 3 :260–261, 1974. Department of Computer Science, Brunel University, Kingstom Lane, Uxbridge, Middlesex, England.
- [39] P. Bhowmick and B. B. Bhattacharya. Number-theoric interpretation and constitution of a digital circle. *Discrete Applied Mathematics*, 156 :2381–2399, 2008.
- [40] I.E. Sutherland, R.F. Sproull and R.A. Schumacker. A characterization of ten hidden-surface algorithms. *ACM Computing Surveys (CSUR)*, 6, 1974.
- [41] O. Thomine. Développement d’un module lagrangien de collisions de particules afin de valider les algorithmes de résolution eulérienne de gaz sans pression. Master’s thesis, CORIA, CNRS UMR 6614, 2008.
- [42] T. Echekki and J. Ferziger. A simplified reaction rate model ad its application to the analysis of premixed flames. *Combust. Sci. Tech.*, 89 :293–351, 1993.
- [43] K. Canneviere. *Simulation numérique directe de la combustion turbulente diphasique : application à l’étude de la propagation et de la structure des flammes*. PhD thesis, INSA de Rouen, 2003.
- [44] C. Westbrook and F. Dryer. Simplified reaction mechanism for the oxidation of hydrocarbon fuels in flames. *Combust. Sci. Tech.*, 27 :31–43, 1981.
- [45] P. Clavin. Dynamic behavior of premixed flame fronts in laminar and turbulent flows. *Prog. in Energy and Comb. Science*, 11 :1–59, 1985.
- [46] E. Mallarf and L.H. Chatelier. *Annales des mines*. 4 :379, 1883.
- [47] J.W. Buckel and S. Chandra. Hot wire ignition of hydrogen-oxygen mixtures. *Int. J. Hydrogen Energy*, 1994.
- [48] C. Letty. *Étude d’une flamme en V diphasique. Approches expérimentale et numérique*. PhD thesis, SPMII, 2008.
- [49] H.D. Landahl and R.G. Herrmann. Sampling of liquid aerosols by wires, cylinders, and slides, and the efficiency of impaction of the droplets. *From the University of Chicago Toxicity laboratory*, 1948.
- [50] M. Pawlowski and B. Simon. Calculating liquid droplets setting on a cylinder in gas-liquid spray flow. *Int J. Heat Fluid Flow*, 5 :179–184, 1984.

- [51] I. Allais, G. Alvarez and D. Flick. Analyse du transfert thermique entre un cylindre et un écoulement d'air faiblement chargé en gouttelettes d'eau. *Rev. Gen. Therm.*, 36 :276–288, 1997.
- [52] C. Basilico. *Etude du transfert convectif entre un cylindre chauffé et un écoulement d'air chargé de gouttelettes d'eau*. PhD thesis, Institut national polytechnique de Lorraine, 1979.
- [53] M.S. Bhatti and C.W. Savery. Augmentation of heat transfer in a laminar external boundary layer by the vaporization of suspended droplets. *J. Heat Transfer*, pages 179–184, 1975.
- [54] T. Aihara. Augmentation of convective heat transfer by gas-liquid mist. *ASME IHTC Jerusalem KN-29*, pages 445–461, 1990.
- [55] J.R. Dawson, R.L. Gordon, J. Kariuki, E. Mastorakos, A.R. Masri and M. Juddoo. Visualization of blow-off events in bluff-body stabilized turbulent premixed flames. *Proceedings of the Combustion institute*, 33 :1559–1566, 2011.
- [56] S. Chaudhuri and B.M. Cetegen. Blowoff characteristics of bluff-body stabilized conical premixed flames with upstream spatial mixture gradients and velocity oscillations. *Combustion and Flame*, 153 :616–633, 2008.
- [57] S. Chaudhuri, S. Kostka, M. W. Renfro and B.M. Cetegen. Blowoff dynamics of bluff body stabilized turbulent premixed flames. *Combustion and Flame*, 157 :790–802, 2010.
- [58] D. Papailou, P. Koutmos and A. Bakroziis. Simulations of fuel injection and flame stabilization in the wake formation region of a slender cylinder. *Proceedings of the Combustion Institute*, 28 :91–99, 2000.
- [59] L. Yuan. Ignition of hydrolic fluid sprays by open flames and hot surfaces. *Journal of Loss Prevention*, 19 :353–361, 2006.
- [60] L.M.J Wachters and N.A.J Westerling. The heat transfer form a hot wall to impinging water drops in the spheroidal state. *Chemical Eng. Sciences*, 21 :1047–1056, 1966.
- [61] J. Dewitte. *Modélisation de l'impact d'un brouillard de gouttes en évaporation et sous pression sur une paroi chauffée*. PhD thesis, École nationale supérieure de l'aéronautique et de l'espace, 2006.
- [62] J. Reveillon, C. Pera, M. Massot and R. Knikker. Eulerian analysis of the dispersion of evaporating polydispersed sprays in a statistically stationary turbulent flow. *J. Turb.*, 5 :1–27, 2004.

- [63] R.S. Rogallo. Numerical experiments in homogeneous turbulence. *NASA Tech. Mem.*, 1981.
- [64] S. Lee, K. Lele and P. Moin. Numerical simulations of spatially evolving compressible turbulence. *Center for Turbulence Research, Annual Research Briefs*, 1991.
- [65] P. Givi. Model free simulations of turbulent reactive flows. *Prog. Energy Comb. Sci.*, 9 :1–76, 1983.
- [66] T. Poinsot, S. Candel and A. Trouvé. Direct numerical simulation of premixed turbulent combustion. *Prog. Energy. Comb. Sci.*, pages 531–576, 1996.
- [67] L. Vervisch and T. Poinsot. Direct numerical simulation of non-premixed turbulent flame. *Annu. Rev. Fluid Mech.*, 30 :655–692, 1998.
- [68] C. Pantano, S. Sarkar and F. Williams. Mixing of a conserved scalar in a turbulent reacting shear layer. *J. Fluid Mech.*, 481 :291–328, 2003.
- [69] S. Elghobashi and G.C. Truesdell. Direct simulation of particle dispersion in a decaying isotropic turbulence. *J. Fluid Mech.*, 242 :655–700, 1992.
- [70] W. Ling, J. Chung, J. Troutt and C. Crowe. Direct numerical simulation of a three-dimensional temporal mixing layer with particle dispersion. *J. Fluid. Mech.*, 358 :61–85, 1998.
- [71] M. Boivin, O. Simonin and K.D. Squires. Direct numerical simulation of turbulence modulation by particles in isotropic turbulence. *J. Fluid Mech.*, 375 :235–263, 1998.
- [72] K.D. Squires and J.K. Eaton. Preferential concentration of particles by turbulence. *Phys. Fluids*, 3 :1169–1178, 1991.
- [73] M.W. Vance, K.D. Squires and O. Simonin. Properties of the particle velocity field in gas-solid turbulent channel flow. *Phys. Fluids*, 18, 2006.
- [74] O. Vermorel, B. Bedat, O. Simonin and T. Poinsot. Numerical study and modelling of turbulence modulation in a particle laden shear flow. *J. Turb.*, 4, 2003.
- [75] F. Mashayek. Direct numerical simulations of evaporating droplet dispersion in forced low mach number turbulence. *Intl J. Heat Mass Transfer*, 41 :2601–2617, 1998.
- [76] R. Miller and J. Bellan. Direct numerical simulation of a confined three-dimensional gas mixing layer with one evaporating hydrocarbon-droplet-laden stream. *J. Fluid Mech.*, 384 :293–338, 1999.
- [77] J. Reveillon and L. Vervisch. Accounting for spray vaporization in non-premixed turbulent combustion modeling; a single droplet model (sdm). *Comb. Flame*, 121 :75–90, 2000.

- [78] N. Okongo and J. Bellan. A priori subgrid analysis of temporal mixing layers with evaporating droplets. *Phys. Fluids*, 12 :1573–1591, 2000.
- [79] F. Mashayek. Simulations of reacting droplets dispersed in isotropic turbulence. *AIAA J.*, 37 :1420–1425, 1999.
- [80] F. Mashayek. Numerical investigation of reacting droplets in homogeneous shear turbulence. *J. Fluid Mech.*, 405 :1–36, 2000.
- [81] J. Reveillon and L. Vervisch. Analysis of weakly turbulent dilute-spray flames and spray combustion regimes. *J. Fluid Mech.*, 537 :317–347, 2005.
- [82] F. Mashayek, F.A. Jaber, R.S. Miller and P. Givi. Dispersion and polydispersity of droplets in stationary isotropic turbulence. *J. Fluid Mech.*, 405 :1–36, 2000.
- [83] T. Suzuki and H. Chiu. Multi droplet combustion on liquid propellant. *In Proc. Ninth Intl Symp. on Space and Technology and Science*, pages 145–154, 1971.
- [84] H. Chiu and T. Liu. Group combustion of liquid droplets. *Comb. Sci. Technol.*, pages 127–131, 1977.
- [85] H. Chiu and E.J. Croke. Group combustion of liquid fuel sprays. *Energy Technology Lab. Rep.*, 1981.
- [86] H. Chiu, H.Y. Kim and E.J. Croke. Internal group combustion of liquid droplets. *In Proc. Nineteenth Symp. (Intl) on Combustion*.
- [87] A.R. Kerstein and C.K. Law. Percolation in combustion sprays I : Transition from cluster combustion to percolate combustion in non-premixed sprays. *In Proc. Nineteenth Symp. (Intl) on Combustion.*, 1982.
- [88] S. Candel, F. Lacas, N. Darabiha and C. Rolon. Groups combustion in spray flames. *Multiphase Sci. Tech.*, pages 1–18, 1999.
- [89] R. Borghi. Background on droplets and sprays. *Combustion and Turbulence in two-phase flows.*, 1996.
- [90] J.H. Burgoyne and L. Cohen. The effect of drop size on flame propagation in liquid aerosols. *Proceedings of the Royal Society*, 225 :375–392, 1954.
- [91] T.H. Lin, C.K. Law and S.H. Chung. Theory of laminar flame propagation in off-stoichiometric dilute spray. *Int. J. Heat Mass Transfert*, 5(31) :1023–1034, 1998.
- [92] T.H. Lin and Y.Y. Sheu. Theory of laminar flame propagation in near stoichiometric dilute spray. *Combustion and Flame*, 84 :333–342, 1991.

- [93] J.B. Greenberg, I. Silverman and Y. Tambour. On droplet enhancement of the burning velocity of laminar premixed spray flames. *Combustion and Flame*, 113(1-2) :271–273, 1998.
- [94] F. Aztler and M. Lawes. Burning velocity in droplet suspensions. *School of Mechanical Engineering, University of Leeds*, 1998.
- [95] I. Goldfarb, V. Goldshtein, J.B. Greenberg and G. Kuzmenko. Thermal explosion in a droplet-gas cloud. *Combustion Theory and Modelling*, 4(3) :289–316, 2000.
- [96] J. Reveillon and F.X Demoulin. Evaporating droplets in turbulent reacting flows. *Proceedings of the Combustion Institute*, 31(2) :2319–2326, 2007.
- [97] J.B. Greenberg, I. Silverman and Y. Tambour. A new heterogeneous burning velocity formula for the propagation of a laminar flame front through a polydisperse spray of droplets. *Combustion and Flame*, 104(3) :358–368, 1996.
- [98] H. Yamashita, M. Shimada and T. Takeno. A numerical study on flame stability at the transition point of jet diffusion flames. *26th Symposium (International) on combustion/The Combustion institute*, pages 27–34, 1996.
- [99] S. Tanguy. *Développement d'une méthode de suivi d'interface. Application aux écoulements diphasiques*. PhD thesis, SPMII, 2004.
- [100] T. Ménard. *Développement d'une méthode level set pour le suivi d'interface. Application à la rupture de jet liquide*. PhD thesis, SPMII, 2007.
- [101] Garcia. *Développement et validation du formalisme Euler-Lagrange dans un solveur parallèle non-structuré pour la simulation aux grandes échelles*. PhD thesis, Institut National Polytechnique de Toulouse., 2009.
- [102] J. Reveillon and F.-X. Demoulin. Effects of the preferential segregation of droplets on evaporation and turbulent mixing. *Journal of Fluids Mechanics.*, 583 :273–302, 2007.
- [103] L. Freret, S. de Chaisemartin, J. Reveillon, F. Laurent and M. Massot. Eulerian models and three-dimensional numerical simulation of polydisperse sprays. *7th International Conference on Multiphase Flow, ICMF 2010, Tampa, FL*, 2010.
- [104] L. Fréret, O. Thomine, J. Reveillon, S. de Chaisemartin, F. Laurent and M. Massot. On the role of preferential segregation in flame dynamics in polydisperse evaporating sprays. *Proceedings of the Summer Program 2010, Center for Turbulence Research, Stanford University.*, 2010.

- [105] G. Bird. Molecular gas dynamics and the direct simulation of gas flows. *Oxford Science Publications*, 2, 1994.
- [106] S. de Chaisemartin, L. Freret, D. Kah, F. Laurent, R.O. Fox, J. Reveillon and M. Massot. Turbulent combustion of polydisperse evaporating sprays with droplet crossing : Eulerian modeling and validation in the infinite knudsen limit. *Proceedings of the Summer Program 2008, Center for Turbulence Research, Stanford University.*, 2009.
- [107] F. Laurent and 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.*, 5 :537–572.
- [108] F. Laurent, M. Massot and P. Villedieu. Eulerian multi-fluid modeling for the numerical simulation of coalescence in polydisperse dense liquid sprays. *Journal of Computational Physics.*, 194 :505–543.
- [109] R.O. Fox. Eulerian multi-fluid models for polydisperse evaporating sprays. chap. iii of "multi-phase reacting flows : Modelling and simulation". *D.L. Marchisio and R.O. Fox Editors, Springer, CISM Courses and Lectures*, 492 :79–123.
- [110] R.O. Fox. A quadrature-based third-order moment method for dilute gas-particle flows. *Journal of Computational Physics.*, 227 :6313–6350.
- [111] P. Vedula, R.O. Fox and I. D. Boyd. A quadrature-based method of moments for solution of the collisional boltzmann equation, submitted to journal of statistical physics. 2008.
- [112] R.O. Fox, F. Laurent and M. Massot. Numerical simulation of spray coalescence in an eulerian framework : direct quadrature method of moments and multi-fluid method. *Journal of Computational Physics.*, 227 :3058–3088.
- [113] M. Massot, F. Laurent, D. Kah and S. de Chaisemartin. A robust moment method for evaluating the disappearance rate of evaporating sprays, submitted to siam journal of applied mathematics and available on hal, <http://hal.archives-ouvertes.fr/hal-00332423/fr/>. 2009.
- [114] F. Bouchut, S. Jin and X. Li. Numerical approximations of pressureless and isothermal gas dynamics. *SIAM Journal Numerical Analysis*, 41 :135–158.
- [115] P.L. Bhatnagar, E.P. Gross and M. Krook. A model for collision processes in gases. i. small amplitude processes in charged and neutral one-component systems. *Physical Review*, 94 :511–525.

- [116] S. Succi. The lattice boltzmann equation for fluid dynamics and beyond. *Oxford University Press.*, 2001.
- [117] Gouesbet and Berlemont. Eulerian and Lagrangian approaches for predicting the behaviour of discrete particles in turbulent flows. *Progress in energy and combustion science*, 25(2) :133–159, 1998.
- [118] Guichard, Reveillon and Hauguel. Direct numerical simulation of statistically stationary one- and two-phase turbulent combustion : a turbulent injection procedure. *Flow, turbulence and combustion*, 73 :133–167, 2004.
- [119] Lesieur. *Turbulence in fluids*. Number 978-1402064340 in Fluids mechanics and its applications. Springer-Verlag New York Inc., 2007.
- [120] Massot, de Chaisemartin, Fréret, Kah and Laurent. Eulerian multi-fluid models : modeling and numerical methods. In *Modelling and Computation of Nanoparticles in Fluid Flows*, pages 1–86. Lectures of the von Karman Institute. NATO RTO AVT 169, 2009. Available on HAL : <http://hal.archives-ouvertes.fr/hal-00423031/en/>.
- [121] D. Kah, F. Laurent, L. Fréret, S. de Chaisemartin, R.O. Fox, J. Reveillon and M. Massot. Eulerian quadrature-based moment models for polydisperse evaporating sprays. *Flow, Turbulence and Combustion*, 2010. In Press.
- [122] L. Fréret, S. de Chaisemartin, J. Réveillon, F. Laurent and M. Massot. Eulerian models and three-dimensional numerical simulation of polydisperse sprays. In *Proceedings of the International Conference on Multiphase Flows, Tampa, Florida*, pages 1–12, 2010. Available on HAL : <http://hal.archives-ouvertes.fr/hal-00498207/en/>.
- [123] Z. Bouali. *Impact d'une phase liquide dispersée sur le processus d'auto-inflammation : prise en compte d'une chimie détaillée*. PhD thesis, 2011.
- [124] B.E. Gelfand. Droplet break-up phenomena in flows with velocity lag. *Prog. Energy Combustion Science*, 22 :201–265, 1996.
- [125] M. Pilch and C.A. Erdman. Use of breakup time data and velocity history data to predict the maximum size of stable fragments for acceleration-induced breakup of a liquid drop. *International Journal of Multiphase Flow*, 13 :741–757, 1987.
- [126] D.R. Guildenbecher, C. Lopez-Rivera, P.E. Sojka. Secondary atomization. *Exp. Fluids*, 46 :371–402, 2009.
- [127] G.O. Thomas. On the conditions required for explosion mitigation by water sprays. *Trans IChemE*, 78, 2000.

- [128] G. Jourdan, L. Biamino, C. Mariani, C. Blanchot, E. Daniel, J. Massoni, R. Tossello, D. Praguine and L. Houas. Attenuation of a shock wave passing through a cloud of water droplets. *Shock Waves*, 20 :285–296, 2000.
- [129] A. Briand. *Contribution à l'étude de la structure des détonations dans les milieux biphasiques*. PhD thesis, 2006.
- [130] G.D. Roy, S.M. Frolov, A.A. Borisov and D.W. Netzer. Pulse detonation propulsion : challenges, current status, and future perspective. *Progress in Energy and Combustion Science*, 30 :545–672, 2004.
- [131] X. Rogue, G. Rodriguez, J.F. Haas and R. Saurel. Experimental and numerical investigation of the shock-induced fluidization of a particle bed. *Shock Waves*, 8 :29–45, 1998.
- [132] R.M. Corless, G.H. Gonnet, D.E.G. Hare, D.J. Jeffrey and D.E. Knuth. On the lambert W function. *Advances in Computational Mathematics*, 5 :329–359, 1996.