



**HAL**  
open science

# Vers la modélisation multi-composants des flammes de spray

Hakim Larabi

► **To cite this version:**

Hakim Larabi. Vers la modélisation multi-composants des flammes de spray. Thermique [physics.class-ph]. Normandie Université, 2019. Français. NNT : 2019NORMIR20 . tel-02924749

**HAL Id: tel-02924749**

**<https://theses.hal.science/tel-02924749v1>**

Submitted on 28 Aug 2020

**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.



Normandie Université

## THÈSE

**Pour obtenir le diplôme de doctorat**

**Spécialité Energétique**

**Préparée au sein de l'INSA de Rouen Normandie**

### **VERS LA MODÉLISATION MULTI-COMPOSANTS DES FLAMMES DE SPRAY**

présentée et soutenue par

**HAKIM LARABI**

**Thèse soutenue publiquement le 13 novembre 2019**

**devant le jury composé de**

Laurent SELLE	Chargé de recherche CNRS - IMFT, Toulouse	Rapporteur
Benoît FIORINA	Professeur, EM2C, Paris	Rapporteur
Bénédicte CUÉNOT	Directrice de Recherche, CERFACS, Toulouse	Examinatrice
Fabien HALTER	Professeur, Université d'Orléans, ICARE	Examinateur
Bruno RENO	Professeur, CORIA, INSA Rouen Normandie	Examinateur
Abdelkrim BOUKHALFA	Professeur, CORIA	Directeur de thèse
Vincent MOUREAU	Chargé de recherche CNRS - CORIA	Co-encadrant de thèse

■ Thèse dirigée par Abdelkrim BOUKHALFA et Vincent MOUREAU, laboratoire CORIA (UMR 6614 CNRS)



# ABSTRACT

---

Until recently, automotive and aeronautical engines were designed to operate with fossil fuels. To better meet the economic and environmental challenges of the modern world and of the energy transition, alternative fuels are developed and tested. They are used to replace conventional fuels or as a blend to achieve the desired thermo-chemical properties. However, the impact of these new fuels on the performance of combustion chambers remains partially known. From this perspective, high-fidelity simulations of turbulent combustion of alternative fuels can be reached only if a detailed multi-component description of the liquid and gas mixtures is considered.

The objective of this thesis is to contribute to the unsteady modeling of spray flames where complex multi-component phenomena occur : differential evaporation, multi-species mixing, gas phase chemical reactions. To this aim, the fuel is treated as a set of multi-component mixtures, which may be different in the liquid and gas phases depending on the required accuracy. Different models for the aforementioned phenomena are available in the literature, and the main challenge is the coupling of these different approaches and their validation in realistic and complex conditions.

First, the chosen multi-component approach for the gas phase, based on the transport of a large number of species and on finite-rate chemistry, is validated for premixed flames. The expanding spherical flame configuration was chosen to study the flame consumption speed, which is an important parameter in combustion. In collaboration with the experimental team at the CORIA laboratory, a flame consumption speed formalism is established for non-confined and confined spherical expanding flames. This formalism enables to have a precise comparison of experimental and numerical results for methane/air and iso-octane/air flames and to validate the gas phase models.

Second, we focused on the physical process of evaporation. The multi-component evaporation model of *Abramzon-Sirignano* is implemented in the YALES2 flow solver based on a point-particle approach for the fuel droplets. This model is adapted to enable the description of single- or multi-component evaporation with or without differential evaporation. As such, the model is capable of dealing with various fuel surrogates. The evaporation model is compared to the *Spalding* model and validated on experimental results of *Chauveau et al.* [33], *Nomura et al.* [158], *Ghassemi et al.* [82] and *Daij et al.* [47] for a single component droplet and then two-component isolated droplet with and without convection.

Finally, the 3D Large-Eddy Simulation (LES) of a complex n-heptane/air spray flame is conducted with analytical reduced chemistry (ARC, [169, 205]). This flame was experimentally studied at the CORIA laboratory with high fidelity diagnostics to characterize the flame structure and provide quantitative data such as gas-phase velocity and temperature as well as local droplet size and velocity distributions. Comparison with the experimental data [225] and with the simulations carried out within the framework of the 6th Workshop on Turbulent Combustion of Spray, shows that the current LES accurately reproduce the gas flow and properties of the dispersed phase. This configuration paves the way for the simulation of even more complex spray flames with multi-component fuels.

**Keywords :** LES - Expanding spherical flame - Flame consumption speed - Multi-component evaporation - Detailed chemistry - turbulent spray jet flame



# RÉSUMÉ

---

Jusqu'à aujourd'hui, les moteurs automobiles et aéronautiques étaient conçus pour fonctionner avec des combustibles fossiles. Pour relever les défis économiques et environnementaux du monde actuel et de la transition énergétique, des carburants de substitution sont développés et testés. Ils sont utilisés pour remplacer directement les carburants classiques ou bien sous forme de mélanges pour obtenir les propriétés thermo-chimiques souhaitées. Cependant, l'impact de ces nouveaux carburants sur les performances des chambres de combustion reste partiellement connu. Dans cette perspective, des simulations haute-fidélité de la combustion turbulente de carburants de substitution ne peuvent être réalisées qu'à la condition de prendre en compte une description détaillée multi-composants des mélanges de liquides et de gaz.

L'objectif de cette thèse est de contribuer à la modélisation instationnaire des flammes de spray en présence de phénomènes complexes multi-composants : évaporation différentielle, mélange multi-espèces, nombreuses réactions chimiques en phase gazeuse. À cet effet, le carburant est traité comme un ensemble de mélanges à plusieurs composants, qui peuvent être différents dans les phases liquide et gazeuse en fonction de la précision requise. Différents modèles pour les phénomènes susmentionnés sont disponibles dans la littérature. Le principal défi est le couplage de ces différentes approches et leur validation dans des conditions réalistes et complexes.

Premièrement, l'approche multi-composants choisie pour la phase gazeuse, basée sur le transport d'un grand nombre d'espèces et sur la chimie de type *Arrhénius*, est validée pour les flammes prémélangées. La configuration de flamme sphérique en expansion a été choisie pour étudier la vitesse de consommation de la flamme, paramètre important de la combustion. En collaboration avec l'équipe expérimentale du laboratoire CORIA, un formalisme pour l'évaluation précise de la vitesse de consommation de flamme est établi pour les flammes en expansion sphérique confinées et non confinées. Ce formalisme permet d'avoir une comparaison précise des résultats expérimentaux et numériques pour les flammes méthane / air et iso-octane / air et de valider ainsi le modèle de transport en phase gazeuse.

Deuxièmement, nous nous sommes concentrés sur le processus physique d'évaporation. Le modèle d'évaporation multi-composants d'*Abramzon-Sirignano* est implémenté dans le solveur fluide YALES2 en se basant sur une approche de point-force pour les gouttelettes de carburant. Ce modèle a été adapté pour permettre de décrire l'évaporation d'un ou plusieurs composants avec ou sans évaporation différentielle. En tant que tel, le modèle est capable de traiter divers surrogates de carburant. Ce modèle d'évaporation est comparé au modèle de *Spalding* et validé sur les résultats expérimentaux de *Chauveau et al.* [33], *Nomura et al.* [158], *Ghassemi et al.* [82] et *Daif et al.* [47] pour une gouttelette à un seul composant, puis une gouttelette isolée à deux composants avec et sans convection.

Enfin, la simulation aux grandes échelles (LES) d'une flamme de spray complexe n-heptane / air est réalisée avec une chimie analytiquement réduite (ARC, [169, 205]). Cette flamme a été étudiée expérimentalement au laboratoire CORIA avec des diagnostics haute-fidélité pour caractériser la structure de la flamme et fournir des données quantitatives telles que la vitesse et la température en phase gazeuse ainsi que les distributions locales de taille et de vitesse des gouttelettes de carburant. La comparaison avec les données expérimentales [225] et avec les simulations réalisées dans le cadre du 6ème atelier sur la combustion turbulente de spray (TCS6), montre que les LES actuelles reproduisent fidèlement l'écoulement gazeux et les propriétés de la phase dispersée. Cette configuration ouvre la voie à la simulation de flammes de spray encore plus complexes avec des combustibles à plusieurs composants.

**Mots-clés :** Simulation aux grandes échelles - Flamme sphérique en expansion - Vitesse de consommation - Évaporation multi-composants - Chimie détaillée - Flammes de spray



*i yemma ...*



# REMERCIEMENTS

---

Avec ces lignes de remerciements et après plus de quatre années de dur labeur, mon aventure de thèse prend fin. C'est l'occasion pour moi de remercier toutes les personnes qui ont pris part, de près ou de loin, à cette aventure.

En premier lieu, j'adresse mes remerciements aux deux personnes sans qui cette thèse n'aurait pas existé : Vincent Moureau et Ghislain Lartigue. Merci de m'avoir fait confiance et de m'avoir offert la chance d'intégrer l'équipe YALES2 dont l'esprit et l'ambiance ne font que renforcer la synergie positive permettant l'épanouissement de chaque membre. La qualité de votre encadrement et votre exigence m'ont poussé vers l'avant et aidé à surmonter les difficultés. La compréhension et l'écoute dont vous avez fait preuve, surtout lors de cette dernière année, m'ont définitivement convaincu que la thèse est avant tout une aventure humaine.

Ensuite, je souhaite remercier Laurent Selle et Benoît Fiorina d'avoir accepté d'être rapporteurs de ma thèse et d'avoir pris le temps de lire et de juger mon tapuscrit. À ces remerciements, j'associe également les autres membres du jury : Bénédicte Cuénot, Fabien Halter et Bruno Renou, pour leur participation et surtout leurs remarques constructives et leurs questions pertinentes. Je tiens à remercier particulièrement Bruno pour le travail collaboratif avec ses équipes expérimentales et tous les échanges fructueux durant mes années de thèse.

Je témoigne ma profonde reconnaissance à la région Normandie d'avoir financé les trois premières années de cette thèse. Je remercie les directeurs du laboratoire CORIA, Mourad Boukhalfa puis Armelle Cessou et tout le personnel, technique et administratif, pour leur service, leur disponibilité et leur gentillesse.

Un grand merci aux personnes qui ont consacré une partie inestimable de leur temps pour relire mon travail. Un merci particulier à Lancelot, mon ami et collègue de bureau, pour ses retours détaillés, à Hmiduc mon ami de longue date, pour son regard externe au domaine de la combustion.

---

Au cours de cette aventure, j'ai croisé le chemin de beaucoup de personnes qui y ont laissé une empreinte indélébile. Les anciens : Catherine, Guillaume, Lola, Ben et Pierre. Un merci très spécial à Pierre d'avoir été là pour répondre aux différentes questions depuis le début du stage jusqu'à la fin de la thèse (et aussi, merci pour les discussions technophiles). Merci à mes amis et collègues de l'équipe YALES2 : Thomas Roger, Adrien Jean, Lancelot, Yann, Nicolas, Patricia et Francesco (M. De Gava), Romain, Felix, Thomas Fabbri. Chacun de vous a contribué, à sa façon, dans l'enrichissement de cette aventure. Aux compagnons de pauses déjeuner, pauses café et soirées : Nathalie, Pierre Malbois et Ben, sans oublier les anciens de la bande : Émeline, Adrien et Léa. Merci pour les moments de rigolade et toutes les discussions existentielles (ou pas, la majorité du temps). Je tiens également à remercier le reste de l'équipe numérique : Lisa, Dorian, Bastien, Kevin, Nicolas, Eurielle, Umut, Alexandre et Andréa Seltz ainsi que toute personne que j'ai pu oubliée.

Enfin, je viens clore ces remerciements en exprimant ma gratitude envers ma famille, particulièrement mon père et mes sœurs. Merci pour votre soutien et votre patience tout au long de cette thèse. Je remercie également mes proches ici en France dont la présence a adouci le poids de l'exil.

À *Fadila*, ma compagne de route avec qui j'ai partagé chaque instant de cette thèse. Le chemin n'a pas été parsemé que par des roses sans épines, mais ta présence et ton soutien indéfectible m'ont aidé à garder en vue mon objectif. Ensemble nous avons fait face à tant de galères que nous avons réussi à surmonter grâce à un soutien mutuel, à la persévérance et à la détermination. Certainement, cette aventure n'aurait pas été la même sans toi. Merci.





# TABLE DES MATIÈRES

---

<b>Abstract</b>	<b>3</b>
<b>Résumé</b>	<b>5</b>
<b>Remerciements</b>	<b>9</b>
<b>Table des matières</b>	<b>12</b>
<b>Nomenclature</b>	<b>17</b>
<b>1 Introduction générale</b>	<b>21</b>
1.1 Contexte . . . . .	21
1.1.1 Les différents types de biocarburants . . . . .	24
1.1.2 Les tests des biocarburants dans le transport aérien . . . . .	25
1.2 Motivation . . . . .	27
1.3 Objectifs de la thèse . . . . .	28
1.4 Organisation du manuscrit . . . . .	28
<b>2 Équations et modèles pour les écoulements réactifs</b>	<b>31</b>
2.1 Introduction . . . . .	32
2.2 Propriétés thermodynamiques d'un mélange . . . . .	32
2.2.1 Description de la composition d'un mélange . . . . .	32
2.2.2 Description de la thermodynamique d'un mélange . . . . .	33
2.2.3 La loi des gaz parfaits . . . . .	35
2.3 Équations de conservation de la phase gazeuse . . . . .	35
2.3.1 Équations de conservation et loi d'état . . . . .	36
2.3.1.1 conservation de la quantité de mouvement . . . . .	36
2.3.1.2 Conservation des espèces chimiques . . . . .	37
2.3.1.3 Conservation de la masse . . . . .	39
2.3.2 Modélisation des propriétés de transport . . . . .	40
2.3.2.1 Théorie cinétique des gaz . . . . .	40
2.3.2.2 Approche multi-composants . . . . .	41
2.3.2.3 Approche <i>Mixture averaged</i> . . . . .	41
2.3.2.4 Approche de transport simplifiée . . . . .	42
2.3.2.5 Approches utilisés . . . . .	44
2.3.3 Équations de conservation étendues au formalisme LES . . . . .	45
2.3.3.1 Cascade énergétique . . . . .	46
2.3.3.2 Simulation numérique des écoulements turbulents : RANS, LES et DNS . . . . .	47
2.3.4 Équations bilans étendues à la simulation aux grandes échelles . . . . .	49
2.3.4.1 Modélisation du transport de sous-maille . . . . .	53
2.4 Modélisation de la combustion . . . . .	55
2.4.1 Cinétique chimique . . . . .	56
2.4.1.1 Mécanismes réactionnels . . . . .	56
2.4.1.2 Réduction des schémas cinétiques . . . . .	58

2.4.2	Régimes de combustion . . . . .	60
2.4.2.1	La flamme prémélangée . . . . .	61
2.4.2.2	La flamme de diffusion . . . . .	63
2.4.2.3	Flammes partiellement prémélangées . . . . .	64
2.5	Présentation de l'outil numérique <b>YALES2</b> . . . . .	65
2.5.1	Concepts généraux du solveur . . . . .	65
2.5.1.1	Difficultés de résolution des équations bilans . . . . .	65
2.5.1.2	Stratégies adoptées et concepts généraux du solveur . . . . .	66
2.5.2	La méthode de pas fractionnés . . . . .	72
2.5.3	Solveur à faible nombre de <i>Mach</i> à densité variable . . . . .	74
2.5.3.1	Système d'équations résolu . . . . .	74
2.5.3.2	Méthode de résolution . . . . .	75
2.5.4	Résolution de l'équation de Poisson . . . . .	77
2.6	Conclusion . . . . .	78
<b>3</b>	<b>Étude de la vitesse de consommation d'une flamme laminaire sphérique en expansion</b>	<b>79</b>
3.1	Préambule . . . . .	79
3.2	Introduction . . . . .	80
3.3	La vitesse de combustion de la flamme laminaire . . . . .	81
3.4	Formalisme de vitesse de consommation dans le cas des flammes sphériques non confinées . . . . .	85
3.5	Formalisme de vitesse de consommation dans le cas des flammes sphériques confinées . . . . .	89
3.6	Simulations numériques et validation . . . . .	91
3.6.1	Configuration numérique . . . . .	92
3.6.2	Validation des simulations numériques . . . . .	93
3.7	Résultats et discussion . . . . .	97
3.8	Conclusion . . . . .	102
<b>4</b>	<b>Modélisation de l'évaporation d'une goutte isolée multi-composants</b>	<b>105</b>
4.1	Introduction . . . . .	106
4.2	Modélisation numérique de la phase dispersée . . . . .	106
4.2.1	Classification des écoulements particuliers . . . . .	107
4.2.2	Description Euler-Euler . . . . .	108
4.2.3	Description Euler-Lagrange . . . . .	109
4.2.4	Cinématique de la goutte . . . . .	110
4.3	Modélisation de la composition d'une goutte d'un fuel multi-composants . . . . .	112
4.3.1	Les surrogates . . . . .	113
4.3.2	Modèles d'une goutte de fuel liquide . . . . .	114
4.4	Évaporation d'une goutte de carburant isolée . . . . .	117
4.4.1	Hypothèses du modèle . . . . .	119
4.4.2	Propriétés thermodynamiques et de transport . . . . .	120
4.4.3	Modèle de la phase gazeuse . . . . .	126
4.4.3.1	Calcul des coefficients de transfert de masse, $B_{m,i}$ . . . . .	128
4.4.3.2	Calcul des coefficients de transfert de chaleur, $B_T$ . . . . .	130
4.4.3.3	Critère de convergence . . . . .	130
4.4.4	Modèle de la phase liquide . . . . .	131
4.4.4.1	Calcul de la température . . . . .	132
4.4.4.2	Calcul de la composition de la goutte . . . . .	132
4.4.4.3	Calcul du diamètre de la goutte . . . . .	133

## TABLE DES MATIÈRES

---

4.4.5	Couplage avec la phase gazeuse . . . . .	133
4.4.5.1	Échange entre les particules et la phase gazeuse . . . . .	133
4.4.5.2	Formalisme LES : interaction avec la turbulence . . . . .	135
4.5	Conclusion . . . . .	136
<b>5</b>	<b>Validation du modèle d'évaporation sur une goutte isolée</b>	<b>137</b>
5.1	Introduction . . . . .	137
5.2	Cas d'évaporation mono-composant pour une goutte statique . . . . .	139
5.2.1	n-Heptane . . . . .	139
5.2.2	Kérosène . . . . .	144
5.3	Cas d'évaporation multi-composants pour une goutte statique . . . . .	152
5.3.1	n-heptane/n-hexadécane . . . . .	152
5.4	Évaporation d'une goutte isolée dans un écoulement d'air . . . . .	160
5.4.1	Cas d'évaporation d'une goutte mono-composant en convection forcée	161
5.4.2	Cas d'évaporation d'une goutte bi-composants : n-heptane/n-décane . .	162
5.5	Effet de la flottabilité sur l'évaporation de la goutte en convection naturelle . .	167
5.6	Conclusions . . . . .	171
<b>6</b>	<b>Simulation d'une flamme de spray turbulente</b>	<b>173</b>
6.1	Description du dispositif expérimental . . . . .	174
6.1.1	Le brûleur KIAI . . . . .	174
6.1.2	Diagnostics expérimentaux . . . . .	176
6.2	Comparatif des études précédentes sur le brûleur KIAI . . . . .	176
6.2.1	Géométrie et maillage . . . . .	178
6.2.2	Résultats comparatifs . . . . .	178
6.2.3	Objectif de cette étude . . . . .	180
6.3	Description de la configuration numérique . . . . .	180
6.3.1	Géométrie et maillage . . . . .	180
6.3.2	Conditions opératoires . . . . .	181
6.3.3	Chimie analytique ARC pour la combustion n-Heptane/air . . . . .	182
6.4	Analyse des résultats de l'étude de la flamme spray diphasique, n-heptane/air .	183
6.4.1	Simulation en conditions non réactives . . . . .	183
6.4.2	Analyse et validation en conditions réactives . . . . .	184
6.4.2.1	Structure de la flamme et hauteur de stabilisation . . . . .	184
6.4.2.2	La phase gazeuse . . . . .	186
6.4.2.3	La phase liquide . . . . .	191
6.4.3	Interaction flamme/gouttelette . . . . .	198
6.5	Performances . . . . .	201
6.6	Conclusions . . . . .	202
<b>7</b>	<b>Conclusion et perspectives</b>	<b>203</b>
7.1	Conclusions . . . . .	203
7.2	Perspectives . . . . .	207
	<b>Table des figures</b>	<b>207</b>
	<b>Liste des tableaux</b>	<b>215</b>
	<b>Bibliographie</b>	<b>217</b>



# NOMENCLATURE

---

## Acronymes

ACARE	Advisory Council for Aeronautical Research
ARC	Analytical Reduced Chemistry
CFD	Computational Fluid Dynamics
CFL	Courant Friedrichs Lewy
CPU	Central Processing Unit
DNS	Direct Numerical Simulation
DS	Espèce déficiente
DWFDS	Vitesse de déplacement de flamme pondérée par la densité (Density Weighted Flame Displacement Speed)
EDP	Équation aux Dérivées Partielles
FDS	Vitesse de déplacement de la flamme (Flame Displacement Speed)
GES	Gaz à Effet de Serre
LES	Large Eddy Simulation
LHS	Left-Hand Side
ODE	Équation différentielle ordinaire (Ordinary Differential Equation)
RANS	Reynolds-Averaged Navier-Stokes
RHS	Right-Hand Side
RMS	Root Mean Square
SEF	Flamme en expansion sphérique (Spherical Expansion Flame)
YALES2	Solveur LES/DNS développé au laboratoire CORIA

## Symboles grecques

$\dot{\omega}_k$	Taux de réaction de la $k^{ieme}$ espèce	[—]
$\gamma$	Rapport des capacités calorifiques	[—]
$\kappa$	Taux d'étirement	[ $s^{-1}$ ]
$\phi$	Richesse	[—]
$\rho$	Densité du gaz	[ $kg/m^3$ ]
$\sigma_{\varphi}^{sgs}$	Variance de sous mailles	[—]

$\varphi$  Scalaire générique Selon la variable

**Indices et exposants**

$g$  relatif aux mélanges gazeux (vapeur + air)  
 $i$  relatif au composant  $i$   
 $k$  relatif à l'espèce  $k$   
 $l$  relatif à l'état liquide de la goutte  
 $p$  relatif à la particule  
 $ref$  calculé à l'état de référence  
 $v$  relatif à la vapeur libérée par la goutte  
 $0$  Propriétés de flamme dans le cas de la configuration de flamme plane non étirée 1D  
 $b, u$  Se référant aux côtés des gaz brûlés et gaz frais, respectivement  
 $eq$  État d'équilibre chimique

**Lettres latines**

$\dot{m}$  Débit total de la masse évaporée  $[kg.s^{-1}]$   
 $\ell_c$  Longueur de *Markstein*  $[m]$   
 $\mathbf{n}$  Vecteur unitaire perpendiculaire à la surface de la flamme dirigée des gaz brûlés vers les gaz frais  $[-]$   
 $\tilde{S}_d$  Vitesse de déplacement de flamme pondérée par la densité (DWFDS)  $[m/s]$   
 $C_p$  Chaleur spécifique à pression constante  $[J.kg^{-1}.K^{-1}]$   
 $D$  Coefficient de diffusion  $[m^2.s^{-1}]$   
 $d_p$  Diamètre de la particule (goutte)  $[m]$   
 $F(B)$  Facteur de correction de la variation de l'épaisseur du film vapeur  $[-]$   
 $I_0$  Facteur d'étirement  $[m/s]$   
 $M$  Masse molaire  $[kg.mol^{-1}]$   
 $P$  Pression  $[Pa]$   
 $R$  Rayon de flamme  $[m]$   
 $R_0$  Rayon interne de la chambre sphérique de combustion  $[m]$   
 $R_{eq,k}$  Rayon de flamme équivalent lié à l'espèce  $k$  (Intégrale pondérée en surface)  $[m]$   
 $R_{eq2,k}$  Rayon de flamme équivalent lié à l'espèce  $k$  (Intégrale pondérée en volume)  $[m]$

## TABLE DES MATIÈRES

---

$R_{eq}$	Rayon de flamme équivalent basé sur la masse totale des espèces déficientes.	[m]
$S_c$	Vitesse de consommation de flamme	[m/s]
$S_f$	Vitesse absolue de flamme ou vitesse de propagation	[m/s]
$S_l^0$	Vitesse de combustion laminaire non étirée	[m/s]
$S_d$	Vitesse de déplacement de flamme	[m/s]
$u_g$	Vitesse des gaz frais	[m/s]
$u_{u,R_{eq,k}}$	Vitesse fictive des gaz frais à $r = R_{eq,k}$	[m/s]
$Y$	Fraction massique	[-]
$Y_c$	Variable de progression	[-]
$Y_k$	Fraction massique de l'espèce $k$	[-]

### Nombres adimensionnels

$B_m$	Nombre de <i>Spalding</i> massique (de transfert de masse)	[-]
$B_T$	Nombre de <i>Spalding</i> thermique (de transfert d'énergie)	[-]
$B_{T0}$	Nombre de <i>Spalding</i> thermique sans chauffage de la goutte	[-]
$Nu^*$	Nombre de <i>Nusselt</i> modifié	[-]
$Nu_0$	Nombre de <i>Nusselt</i> sans écoulement de <i>Stefan</i>	[-]
$Pr$	Nombre de <i>Prandtl</i>	[-]
$Re_p$	Nombre de <i>Reynolds</i> de la goutte	[-]
$Sc$	Nombre de <i>Schmidt</i>	[-]
$Sh^*$	Nombre de <i>Sherwood</i> modifié	[-]
$Sh_0$	Nombre de <i>Sherwood</i> sans écoulement de <i>Stefan</i>	[-]



# INTRODUCTION GÉNÉRALE

---

## Sommaire

---

<b>1.1 Contexte</b> . . . . .	<b>21</b>
1.1.1 Les différents types de biocarburants . . . . .	24
1.1.2 Les tests des biocarburants dans le transport aérien . . . . .	25
<b>1.2 Motivation</b> . . . . .	<b>27</b>
<b>1.3 Objectifs de la thèse</b> . . . . .	<b>28</b>
<b>1.4 Organisation du manuscrit</b> . . . . .	<b>28</b>

---

## 1.1 Contexte

Actuellement, 80% de la consommation énergétique mondiale provient de ressources d'origine fossile, à savoir : le pétrole brut, le gaz naturel et le charbon. Ces combustibles fossiles sont générés, il y a des millions d'années, à partir de matériaux organiques synthétisés au cœur de la terre à des températures et des pressions très élevées. Ils ne peuvent être régénérés sur une courte période. Pourtant, en raison notamment d'une forte demande en énergie due à la croissance démographique et économique des pays en voie de développement, la production mondiale du carburant ne cesse d'augmenter. Compte tenu de cette augmentation continue prévue de la consommation des combustibles fossiles, la concentration atmosphérique des émissions des gaz à effet de serre (GES), principalement le CO<sub>2</sub>, continuerait d'accroître, entraînant un effet de serre anthropique et contribue ainsi à l'élévation de la température de la terre. Les conséquences risquent d'être sans précédent sur la civilisation humaine. Par ailleurs, l'expansion thermique des océans et la fonte des glaciers devrait entraîner une élévation du niveau de la mer et la fréquence des phénomènes météorologiques extrêmes, tels que les fortes pluies et les tempêtes tropicales, les vagues de chaleur et de froid, les inondations et les sécheresses devrait

continuer de croître [98]. En outre, ces impacts directs sont susceptibles d'engendrer un certain nombre d'effets secondaires, tels que l'inégalité croissante des revenus et les migrations massives [39]. L'actualité de ces dernières années en est témoin.

Tous ces dérèglements météorologiques, socio-économiques mènent à un contexte géopolitique qui a, à son tour, de fortes répercussions sur les prix du pétrole (Fig. 1.1).

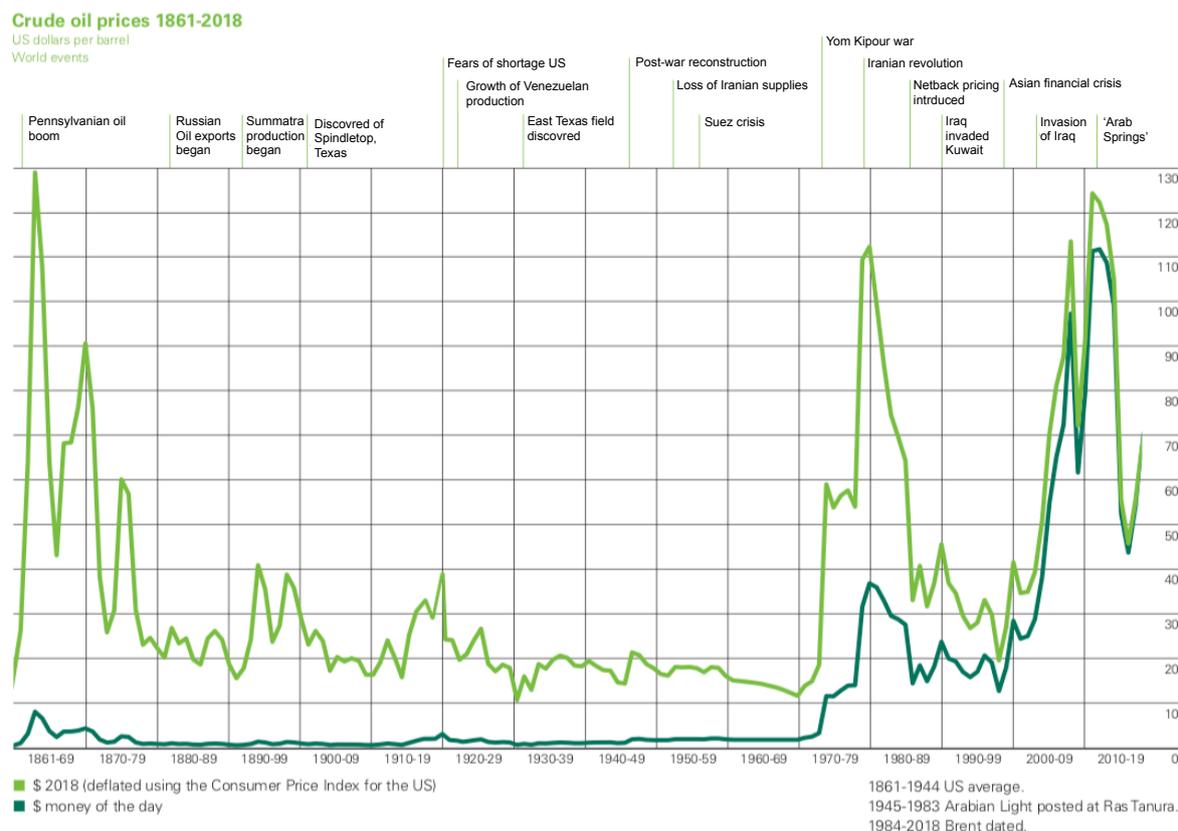


FIGURE 1.1 – Variation du prix de pétrole brut jusqu'à l'année 2018 en fonction des principaux événements géopolitiques de ces dernières décennies [58].

En réponse aux impacts directs et aux effets secondaires de l'élévation de la température de la terre, 197 pays se sont engagés, dans l'accord de Paris, COP21, de la Convention-cadre des Nations Unies sur le changement climatique en 2015, à limiter « *l'augmentation de la température moyenne mondiale à un niveau bien inférieur à 2°C au dessus des niveaux préindustriels et en poursuivant l'action menée pour limiter l'élévation des températures à 1.5°C par rapport aux niveaux préindustriels.* » Pour que cela se produise, les émissions mondiales de CO<sub>2</sub> devraient atteindre leur maximum vers 2020 et diminuer par la suite [39]. Manifestement, une telle inversion des tendances historique en matière d'émissions exige la participation de tous

les secteurs de l'économie, y compris celui de l'aéronautique. Cette contrainte stricte sur l'utilisation des ressources en combustibles fossiles de la planète implique également qu'un tiers des réserves mondiales de pétrole, la moitié des réserves mondiales de gaz et plus de 80% des réserves mondiales de charbon devraient rester inutilisés pour atteindre l'objectif de 2°C [143].

En 2001, déjà conscient de ces problématiques, l'ACARE<sup>1</sup>, qui regroupe les acteurs de l'industrie, des régulateurs et des chercheurs académiques, a donné naissance à deux visions : l'une en 2001 pour 2020 connue sous le nom *ACARE 2020* [6] et l'autre en 2011 pour 2050 connue sous le nom *Flightpath 2050* [73]. Ces deux visions sont ambitieuses et répondent à plusieurs objectifs : la qualité et l'accessibilité des voyages, la sécurité, le leadership industriel et l'impact environnemental. Pour ce dernier volet, concernant le transport aérien dans sa globalité, l'ACARE fixe comme objectif la réduction de la consommation de fuel et les émissions de CO<sub>2</sub> de 50% par passager par kilomètre, la réduction des émissions d'oxyde d'azote à 80% et la réduction du bruit perçu à 50%, par rapport aux chiffres de l'an 2000. Cela se traduit au niveau moteur par une réduction de la consommation et des émissions de CO<sub>2</sub> par 20%, réduction des émissions NO<sub>x</sub> par 80% et de -20 dB cumulées sur le bruit moteur. Avec les plans des constructeurs aéronautiques établis à ce jour, il est maintenant clair que ces objectifs ne seront jamais atteints [89]. Par ailleurs, ils ont été mis à jour lors de la commission européenne de 2011 par d'autres objectifs, *Flightpath 2050*, plus ambitieux par rapport aux standards technologiques de l'an 2000. *Flightpath 2050* appelle à des réductions respectives de 75%, 90% et 65% d'ici 2050. Cela revient à des réductions au niveau moteur des émissions de CO<sub>2</sub> de 30%, NO<sub>x</sub> de 70% et de 75% des suies, de CO et des imbrûlés. Le tableau (1.1) résume les objectifs des deux visions ACARE.

Catégorie	ACARE		Niveau moteur	
	Vision 2020	Flightpath 2050	Vision 2020	Flightpath 2050
CO <sub>2</sub>	50%	75%	20%	30%
NO <sub>x</sub>	80%	90%	80%	70%
Bruit	50%	65%	-20 dB	-

TABLE 1.1 – Résumé des objectifs ACARE, Vision 2020 et Flightpath 2050, par rapport aux chiffres de l'an 2000.

---

1. Advisory Council for Aeronautical Research in Europe, créée en 2001.

Les deux visions illustrent bien l'évolution de la conception des carburants de substitution. Alors que la vision 2020 prévoit que « [...] les carburants cryogénique faiblement polluants deviennent abordables en 2020. » [6], *Flightpath 2050* déclare que « [...] la dépendance vis-à-vis du pétrole brut est réduite par des carburants liquides en provenance d'autres sources à un coût compétitif » [73].

Les réductions annoncées par la vision ACARE vont être obtenues en améliorant le rendement des avions et de leur motorisation. Mais elles ne supprimeront pas les émissions de CO<sub>2</sub> qui sont directement liées à la puissance requise pour faire voler un avion. Une autre voie doit donc être poursuivie pour réduire encore plus l'empreinte environnementale du transport aérien. Les carburants alternatifs renouvelables constituent la meilleure réponse dans le contexte actuel. Des essais de démonstration ont été réalisés à partir de 2008 dans l'aéronautique. Ces efforts se poursuivent aujourd'hui avec le développement de biocarburants de troisième génération basés sur la culture de microalgues.

### 1.1.1 Les différents types de biocarburants

Les biocarburants sont des combustibles liquides ou gazeux produits à partir de matière végétale appelée également biomasse. Ils proviennent notamment de l'agriculture ou de la sylviculture.

Les biocarburants sont généralement classés en trois générations. Chaque génération contient un certain nombre de carburants différents. Cette classification est basée sur la source à partir de laquelle le combustible est produit. La structure du biocarburant ne change pas avec le changement de génération. C'est la source du biocarburant qui change avec le changement des générations [56].

**Les biocarburants de première génération** sont généralement produits directement à partir de cultures agro-alimentaires, telles que le maïs, le sucre, les graisses animales et l'huile végétale. Le soja, le blé, les arachides, le colza, la betterave à sucre sont également des matières premières dignes d'intérêt pour la production de ce type de biocarburant. Cependant, ces matières premières ne sont ni écologiques ni durables. Ils sont en concurrence directe avec les cultures vivrières car ils exigent plus de terres cultivables et des quantités importantes d'eau pour assurer un rendement correct.

**Les biocarburants de deuxième génération** sont issus de la transformation de la biomasse en hydrocarbures. Cette biomasse est générée par des résidus agricoles et forestières, de déchets municipaux et d'huiles végétales usées. La figure (1.2) montre quelques plantes servant de matières premières pour la production de ces biocarburants.



FIGURE 1.2 – Exemple de plantes servant de matières premières pour la production des biocarburants de deuxième génération.

**Les biocarburants de troisième génération** : les inconvénients associés aux biocarburants de première et de deuxième génération, tels que la perturbation de la chaîne alimentaire mondiale, l'utilisation de grandes quantités d'eau, la destruction des forêts et l'augmentation des émissions de gaz à effet de serre, ont conduit les chercheurs à trouver une solution alternative. C'est ainsi que les biocarburants de troisième génération ont vu le jour [56, 156]. De manière générale, les biocarburants dérivés de micro-organismes et d'algues sont considérés comme des biocarburants de troisième génération [156]. Les algues ont besoin du  $\text{CO}_2$ , des minéraux et d'une source d'énergie lumineuse pour qu'elles se développent. Elles peuvent être cultivées quasi partout sous condition d'une température adéquate. En plus d'être une source pour produire des biocarburants, les algues constituent une solution pour réduire la concentration dans l'atmosphère de  $\text{CO}_2$ , le principal gaz à effet de serre.

### 1.1.2 Les tests des biocarburants dans le transport aérien

L'utilisation des biocarburants joue un rôle essentiel pour atteindre les objectifs fixés par l'ACARE outre les améliorations apportées à la technologie des moteurs, à l'infrastructure et à l'exploitation de la navigation aérienne et des aéroports. Les biocarburants, notamment ceux de troisième génération, sont renouvelables, respectueux de l'environnement et propres. Ils sont considérés comme les carburants de substitution les plus prometteurs pour le secteur aéronautique. C'est pourquoi plusieurs vols de démonstration ont été effectués depuis 2008 afin de tester ces nouveaux carburants sur des moteurs lors de vols commerciaux.

La base de données *BioJetMap*<sup>2</sup> permet de suivre l'évolution du secteur des biocarburants aéronautiques à travers des vols successifs de démonstration et commerciaux. Le premier vol d'essai de biocarburant réussi a été réalisé par Virgin Atlantic en février 2008. En juin 2011, KLM est la première compagnie aérienne au niveau de l'union européenne, à accomplir des vols commerciaux de biocarburants avec des passagers à bord. Sur le vol Amsterdam-Paris à bord d'un B737, le combustible utilisé est un mélange de biocarburants produits à partir d'une huile de cuisson usée. Après cela, 200 vols ont suivi. KLM exécute également la liaison Amsterdam-New York JFK, sur 26 liaisons hebdomadaires et sur la liaison Amsterdam-Paris avec quatre vols quotidiens, en utilisant un mélange d'huile de cuisson usée et de biocarburants à base d'huile de caméline [113]. Toujours selon la base de données *BioJetMap*, Lufthansa est devenue la première compagnie aérienne au monde à tester l'utilisation d'un mélange à 48.6% en volume de biocarburants à base de jatropha, de caméline et de graisses animales lors de ses essais quotidiens avec un Airbus A321 testé pendant six mois [113], entre juillet 2011 et décembre de la même année.

Selon la littérature, l'utilisation de mélanges de carburants alternatifs avec Jet A-1 entraîne une réduction significative des émissions de suie et de SO<sub>x</sub> des moteurs en raison de la teneur faible en aromatiques et en soufre [159]. D'autres espèces sont moins affectées et leurs changements d'émissions peuvent dépendre de la technologie de la chambre de combustion (NO<sub>x</sub>, CO, CHU) tandis que la consommation plus faible associée à la teneur énergétique plus élevée de SPK (synthetic paraffinic kerosene), sans aromatiques produit par certaines technologies de conversion<sup>3</sup>, est un facteur de réduction des émissions de NO<sub>x</sub> et CO<sub>2</sub>. Les défis à relever consistent à diminuer les coûts de production, à accroître le potentiel de ravitaillement, à investir dans des installations de production et de conversion des matières premières et à assurer l'efficacité de l'ensemble de la chaîne logistique, afin de permettre aux carburants de substitution de jouer un rôle dynamique dans l'approvisionnement en carburant d'aviation.

---

2. <http://www.biojetmap.eu/#31080>

3. Il existe d'autres technologies de conversion ou de production de biocarburants qui produisent le SPK avec des aromatiques [113].

### 1.2 Motivation

L'utilisation des carburants classiques depuis les débuts de l'industrie a permis de les étudier, expérimentalement et numériquement, afin de mieux connaître leurs propriétés et améliorer leur rendement énergétique. Avec les contraintes économiques et environnementales évoquées précédemment, les biocarburants se sont imposés comme une alternative aux carburants d'origine fossile. Cependant, les diverses origines des biocarburants, comme décrit *supra*, leur confèrent une composition plus complexe que les carburants classiques. Afin de les utiliser dans les technologies moteur existantes, leurs propriétés thermo-chimiques et rhéologiques macroscopiques doivent être étudiées derechef afin de les améliorer et les rapprocher davantage de celles des carburants substitués via des mélanges de fuels. De ce fait, l'impact des biocarburants sur les performances de la chambre de combustion d'un moteur aéronautique ou automobile reste mal estimé.

L'évaluation de l'effet des carburant alternatifs sur les performances et les émissions moteur nécessite donc des outils de simulation prédictifs capables de bien représenter l'ensemble des processus physico-chimiques qui s'y produisent. Par conséquent, il apparaît essentiel d'avoir une représentation fine de la structure de la flamme de spray dans les simulations haute fidélité de la combustion turbulente. Dans ce type de simulation, la difficulté est double. D'une part le caractère fortement multi-échelles de ces écoulements où les radicaux chimiques sont produits et consommés sur quelques microns alors que la taille typique d'une chambre de combustion aéronautique est de l'ordre de la dizaine de centimètres. D'autre part, la composition complexe des carburants classiques et alternatifs doit être considérée via une cinétique chimique représentative afin de mieux reproduire la structure de flamme. L'augmentation de la puissance des super-calculateurs, depuis plusieurs années, a permis d'améliorer la représentation de la cinétique chimique et des régimes de combustion dans les simulations instationnaires. Cela a fait émerger une autre difficulté qui consiste à résoudre ce type de problème sur des machines massivement parallèles, ce qui nécessite de répartir le calcul des phénomènes de réaction/diffusion sur l'ensemble des processeurs indépendamment du maillage.

Cette thèse s'inscrit dans cette optique de simulation de flammes de spray de carburants complexes avec une chimie détaillée sur des maillages suffisamment fins.

## 1.3 Objectifs de la thèse

Les travaux menés dans le cadre de cette thèse ont plusieurs objectifs. Le premier est de démontrer la faisabilité de transporter un grand nombre d'espèces et d'intégrer des schémas cinétiques de grande taille dans la simulation 3D instationnaire. On cherche à répondre à la question : les méthodes d'intégration spatiale et temporelle à l'état de l'art sont-elles suffisamment précises et performantes pour faire des simulations DNS et LES de brûleurs réels ? Pour ce faire, une étude introductive est réalisée par une simulation DNS 3D d'une flamme sphérique en expansion, monophasique, en utilisant une chimie détaillée. Avant d'aller vers la simulation des flammes diphasiques, le deuxième objectif est de coupler les approches de transport complexe à des modèles d'évaporation qui incluent plusieurs composants et qui représentent correctement l'évaporation différentielle des composants. Démontrer ainsi que ces approches peuvent s'appliquer à des flammes de spray réalistes. Enfin, réaliser une simulation LES d'une flamme de spray en utilisant les mêmes méthodes numériques d'intégration spatiale et temporelle et le modèle d'évaporation est couplé aux approches de transport complexe.

Ce travail de thèse est une étape nécessaire vers un nouveau niveau de fidélité dans la prédiction des flammes de spray de carburants complexes.

## 1.4 Organisation du manuscrit

Le travail présenté dans ce manuscrit s'organise en sept chapitres organisés comme suit :

### **Chapitre 1 : Introduction.**

Ce chapitre vise, d'une part, à circonscrire le contexte général du travail et à préciser ses objectifs, et d'autre part à revenir sur les principales motivations et objectifs qui ont conduit au choix de ce sujet.

### **Chapitre 2 : Équations et modèles pour les écoulements réactifs.**

Le 2<sup>ème</sup> chapitre décrit les équations de la mécanique des fluides qui gouvernent les écoulements réactifs. Les différentes approches et méthodes du formalisme LES sont également présentées dans le cadre des écoulements turbulents à faible nombre de *Mach*, ainsi que le code de calcul *YALES2*, utilisé pour réaliser les simulations de cette thèse.

### **Chapitre 3 : Étude de la vitesse de consommation d'une flamme laminaire sphérique en expansion.**

Ce chapitre 3 consiste en l'étude numérique de la vitesse de consommation d'une flamme monophasique sphérique en expansion, dans ses deux configurations non-confinée et confinée (§3.4 et §3.5). Deux fuels sont utilisés pour cette étude : le méthane et l'iso-octane. La simulation réalisée dans cette étude est une DNS 3D avec les mêmes méthodes numériques que les autres simulations réalisées au cours de cette thèse. L'objectif principal de ce chapitre est de valider la méthodologie avec des schémas détaillés.

### **Chapitre 4 : Modélisation de l'évaporation d'une goutte isolée multi-composants.**

Dans ce chapitre, nous introduisons dans un premier temps les bases de la modélisation numérique de la phase dispersée. La modélisation de la composition de la goutte multi-composants est également traitée. Dans un deuxième temps, sera présenté le modèle d'évaporation d'*Abramzon-Sirignano* qui sera validé dans le chapitre 5 et utilisé pour l'étude de la flamme de spray turbulente dans le chapitre 6.

### **Chapitre 5 : Validation du modèle d'évaporation sur une goutte isolée.**

La validation du modèle d'évaporation exposé dans le chapitre précédent est résumée dans ce chapitre 5. Ainsi, nous commençons d'abord par exposer les cas de validation du modèle sur un cas d'évaporation : d'une goutte mono-composant de n-heptane, d'une goutte surrogate de kérosène, puis d'une goutte bi-composants n-heptane/hexadécane, enfin le modèle est validé sur un d'évaporation d'une goutte isolée bi-composants dans un écoulement d'air chaud.

### **Chapitre 6 : Simulation d'une flamme de spray turbulente.**

Le chapitre 6 est consacré à l'étude numérique de la flamme de spray turbulente n-heptane/air qui a été étudiée expérimentalement au laboratoire CORIA. L'objectif de ce chapitre est d'effectuer la LES de ce brûleur avec une chimie analytique réduite, afin de démontrer la capacité de la méthode à récupérer la structure de flamme appropriée.

### **Chapitre 7 : Conclusion.**

Le chapitre 7 vient clore ce manuscrit avec une conclusion générale sur les travaux exposés. Des perspectives de recherche sont proposées sur l'étude des flammes diphasiques avec des combustibles multi-composants.

Cette thèse a été financée par la région Normandie. Les simulations réalisées dans le cadre de cette thèse ont bénéficié d'un accès aux ressources HPC du CINES (Centre Informatique National de l'Enseignement Supérieur), de l'IDRIS (Institut du Développement et des Ressources en Informatique Scientifique) et du TGCC-CEA dans le cadre des allocations x20172b6880 réalisées par GENCI (Grand Équipement National de Calcul Intensif), par le projet ELCI (Environnement Logiciel pour le Calcul Intensif) et le CRIANN (Centre Régional Informatique et d'Applications Numériques de Normandie) avec l'allocation 2012006.

# ÉQUATIONS ET MODÈLES POUR LES ÉCOULEMENTS RÉACTIFS

## Sommaire

<b>2.1</b>	<b>Introduction</b>	<b>32</b>
<b>2.2</b>	<b>Propriétés thermodynamiques d'un mélange</b>	<b>32</b>
2.2.1	Description de la composition d'un mélange	32
2.2.2	Description de la thermodynamique d'un mélange	33
2.2.3	La loi des gaz parfaits	35
<b>2.3</b>	<b>Équations de conservation de la phase gazeuse</b>	<b>35</b>
2.3.1	Équations de conservation et loi d'état	36
2.3.2	Modélisation des propriétés de transport	40
2.3.3	Équations de conservation étendues au formalisme LES	45
2.3.4	Équations bilans étendues à la simulation aux grandes échelles	49
<b>2.4</b>	<b>Modélisation de la combustion</b>	<b>55</b>
2.4.1	Cinétique chimique	56
2.4.2	Régimes de combustion	60
<b>2.5</b>	<b>Présentation de l'outil numérique YALES2</b>	<b>65</b>
2.5.1	Concepts généraux du solveur	65
2.5.2	La méthode de pas fractionnés	72
2.5.3	Solveur à faible nombre de <i>Mach</i> à densité variable	74
2.5.4	Résolution de l'équation de Poisson	77
<b>2.6</b>	<b>Conclusion</b>	<b>78</b>

## 2.1 Introduction

Ce chapitre rappelle les équations de la mécanique des fluides régissant le mouvement des écoulements réactifs, gazeux. Seront également abordées, les différentes approches et méthodes pour le formalisme LES dans le cas des écoulements à faible nombre de *Mach*, ainsi que les outils de modélisation présents dans le code de calcul *YALES2* [44], code utilisé pour réaliser les simulations présentées dans le cadre de cette thèse.

## 2.2 Propriétés thermodynamiques d'un mélange

### 2.2.1 Description de la composition d'un mélange

La densité  $\rho$  d'un volume de contrôle  $V$  contenant une masse  $m$  est donnée par la relation

$$\rho = \frac{m}{V} \quad (2.1)$$

La masse molaire s'écrit comme le rapport entre la masse et le nombre de moles  $n$

$$W = \frac{m}{n} \quad (2.2)$$

La composition du mélange est définie par ses fractions massiques  $Y_k$  et molaires  $X_k$  pour  $k = 1$  à  $N$ , avec  $N$  le nombre des espèces dans le mélange. Les fractions massiques et molaires sont données, respectivement, par les deux expressions

$$Y_k = \frac{m_k}{m} \quad (2.3)$$

et

$$X_k = \frac{n_k}{n} \quad (2.4)$$

où  $m_k$  est la masse et  $n_k$  le nombre de moles de l'espèce  $k$  dans le volume  $V$ . La somme de chacune de ces fractions massiques et molaires doit être égale à l'unité (Eq 2.5 et 2.6).

$$\sum_{k=1}^{N_{sp}} Y_k = 1 \quad (2.5)$$

$$\sum_{k=1}^{N_{sp}} X_k = 1 \quad (2.6)$$

La masse molaire d'un mélange peut être exprimée par deux relations. Soit en fonction des fractions molaires (2.7), soit en fonction des fractions massiques (2.8)

$$W = \sum_{k=1}^{N_{sp}} X_k W_k \quad (2.7)$$

$$\frac{1}{W} = \sum_{k=1}^{N_{sp}} \frac{Y_k}{W_k} \quad (2.8)$$

avec

$$W_k = \frac{m_k}{n_k} \quad (2.9)$$

la masse molaire de l'espèce  $k$ .

### 2.2.2 Description de la thermodynamique d'un mélange

Dès lors qu'un mélange multi-composants est étudié, il est nécessaire de définir les lois de mélange qui régissent les propriétés physiques globales du système.

La capacité calorifique molaire de l'espèce  $k$  à la pression standard  $P_0 = 1 \text{ atm}$  en fonction de la température  $T$  est déterminée à l'aide d'une approximation polynomiale ajustée à partir de données expérimentales [5], aussi appelée "polynôme NASA" :

$$\frac{C_{p,k}^m(T, P_0)}{R} = a_{1,k} + a_{2,k}T + a_{3,k}T^2 + a_{4,k}T^3 + a_{5,k}T^4 \quad (2.10)$$

où  $R = 8.314 \text{ J.mol}^{-1}.\text{K}^{-1}$  désigne la constante des gaz parfaits.

L'enthalpie et l'entropie sont définies à partir de la capacité calorifique comme :

$$H_k^m(T, P_0) = \int_{T^0}^T C_{p,k}^m(\theta, P_0) d\theta + \Delta h_{f,k}^{0,m} \quad (2.11)$$

$$S_k^m(T, P_0) = \int_{T^0}^T \frac{C_{p,k}^m(\theta, P_0)}{\theta} d\theta \quad (2.12)$$

avec  $\Delta h_{f,k}^{0,m}$  l'enthalpie molaire de formation de l'espèce  $k$  à la pression standard  $P_0$  et  $T^0$  la température de référence.  $T^0$  est définie de manière à obtenir  $H_k^m(T_0, P_0) = \Delta h_{f,k}^{0,m}$ . Elle est couramment choisie à  $T_0 = 298.15$  K [178]. On peut en déduire les approximations polynomiales pour l'enthalpie et l'entropie :

$$\frac{H_k^m(T, P_0)}{RT} = \frac{a_{6,k}}{T} + a_{1,k} + \frac{a_{2,k}}{2}T + \frac{a_{3,k}}{3}T^2 + \frac{a_{4,k}}{4}T^3 + \frac{a_{5,k}}{5}T^4 \quad (2.13)$$

$$\frac{S_k^m(T, P_0)}{R} = a_{7,k} + a_{1,k} \ln(T) + a_{2,k}T + \frac{a_{3,k}}{2}T^2 + \frac{a_{4,k}}{3}T^3 + \frac{a_{5,k}}{4}T^4 \quad (2.14)$$

où  $a_{6,k} = \Delta h_{f,k}^{0,m}$ . Les coefficients  $a_{n,k}$  dépendent de chaque espèce mais aussi du domaine de température dans lequel le mélange se situe. Il existe 7 coefficients pour les températures basses et 7 autres pour les températures hautes. Les températures basses s'étendent de 300 à 1 000 K et les températures hautes de 1 000 à 5 000 K. Cependant, les valeurs haute, basse et intermédiaire de température sont potentiellement définies indépendamment pour chaque espèce. Un ensemble de 14 coefficients et 3 températures est donc nécessaire pour chaque espèce.

À partir des propriétés individuelles des espèces, il est possible de déterminer les propriétés molaires du mélange contenant  $N_{sp}$  espèces à l'aide des lois de mélange suivantes :

$$C_p^m(T, P, X) = \sum_{k=1}^{N_{sp}} X_k C_{p,k}^m(T, P_0) \quad (2.15)$$

$$H^m(T, P, X) = \sum_{k=1}^{N_{sp}} X_k H_k^m(T, P_0) \quad (2.16)$$

$$S^m(T, P, X) = \sum_{k=1}^{N_{sp}} X_k \left( S_k^m(T, P_0) - R \ln \left( \frac{P}{P_0} \right) - R \ln(X_k) \right) \quad (2.17)$$

Les deux premières lois correspondent à de simples lois additives alors que celle sur l'en-

l'entropie est plus complexe et fait intervenir un terme de pression et un terme de mélange. Les relations (2.15), (2.16) et (2.17) permettent de calculer directement les propriétés molaires. La capacité calorifique massique  $C_p$ , l'enthalpie massique  $H$  et l'entropie massique  $S$  sont alors obtenues comme suit :

$$C_p = \frac{C_p^m}{W} \quad (2.18)$$

$$H = \frac{H^m}{W} \quad (2.19)$$

$$S = \frac{S^m}{W} \quad (2.20)$$

### 2.2.3 La loi des gaz parfaits

Il est important de noter que l'hypothèse des gaz parfaits est retenue pour l'ensemble de ces travaux. Elle donne une relation entre la pression et la température,

$$P = \rho r T, \text{ avec } r = \frac{R}{W}. \quad (2.21)$$

Cette équation a pour but de lier la pression, la masse volumique et la température afin de fermer les équations de conservation présentées ci-dessous.

## 2.3 Équations de conservation de la phase gazeuse

Dans un milieu continu, le comportement des fluides est régi par le système des équations de *Navier-Stokes*. Leur dérivation peut être trouvée dans [14, 86, 94]. Les équations bilans sont des équations aux dérivées partielles (EDP) qui traduisent au niveau macroscopique la conservation de la masse, la quantité de mouvement et l'énergie.

Lors d'un calcul turbulent réactif, il est nécessaire de résoudre ces équations de *Navier-Stokes* auxquelles viennent s'ajouter différentes équations de bilan liées à la combustion [10, 116, 236]. Dans le cas d'utilisation d'une chimie détaillée, il faut ajouter autant d'équations de transport que d'espèces présentes dans le schéma cinétique.

### 2.3.1 Équations de conservation et loi d'état

Dans le cas de combustion d'un mélange de  $N_{sp}$  espèces chimiques, la simulation numérique directe nécessite la résolution d'un système de  $N_{sp} + 4$  équations de transport. Ces équations de conservation sont données ci-dessous sous leur forme conservative. La notation classique d'*Einstein* sur les indices répétés est utilisée. En coordonnées cartésiennes, pour chaque composante  $i, j = 1, 2$  ou  $3$ .

#### 2.3.1.1 conservation de la quantité de mouvement

La conservation de la quantité de mouvement s'écrit,

$$\frac{\partial \rho u_j}{\partial t} + \frac{\partial \rho u_i u_j}{\partial x_i} = -\frac{\partial P}{\partial x_j} + \frac{\partial \tau_{ij}}{\partial x_i} \quad (2.22)$$

avec  $P$  est la pression locale et  $\tau_{ij}$  le tenseur des contraintes visqueuses. Pour un fluide Newtonien, ce dernier s'écrit :

$$\tau_{ij} = \mu \left( \frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right) - \frac{2}{3} \mu \frac{\partial u_k}{\partial x_k} \delta_{ij}, \quad (2.23)$$

où  $\delta_{ij}$  le symbole de *Kronecker* et  $\mu$  désigne la viscosité dynamique du mélange. Ce dernier coefficient dépend de la température  $T$  et de la composition locale.

Les deux termes de la partie droite de l'équation (2.22) peuvent être sommés pour définir le tenseur des contraintes  $\sigma_{ij}$  :

$$\sigma_{ij} = \tau_{ij} - P \delta_{ij} \quad (2.24)$$

Le tenseur des déformations  $S_{ij}$  et sa partie déviatrice, dont la trace est nulle, étant définis comme :

$$S_{ij} = \frac{1}{2} \left( \frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right) \quad \text{et} \quad S_{ij}^D = S_{ij} - \frac{1}{3} S_{kk} \delta_{ij} \quad (2.25)$$

l'Eq. (2.22) se réécrit :

$$\frac{\partial \rho u_j}{\partial t} + \frac{\partial \rho u_i u_j}{\partial x_i} = -\frac{\partial P}{\partial x_j} + \frac{\partial}{\partial x_i} 2\mu S_{ij}^D \quad (2.26)$$

### 2.3.1.2 Conservation des espèces chimiques

L'équation de conservation des espèces est donnée par :

$$\frac{\partial \rho Y_k}{\partial t} + \frac{\partial \rho u_i Y_k}{\partial x_i} = \frac{\partial \mathcal{F}_{k,i}}{\partial x_i} + \dot{\omega}_k \quad (2.27)$$

où  $Y_k$  est la fraction massique de l'espèce  $k$ , défini par l'équation (2.3). Pour garantir la conservation de la masse, les sommes des termes sources des espèces et des gradients de flux de diffusion doivent vérifier les deux contraintes suivantes :

$$\sum_{k=1}^{N_{sp}} \dot{\omega}_k = 0 \quad (2.28)$$

$$\sum_{k=1}^{N_{sp}} \frac{\partial \mathcal{F}_{k,i}}{\partial x_i} = 0 \quad (2.29)$$

avec le flux de diffusion  $\mathcal{F}_{k,i}$  de l'espèce  $k$ , dans la direction  $i$ , dépend de la vitesse de diffusion  $\mathcal{V}_{k,i}$  de l'espèce  $k$  dans la même direction :

$$\mathcal{F}_{k,i} = -\rho \mathcal{V}_{k,i} Y_k \quad (2.30)$$

D'après *F. A. Williams* [178, 235], la vitesse de diffusion par espèce  $\mathcal{V}_{k,i}$  peut être obtenue analytiquement en résolvant le système matriciel :

$$\frac{\partial X_k}{\partial x_i} = \sum_{j=1}^{N_{sp}} \frac{X_k X_j}{\mathcal{D}_{kj}} (\mathcal{V}_{j,i} - \mathcal{V}_{k,i}) + (Y_k - X_k) \frac{\partial (\ln P)}{\partial x_i} + \frac{\rho}{P} \sum_{j=1}^{N_{sp}} Y_k Y_j (f_k - f_j) \quad (2.31)$$

où  $\mathcal{D}_{jk} = \mathcal{D}_{kj}$  est le coefficient de diffusion massique binaire de l'espèce  $j$  dans l'espèce  $k$  et il dépend de la température  $T$ , de la pression  $P$  et de la fraction massique  $Y_k$ .  $f_j$  représente les forces volumiques pour l'espèce  $j$ . Néanmoins, le système (2.31) est un système linéaire de taille  $N_{sp}^2$  et doit être résolu pour les trois directions de l'espace et à chaque instant pour les

écoulements instationnaires [178]. De point de vue algorithmique, c'est une tâche très coûteuse et complexe à implémenter [65]. Pour outrepasser cette complexité, les codes de calcul utilisent des approximations afin d'exprimer la vitesse de diffusion. La résolution du système (2.31) par inversion peut être remplacée par l'approximation proposée par *Hirschfelder et Curtiss* [94] qui est la meilleure approximation du premier ordre à la résolution exacte du système (2.31) d'après *Ern et Giovangigli* [65, 85].

$$\mathcal{V}_{k,i} X_k = -\bar{D}_{k/m} \frac{\partial X_k}{\partial x_i} \quad (2.32)$$

avec

$$\bar{D}_{k/m} = \frac{1 - Y_k}{\sum_{j \neq k} X_j / \mathcal{D}_{jk}} \quad (2.33)$$

Le coefficient  $\bar{D}_{k/m}$  est un coefficient de diffusion équivalent de l'espèce  $k$  dans le reste du mélange. L'utilisation de cette approximation a tout de même un inconvénient majeur : l'équation de conservation de la masse (2.37) n'est pas satisfaite. Pour pallier ce problème, une nouvelle vitesse,  $V_c$ , nommée vitesse de correction, est définie afin de conserver la masse totale :

$$V_i^c = \sum_{k=1}^{N_{sp}} \bar{D}_{k/m} \frac{W_k}{W} \frac{\partial X_k}{\partial x_i} \quad (2.34)$$

La forme simplifiée du flux de diffusion  $\mathcal{F}_{k,i}$  de l'Eq. (2.30) s'écrit alors :

$$\mathcal{F}_{k,i} = -\rho \mathcal{V}'_{k,i} Y_k = \rho \frac{\bar{D}_{k/m}}{X_k} \frac{\partial X_k}{\partial x_i} Y_k - \rho V_i^c Y_k \quad (2.35)$$

L'équation (2.27) se ré-écrit désormais :

$$\frac{\partial \rho Y_k}{\partial t} + \frac{\partial \rho (u_i + V_{c,i}) Y_k}{\partial x_i} = \frac{\partial}{\partial x_j} \left( \rho \bar{D}_{k/m} \frac{W_k}{W} \frac{\partial X_k}{\partial x_j} \right) + \dot{\omega}_k \quad (2.36)$$

Dans un mélange soumis à un gradient de température, une séparation des espèces le long du gradient est observé. Ce mécanisme, nommé effet *Soret* (ou thermodiffusif), se manifeste sans aucun mouvement du fluide. Il représente la diffusion de la masse due aux gradients de température et a tendance à conduire les molécules plus légères vers les régions plus chaudes et les molécules de taille plus importantes vers les régions plus froides du flux. Elle est souvent

négligée dans les modèles simples parce qu'elle est relativement coûteuse en termes de temps de calcul. Elle est néanmoins connue pour être importante, en particulier pour la combustion de l'hydrogène et plus généralement pour les cas où des radicaux très légers comme  $H$  ou  $H_2$  jouent un rôle majeur [49, 66]. Le phénomène inverse, nommé effet *Dufour*, existe également : un gradient de température s'établit lorsque deux espèces, initialement à la même température, se mélangent par diffusion. Les effets *Soret* et *Dufour* ont en fait la même origine et sont réciproques. Ils sont parfois significatifs dans le cas d'une interaction flamme-paroi [177, 180]. Mais ils ne sont toutefois pas pris en compte dans ce travail car nous traitons pas les interactions flamme/paroi. Le lecteur peut se référer aux travaux de *Bénard* [26] pour plus d'informations.

### 2.3.1.3 Conservation de la masse

L'équation de continuité ou de conservation de la masse est donnée par

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial \rho u_i}{\partial x_i} = 0 \quad (2.37)$$

où  $\rho$  est la masse volumique du fluide et  $u_i$  la composante du vecteur vitesse selon la direction  $i$ . Cette équation est obtenue en sommant l'équation de conservation des espèces. Elle n'est donc pas indépendante.

### Conservation de l'énergie

La conservation de l'énergie peut être écrite sous différentes formes selon la grandeur thermodynamique considérée. La variable choisie ici pour écrire l'équation du bilan est l'enthalpie sensible  $h_s$ . Elle se définit comme :

$$h_s = \int_{T_0}^T C_p(\theta) d\theta \quad (2.38)$$

avec  $C_p$  est la capacité calorifique molaire à pression constante.

L'équation bilan pour l'enthalpie sensible s'écrit :

$$\frac{\partial \rho h_s}{\partial t} + \frac{\partial \rho u_i h_s}{\partial x_i} = \frac{DP}{Dt} + \frac{\partial Q_i}{\partial x_i} + \tau_{ij} \frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \dot{\omega}_T, \quad (2.39)$$

où l'opérateur  $D \cdot /Dt$  exprime la dérivée particulaire et s'écrit sous la forme :  $D \cdot /Dt =$

$\partial \cdot / \partial t + u_i \partial \cdot / \partial x_i$ .  $Q_i$  désigne le flux de chaleur diffusif dans la direction  $i$ . Sans les effets de *Soret* et *Dufour*, ce flux s'écrit :

$$Q_i = \lambda \frac{\partial T}{\partial x_i} - \sum_{k=1}^{N_{sp}} h_{s,k} \mathcal{F}_{k,i} \quad (2.40)$$

avec  $\lambda$  la conductivité thermique et  $\mathcal{F}_{k,i}$  le flux de diffusion de l'espèce  $k$  dans la direction  $i$  défini dans l'équation (2.30).

Le terme source d'énergie chimique est noté  $\dot{\omega}_T$ . Ce dernier est lié au dégagement de chaleur produit lors de la combustion et il est en fonction des enthalpies de formation des espèces,

$$\dot{\omega}_T = - \sum_{k=1}^{N_{sp}} \Delta h_{f,k}^0 \dot{\omega}_k \quad (2.41)$$

où  $\Delta h_{f,k}^0$  est l'enthalpie massique de formation de l'espèce  $k$  à la température de référence  $T_0 = 298.15 \text{ K}$ .

## 2.3.2 Modélisation des propriétés de transport

Cette section résume les différentes approches disponibles dans YALES2 pour modéliser les propriétés de transport dans le mélange : la viscosité de cisaillement  $\mu$  et la conductivité  $\lambda$  et la diffusion binaire  $D_{ij}$ .

### 2.3.2.1 Théorie cinétique des gaz

La théorie cinétique des gaz permet de déterminer les propriétés de transport de chaque espèce pour la viscosité de cisaillement  $\mu_k$  et la conductivité  $\lambda_k$  ou de chaque paire d'espèces pour la diffusion binaire  $\mathcal{D}_{kj}$ . Elle fait intervenir des notions comme le potentiel de *Lennard-Jones*, les intégrales de collisions calculées par *Mason* et *Monchick* et les relations d'*Eucken* étendues par *Warnatz*. Une description détaillée de cette théorie est exposée dans la thèse de *Gruselle* [91]. Les expressions des propriétés de transport pour une espèce pure sont données ci-dessous. Plus de détails sur la formulation et les notations sont rapportés ici [30, 91, 147, 233].

Pour chaque espèce la viscosité de cisaillement  $\mu_i$  est donnée par la relation suivante :

$$\mu_k(T) = \frac{5}{16} \frac{\sqrt{\pi m_k k_B T}}{\pi \sigma_k^2 \Omega_{kk}} \quad (2.42)$$

La conductivité thermique :

$$\lambda_{th,k}(T) = \frac{\mu_k}{W_k} R \left( f_k^{trans} C_{v_k}^{trans} + f_k^{rot} C_{v_k}^{rot} + f_k^{vib} C_{v_k}^{vib} \right) \quad (2.43)$$

Les expressions de  $f_k$  et  $C_{v_k}$  sont détaillées ici [91].

La diffusion binaire :

$$\mathcal{D}_{kj}(T) = \frac{3}{16} \frac{\sqrt{\pi k_B^3 T^3 / m_i}}{p \pi \sigma_{kj}^2 \Omega_{kj}} \quad (2.44)$$

La théorie cinétique des gaz nous a permis d'obtenir les propriétés de transport des espèces pures. Maintenant, il convient de déterminer les propriétés locales du mélange. Pour ce faire, trois méthodes sont présentées selon leur niveau de complexité : l'approche multi-composants, l'approche dite *Mixture averaged* et l'approche de modélisation de transport simplifiée.

### 2.3.2.2 Approche multi-composants

Cette approche est la plus précise mais aussi la plus difficile à mettre en œuvre et très coûteuse [65]. Cela implique la résolution par inversion d'un système linéaire de taille  $N_{sp} \times N_{sp}$  dans chaque direction de l'espace [231]. Cette approche multi-composants s'avère difficile et très coûteuse à réaliser de point de vue algorithmique [65].

### 2.3.2.3 Approche *Mixture averaged*

Le modèle de transport de type *Hirschfelder & Curtiss* permet de relier les coefficients de transport du mélange en fonction de la composition du mélange et les coefficients de transport de chaque espèce. Ces derniers sont obtenus via la théorie cinétique des gaz et sont présentés brièvement *supra*. Ils sont détaillés dans les travaux de *Giovangigli* [86] et résumés dans la thèse de *Gruselle* [91].

La viscosité et la conductivité thermique sont ensuite déterminées à partir de lois de mélange. Seules les lois utilisées au cours de ces travaux sont exprimées ci-après.

La viscosité dynamique  $\mu$  est calculée à partir de la formule de *Wilke* [14] :

$$\mu = \frac{\sum_{k=1}^{N_{sp}} X_k \mu_k}{\sum_j \Phi_{kj}} \text{ avec } \Phi_{kj} = \frac{\left(1 + \sqrt{\frac{\mu_j}{\mu_k}} \left(\frac{W_k}{W_j}\right)^{1/4}\right)^2}{\sqrt{8} \sqrt{1 + W_k/W_j}} \quad (2.45)$$

La conductivité thermique  $\lambda$  est calculée via la loi de mélange donnée par *Brokaw* [23] :

$$\lambda = \frac{1}{2} \left( \sum_{k=1}^{N_{sp}} X_k \lambda_k + \left( \sum_{k=1}^{N_{sp}} \frac{X_k}{\lambda_k} \right)^{-1} \right) \quad (2.46)$$

Le coefficient de diffusion moyen par espèce  $D_k$  est donné en fonction des fractions massiques, des fractions molaires et des coefficients de diffusion binaire  $\mathcal{D}_{kj}$ . Il est exprimé par l'équation (2.33).

#### 2.3.2.4 Approche de transport simplifiée

La dernière approche est le modèle de transport simplifié car il est basé sur des lois empiriques. Il est utilisé dans des cas ne nécessitant pas une précision de calcul et pour réduire le coût CPU. Ce modèle est largement utilisé par les codes CFD.

**La viscosité dynamique** est calculée par une loi dépendant de la température. Cette section présente deux modèles de cette loi : la loi de *Sutherland* [212] et la loi puissance. La loi de *Sutherland* est donnée par la relation suivante :

$$\mu(T) = \mu_{ref} \frac{T_{ref} + C}{T + C} \left( \frac{T}{T_{ref}} \right)^{3/2}, \quad (2.47)$$

où la viscosité de référence  $\mu_{ref}$ , la température de référence  $T_{ref}$  et la température de *Sutherland*  $C$  dépendent du mélange considéré. Pour l'air ( $N_2$ ), à une température comprise entre 170 et 1900 K, on utilise  $\mu_{ref} = 1.715 \times 10^{-5} \text{ kg.m}^{-1}.\text{s}^{-1}$ ,  $T_{ref} = 273.15 \text{ K}$  et  $C = 110.4 \text{ K}$ .

La loi puissance est formulée comme suit :

$$\mu(T) = \mu_0 \left( \frac{T}{T_0} \right)^\alpha \quad (2.48)$$

Dans le présent travail, les coefficients de cette loi sont donnés comme suit :  $\mu_0 = 1.788 \times 10^{-5} \text{ kg.m}^{-1}.\text{s}^{-1}$ ,  $T_0 = 300.0 \text{ K}$  et  $\alpha = 0.686$ .

Afin de présenter les deux autres coefficients de transport pour ce modèle simplifié, il faut définir les nombres adimensionnels qui en découlent :

**La diffusivité moléculaire**, qui intervient dans le transport des espèces de l'équation (2.27) via la définition du flux diffusif, peut être déterminée à partir du nombre de *Schmidt* par espèce. Le nombre de *Schmidt* caractérise le rapport entre la viscosité cinématique  $\nu$  et la diffusivité moléculaire  $D_k$  de l'espèce  $k$  :

$$Sc_k = \frac{\nu}{D_k} = \frac{\mu}{\rho D_k} \quad (2.49)$$

Lorsqu'une espèce a un nombre de *Schmidt* très inférieur à 1, comme pour le di-hydrogène avec  $Sc_{H_2} = 0.2$ , cela signifie que l'espèce diffuse plus vite que la quantité de mouvement.

**La conductivité thermique** est estimée à partir de nombre de *Prandtl* qui caractérise le rapport entre la viscosité  $\mu$  et la diffusivité thermique  $\lambda$  :

$$Pr = \frac{\mu C_p}{\lambda} \quad (2.50)$$

Lorsque le *Prandtl* du mélange est plus petit que 1, cela signifie que la chaleur diffuse plus vite dans le mélange que la quantité de mouvement.

Le nombre de *Lewis* de l'espèce  $k$  est le rapport des deux nombres précédents :

$$Le_k = \frac{Sc_k}{Pr} = \frac{\lambda}{\rho C_p D_k} \quad (2.51)$$

Un nombre de *Lewis* inférieur à 1 signifie que l'espèce  $k$  diffuse plus vite que la chaleur. En général, le nombre de *Lewis* ne subit que de faibles variations, même à travers le front de flamme [178].

Dans un modèle de transport simplifié général, les flux diffusifs se réécrivent :

$$\mathcal{F}_{k,i} = \rho \frac{\nu}{Sc_k} \frac{\partial Y_k}{\partial x_i} - \rho Y_k \sum_{k=1}^{N_{sp}} \frac{\nu}{Sc_k} \frac{\partial Y_k}{\partial x_i} \quad (2.52)$$

$$\mathcal{Q}_i = \frac{\mu C_p}{Pr} \frac{\partial T}{\partial x_i} - \sum_{k=1}^{N_{sp}} h_{s,k} \mathcal{F}_{k,i} \quad (2.53)$$

Dans le cas particulier où le nombre de *Schmidt* est identique et constant pour toutes les espèces, la vitesse de correction devient nulle grâce à la condition imposée sur  $Y_k$  (Eq. 2.5) :

$$V_{c,i} = \sum_{k=1}^{N_{sp}} D \frac{\partial Y_k}{\partial x_i} = \sum_{k=1}^{N_{sp}} \frac{\nu}{Sc} \frac{\partial Y_k}{\partial x_i} = 0 \quad (2.54)$$

Les flux diffusifs précédents deviennent :

$$\mathcal{F}_{k,i} = -\rho \frac{D_k}{X_k} \frac{\partial X_k}{\partial x_i} + \rho V_{c,i} Y_k = -\rho \frac{\nu}{Sc} \frac{\partial Y_k}{\partial x_i} \quad (2.55)$$

$$\mathcal{Q}_i = \lambda \frac{\partial T}{\partial x_i} - \sum_{k=1}^{N_{sp}} h_{s,k} \mathcal{F}_{k,i} = \frac{\mu C_p}{Pr} \frac{\partial T}{\partial x_i} - \sum_{k=1}^{N_{sp}} h_{s,k} \mathcal{F}_{k,i} \quad (2.56)$$

### 2.3.2.5 Approches utilisés

Pour les travaux abordés dans le cadre de cette thèse, deux approches de modélisation des propriétés de transport ont été utilisées. La première approche dite *mixture averaged*, est utilisée pour modéliser les propriétés de transport lors de l'étude de la flamme sphérique en expansion (chapitres 3) qui constitue la première partie de ce travail. Dans la deuxième partie (chapitre 6), c'est l'approche de transport simplifiée qui est employée. Un schéma cinétique, pour modéliser la chimie analytique réduite ARC de la flamme n-heptane/air, est utilisé et est exposé dans la section (6.3.3). Ce schéma préconise l'utilisation de la loi puissance afin de calculer la viscosité.

### 2.3.3 Équations de conservation étendues au formalisme LES

La plupart des écoulements dans la nature et dans les applications industrielles sont turbulents. Au XIX<sup>ème</sup> siècle, *Osborne Reynolds (1883)* [188] théorise ces régimes d'écoulement par le biais d'un nombre sans dimension qui porte son nom, défini comme le rapport des forces d'inertie. Elles rendent instable l'écoulement en générant des structures chaotiques, sur les forces visqueuses, qui tendent à laminariser l'écoulement en dissipant la quantité de mouvement.

$$Re = \frac{uL}{\nu} \quad (2.57)$$

où  $L$  représente une longueur caractéristique de l'écoulement se déplaçant à la vitesse  $u$  et avec une viscosité cinématique du fluide  $\nu$ .

Lorsque la vitesse augmente, le nombre de *Reynolds* d'un écoulement augmente. L'écoulement laminaire qui se produit à faible  $Re$  subit une transition et finit par devenir turbulent et ne peut plus dissiper ces perturbations qui sont amplifiées par plusieurs mécanismes d'instabilité. Ainsi, le nombre de *Reynolds* est le paramètre non dimensionnel clé qui détermine la transition d'un écoulement laminaire à un écoulement turbulent. Ce dernier est caractérisé par des comportements chaotiques, aléatoires et intermittents associés à une large gamme d'échelles temporelles et de structures spatiales 3D comme illustré sur la figure (2.1).

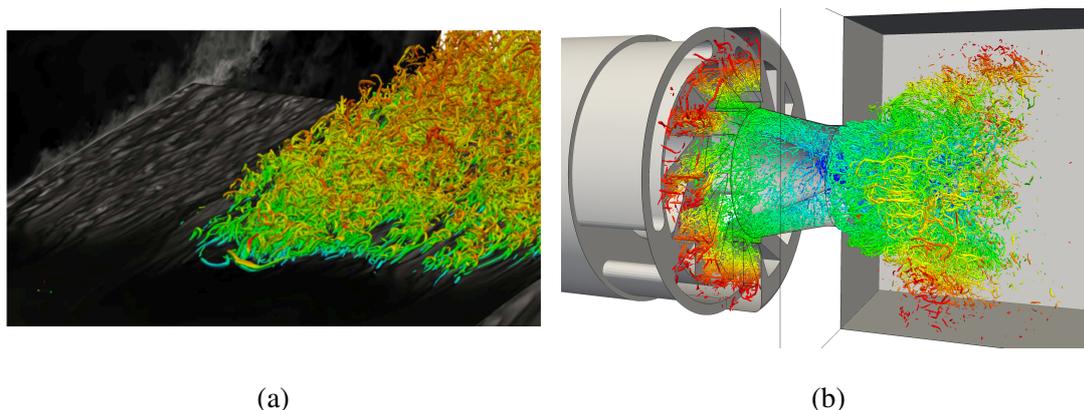


FIGURE 2.1 – (a) Les structures turbulentes d'un écoulement autour d'une aube de turbine [134]. (b) Simulation numérique directe d'un brûleur aéronautique : iso-surface du critère Q [150].

### 2.3.3.1 Cascade énergétique

Le concept de cascade énergétique est introduit par *Richardson (1922)* lors de ses travaux sur les prédictions météorologiques [190]. Le résumé de ce concept est que l'énergie cinétique se concentre aux plus grandes échelles de l'écoulement. Cette énergie est ensuite transférée à des échelles de plus en plus petites par des processus non visqueux jusqu'à ce que l'énergie soit dissipée par action visqueuse dans la zone des plus petites échelles. *Kolmogorov (1941)* [112] complète et quantifie ce schéma de transfert d'énergie turbulente des plus grandes échelles aux plus petites. Ces dernières portent son nom.

Cette théorie spectrale d'évolution est illustrée sur la figure (2.2). Nous distinguons trois échelles :

- La première, l'échelle intégrale  $l_t$ , est la plus énergétique, car les grosses structures permettent la production d'énergie cinétique turbulente. Ces structures sont peu affectées par les effets visqueux et les longueurs et vitesses associées à ces structures sont du même ordre de grandeur que les quantités utilisées pour définir le nombre de *Reynolds* de l'écoulement. L'étendue du spectre est donc d'autant plus importante que le nombre de *Reynolds* augmente.
- La deuxième échelle, l'échelle de *Taylor*, appelée également zone inertielle, est caractérisée par le transfert d'énergie des grandes échelles vers les plus petites sans dissipation. Elle revêt un caractère universel dont la décroissance suit une loi avec une pente en  $k^{-5/3}$ .
- La dernière échelle, appelée échelle dissipative, est composée des plus petits tourbillons de l'écoulement. L'énergie y est entièrement dissipée sous forme de chaleur. Sa taille est définie par l'échelle de *Kolmogorov*  $\eta_k$  qui est d'autant plus petite par rapport à  $l_t$  que le nombre de *Reynolds* est grand.

Le nombre d'onde  $k$  est associé à une taille de structure turbulente,  $l$ , suivant la relation :  $l = 2\pi/k$ . La cascade énergétique sur la figure (2.2) représente l'évolution de l'énergie en fonction du nombre d'onde. Les grandes structures, à faible nombre d'onde, concentrent l'énergie cinétique turbulente. Cette dernière atteint son maximum à  $k_t = 2\pi/l_t$ . Des considérations dimensionnelles permettent de montrer que le rapport de l'échelle intégrale sur l'échelle de *Kolmogorov* évolue en fonction du *Reynolds* à la puissance  $3/4$ . Ceci indique que la disparité

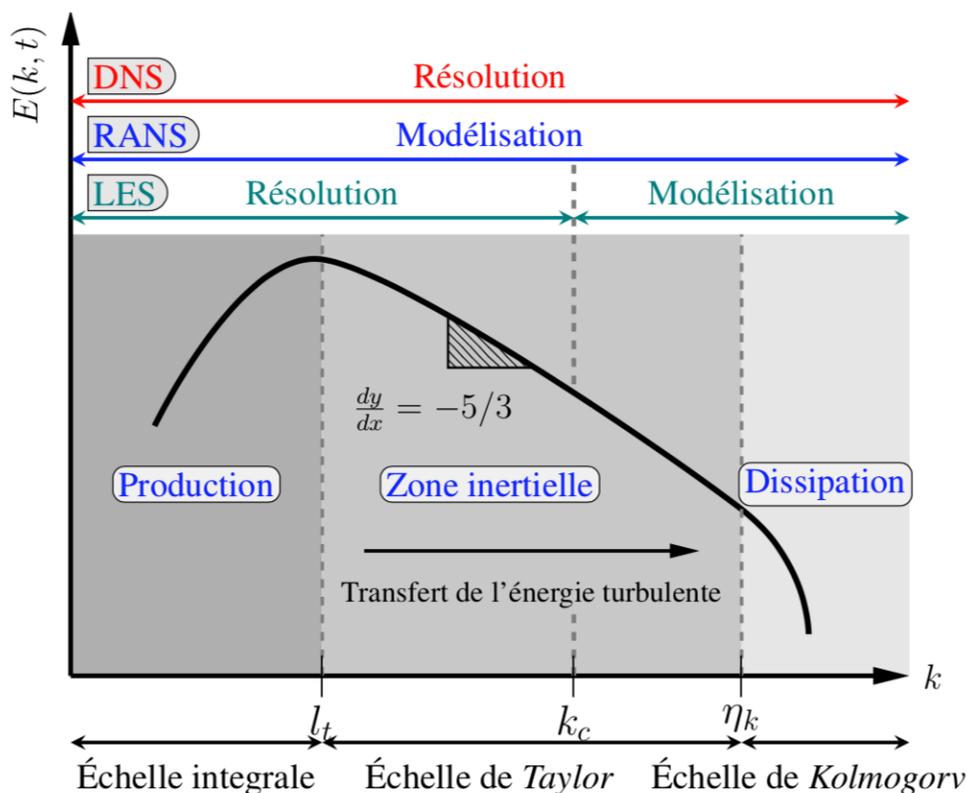


FIGURE 2.2 – Spectre d'énergie cinétique turbulente  $E$  en fonction du nombre d'onde  $k$ .

des échelles de la turbulence augmente avec le nombre de *Reynolds*. En d'autres termes, plus le nombre de *Reynolds* est grand, plus il faut augmenter la taille du maillage pour résoudre l'intégralité du spectre.

### 2.3.3.2 Simulation numérique des écoulements turbulents : RANS, LES et DNS

La CFD (*Computational Fluid Dynamics*) permet de générer des simulations d'écoulements laminaires ou turbulents en résolvant numériquement les équations discrétisées de la mécanique des fluides. Le grand avantage de la CFD est de pouvoir analyser n'importe quel type d'écoulement y compris dans des conditions extrêmes. Il existe trois principales approches numériques pour simuler les écoulements, turbulents plus particulièrement : la DNS, le RANS et la LES.

**La DNS**, *Direct Numerical Simulation* ou Simulation Numérique Directe, consiste à résoudre directement les équations de Navier-Stokes en s'assurant que toutes les échelles de la turbulence soient prises en compte. La taille de maille pour ce type de simulation est du même ordre que l'échelle de Kolmogorov. Or, l'étendue du spectre, qui augmente lorsque le niveau de turbulence augmente, rend rapidement les coûts de calcul prohibitifs. La prise en compte des

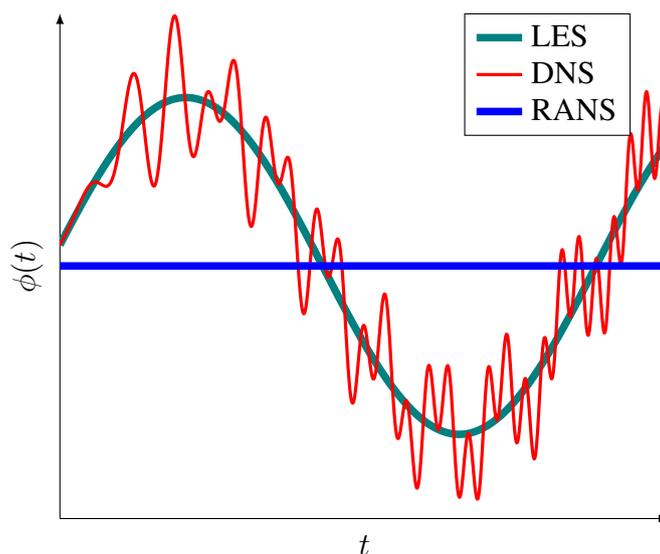


FIGURE 2.3 – Illustration du fonctionnement des approches RANS, LES et DNS : résolution temporelle d'une variable  $\phi(t)$ .

phénomènes d'atomisation ou de combustion augmente d'autant plus ces coûts CPU. Les ressources informatiques actuelles ne permettent pas encore son utilisation dans des configurations industrielles ; elle reste cantonnée à des configurations académiques de petites tailles.

**Le RANS**, *Reynolds Average Navier-Stokes Simulation*, à l'inverse de la DNS, vient modéliser toutes les échelles de la turbulence. Un opérateur de moyenne statistique est appliqué aux équations bilans, ne permettant d'accéder qu'à l'écoulement moyen. Sur la figure (2.3), l'intégralité du spectre est modélisée et les fluctuations sont inexistantes. Bien que n'apportant qu'une information partielle sur l'écoulement, cette approche est celle qui est privilégiée dans le secteur industriel du fait que les maillages utilisés sont légers et que les temps de restitution des calculs sont courts.

**La LES**, *Large-Eddy Simulation* ou Simulation aux Grandes Échelles, est à mi-chemin entre les deux premières méthodes puisqu'elle permet de résoudre les grandes structures de l'écoulement et de modéliser les plus petites. Cette séparation d'échelles s'opère à l'aide d'un filtre. Il en résulte que certains termes des équations bilans doivent être fermés et il convient de les modéliser avec l'information des grandes structures explicitement résolues. La figure (2.3) indique que la zone de coupure se situe dans la zone inertielle du spectre et que la simulation donne cette fois une information instationnaire de l'écoulement. L'approche LES, bien moins coûteuse que la DNS, commence à se répandre dans le secteur industriel et tend à compléter de plus en plus le RANS.

La figure. (2.4) permet de visualiser les différences entre les trois méthodes numériques précédemment décrites. Alors que la DNS délivre une information complète et précise de l'écoulement, le RANS moyenne les fluctuations du jet turbulent. La LES apparaît être un bon compromis entre temps de calcul et précision.

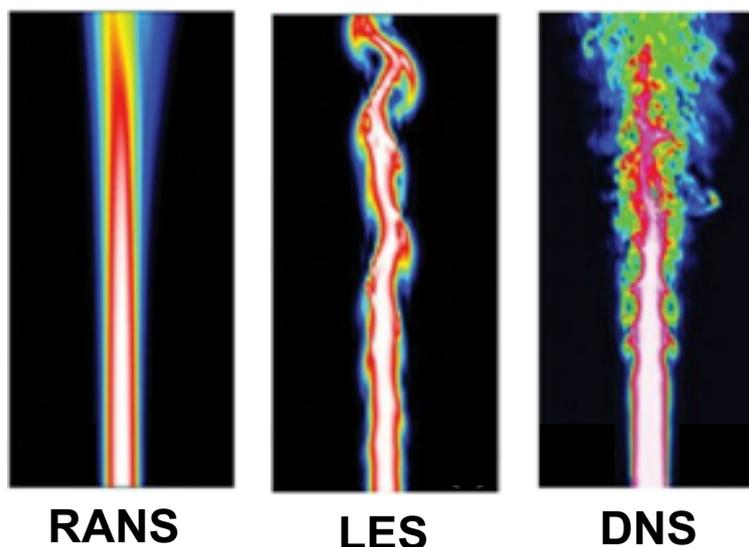


FIGURE 2.4 – Comparaison des méthodes numérique RANS, LES et DNS sur une simulation d'un jet turbulent. Image issue de [140].

### 2.3.4 Équations bilans étendues à la simulation aux grandes échelles

L'approche LES sépare les échelles résolues et les échelles modélisées en filtrant les différentes quantités des équations de *Navier-Stokes*. L'opération de filtrage spatial, notée  $\overline{(\cdot)}$ , est définie mathématiquement comme un produit de convolution dans l'espace physique de la variable à filtrer par un opérateur de filtrage  $\mathcal{G}_\Delta$  de largeur  $\Delta$  [195]. Un scalaire  $\phi(\mathbf{x}, t)$  filtré devient :

$$\overline{\phi}(\mathbf{x}, t) = \int_{\mathbb{R}^3} \phi(\mathbf{y}, t) \mathcal{G}_\Delta(\mathbf{y} - \mathbf{x}) \, d\mathbf{y} \quad (2.58)$$

Le filtre doit respecter les conditions de normalisation et de commutativité spatiale et temporelle :

$$\int_{\mathbb{R}^3} \mathcal{G}_\Delta(\mathbf{x}) \, d\mathbf{x} = 1 \quad (2.59)$$

$$\frac{\partial \overline{\phi}}{\partial t} = \overline{\frac{\partial \phi}{\partial t}} \quad \text{et} \quad \frac{\partial \overline{\phi}}{\partial x_i} = \overline{\frac{\partial \phi}{\partial x_i}} \quad (2.60)$$

Le scalaire  $\phi$  peut se réécrire comme la somme de sa partie filtrée  $\bar{\phi}$ , évoluant aux échelles supérieures à  $\Delta$ , et d'une deuxième partie qui constitue les fluctuations de sous-maille  $\phi'$ , évoluant aux échelles inférieures à  $\Delta$  :

$$\phi(\mathbf{x}, t) = \bar{\phi}(\mathbf{x}, t) + \phi'(\mathbf{x}, t) \quad (2.61)$$

Lorsque la masse volumique  $\rho$  intervient dans les quantités à filtrer, il est d'usage d'utiliser le filtrage de *Favre* qui permet de pondérer la quantité par la masse volumique :

$$\tilde{\phi} = \frac{\overline{\rho\phi}}{\bar{\rho}} \quad (2.62)$$

L'opérateur de filtrage est appliqué aux équations de l'aérothermochimie initiales (2.37), (2.26), (2.27) et (2.39).

### Conservation de la masse filtrée

$$\frac{\partial \bar{\rho}}{\partial t} + \frac{\partial \bar{\rho} \tilde{u}_i}{\partial x_i} = 0 \quad (2.63)$$

### Conservation de la quantité de mouvement filtrée

Le produit filtré des vitesses  $\overline{u_i u_j}$  n'est pas égal au produit des vitesses filtrées  $\tilde{u}_i \tilde{u}_j$ . De ce fait, l'ajout puis la soustraction du terme  $\tilde{u}_i \tilde{u}_j$  permet d'écrire :

$$\frac{\partial \bar{\rho} \tilde{u}_j}{\partial t} + \frac{\partial \bar{\rho} \tilde{u}_i \tilde{u}_j}{\partial x_i} = - \frac{\partial}{\partial x_i} \underbrace{[\bar{\rho} (u_i \tilde{u}_j - \tilde{u}_i \tilde{u}_j)]}_{(1)} - \frac{\partial \bar{P}}{\partial x_j} + \frac{\partial \bar{\tau}_{ij}}{\partial x_i} + \bar{\rho} \tilde{f}_i \quad (2.64)$$

### Conservation des espèces chimiques filtrées

$$\frac{\partial \bar{\rho} \tilde{Y}_k}{\partial t} + \frac{\partial \bar{\rho} \tilde{u}_i \tilde{Y}_k}{\partial x_i} = - \frac{\partial}{\partial x_i} \underbrace{[\bar{\rho} (u_i \tilde{Y}_k - \tilde{u}_i \tilde{Y}_k)]}_{(2)} - \frac{\partial}{\partial x_i} \underbrace{(-\bar{\rho} \mathcal{V}_{k,i} \tilde{Y}_k)}_{(3)} + \underbrace{\bar{\omega}_k}_{(4)} \quad (2.65)$$

Conservation de l'enthalpie sensible filtrée

$$\frac{\partial \bar{\rho} \widetilde{h}_s}{\partial t} + \frac{\partial \bar{\rho} \widetilde{u}_i \widetilde{h}_s}{\partial x_i} = \frac{D\bar{P}}{Dt} - \frac{\partial}{\partial x_i} \underbrace{\left[ \bar{\rho} (\widetilde{u}_i \widetilde{h}_s - \widetilde{u}_i \widetilde{h}_s) \right]}_{(5)} + \frac{\partial}{\partial x_i} \left( \underbrace{\lambda \frac{\partial T}{\partial x_i}}_{(6)} + \underbrace{\rho \sum_{k=1}^{N_{sp}} \mathcal{V}_{k,i} Y_k h_{s,k}}_{(7)} \right) + \underbrace{\bar{\omega}_T}_{(8)} \quad (2.66)$$

Les termes (1) à (8) des équations de conservation filtrées font intervenir des échanges entre échelles résolues et filtrées et doivent être modélisés :

**Le tenseur des contraintes de sous-maille** (1)  $\tau_{ij}^{SGS} = \bar{\rho} (\widetilde{u}_i \widetilde{u}_j - \widetilde{u}_i \widetilde{u}_j)$  nécessite l'utilisation d'un modèle de turbulence pour reproduire l'effet des petites structures non résolues sur les grandes résolues. Détaillée dans la section suivante, l'approche de *Boussinesq* [19] est adoptée et permet d'écrire le flux turbulent de la même manière que le flux laminaire (Eq. 2.23) en remplaçant la viscosité laminaire par une viscosité turbulente  $\mu_t = \bar{\rho} \nu_t$  :

$$\tau_{ij}^{SGS} = 2\mu_t \widetilde{S}_{ij}^d \quad (2.67)$$

Le modèle de *Smagorinsky* est choisi pour cette étude et est discuté en section (2.3.4.1).

**Les flux turbulents de sous-maille d'espèces** (2)  $\mathcal{F}_{k,i}^{SGS} = \bar{\rho} (\widetilde{u}_i \widetilde{Y}_k - \widetilde{u}_i \widetilde{Y}_k)$  et **d'enthalpie** (5)  $\mathcal{Q}_i^{SGS} = \bar{\rho} (\widetilde{u}_i \widetilde{h}_s - \widetilde{u}_i \widetilde{h}_s)$  sont modélisés par analogie avec l'approximation de *Boussinesq* sur la quantité de mouvement [146]. Les propriétés de transport turbulent sont utilisées : viscosité turbulente  $\nu_t$ , conductivité thermique turbulente  $\lambda_t$ , *Schmidt* turbulent  $Sc_{k,t}$  de l'espèce  $k$  et *Prandtl* turbulent  $Pr_t$ . En fonction du type de modèle de transport choisi, deux jeux d'équations existent :

- En prenant en compte la diffusion différentielle entre les espèces :

$$\mathcal{F}_{k,i}^{SGS} = \frac{\nu_t}{Sc_{k,t}} \frac{\partial \widetilde{Y}_k}{\partial x_i} - \bar{\rho} \widetilde{V}_{i,c}^t \widetilde{Y}_k \quad (2.68)$$

$$Q_i^{SGS} = -\lambda_t \frac{\partial \tilde{T}}{\partial x_i} + \sum_{k=1}^{N_{sp}} \mathcal{F}_{k,i}^{SGS} \tilde{h}_{s,k} \quad (2.69)$$

où  $\tilde{V}_{i,c}^t$  est la vitesse de correction turbulente filtrée :

$$\tilde{V}_{i,c}^t = \sum_{k=1}^{N_{sp}} \frac{\nu_t}{Sc_{k,t}} \frac{\partial \tilde{Y}_k}{\partial x_i} \quad (2.70)$$

- Si le nombre de *Schmidt* turbulent est identique et constant pour toutes les espèces et égale à  $Pr_t$  :

$$\mathcal{F}_{k,i}^{SGS} = \frac{\nu_t}{Sc_t} \frac{\partial \tilde{Y}_k}{\partial x_i} \quad (2.71)$$

$$Q_i^{SGS} = -\frac{\mu_t}{Pr_t} \frac{\partial \tilde{h}_s}{\partial x_i} \quad (2.72)$$

**Les flux diffusifs laminaires filtrés d'espèces (3) et d'enthalpie (6) et (7) s'écrivent :**

- dans le cas d'un transport complexe :

$$\overline{\rho \mathcal{V}_{k,i} Y_k} = \bar{\rho} \left( D_k \frac{\partial \tilde{Y}_k}{\partial x_i} - \tilde{Y}_k \tilde{V}_{i,c} \right) \quad (2.73)$$

$$\overline{\rho \sum_{k=1}^{N_{sp}} \mathcal{V}_{k,i} Y_k h_{s,k}} = \sum_{k=1}^{N_{sp}} \overline{\rho \mathcal{V}_{k,i} \tilde{Y}_k \tilde{h}_{s,k}} \quad (2.74)$$

$$\overline{\lambda \frac{\partial T}{\partial x_i}} = \lambda(\tilde{Y}_k, \tilde{T}) \frac{\partial \tilde{T}}{\partial x_i} \quad (2.75)$$

$\lambda$  et  $D_k$  sont calculés en fonction des grandeurs filtrées  $\tilde{T}$  et  $\tilde{Y}_k$ .

- dans le cas d'un transport simplifié avec nombre de *Schmidt* constant :

$$\overline{\rho \mathcal{V}_{k,i} Y_k} = \frac{\mu}{Sc} \frac{\partial \tilde{Y}_k}{\partial x_i} \quad (2.76)$$

$$\overline{\rho \sum_{k=1}^{N_{sp}} \mathcal{V}_{k,i} Y_k h_{s,k}} = \sum_{k=1}^{N_{sp}} \frac{\mu}{Sc} \frac{\partial \tilde{Y}_k}{\partial x_i} \tilde{h}_{s,k} \quad (2.77)$$

$$\overline{\lambda \frac{\partial T}{\partial x_i}} = \frac{\mu}{Pr} \frac{\partial \tilde{h}_s}{\partial x_i} \quad (2.78)$$

**La modélisation du taux de réaction des espèces chimiques** (4)  $\bar{\omega}_k$  et du **taux de dégagement de chaleur** (8)  $\bar{\omega}_T$  : l'expression du terme source filtré est une problématique clé de la LES, car il permet de considérer l'interaction entre la turbulence et la flamme. Il existe différentes techniques servant à modéliser la combustion turbulente. Elles peuvent être classées en trois catégories [226] :

- **Approches algébriques** : basée sur l'hypothèse de nombre de *Damköhler*  $Da$  très élevé. Le taux de réaction étant alors contrôlé par le mélange turbulent et il est décrit en fonction de terme de dissipation scalaire [22].
- **Approches statistique** : les modèles qui sont basées sur cette approche s'appuient sur une description statistique du mélange à l'aide d'une fonction de densité de probabilité (PDF), comme le modèle PCM-FPI [54, 227].
- **Approches géométrique** : le front de flamme est considéré comme une surface géométrique mobile dans l'espace physique. Plusieurs modèles découlent de cette approche comme le modèle G-equation [174], à densité de surface de flamme [15] ou encore le modèle de flamme épaissie [25, 163].

### 2.3.4.1 Modélisation du transport de sous-maille

Les termes (1), (2) et (5) des équations bilans filtrées nécessitent de connaître la viscosité turbulente. Il existe une multitude d'approches mais seul le modèle de *Smagorinsky* dynamique, basé sur l'approche de *Boussinesq*, a été utilisé durant cette thèse.

#### Hypothèse de *Boussinesq*

L'hypothèse de *Boussinesq* [19] repose sur une approche phénoménologique qui part du principe que les petites échelles non résolues peuvent être prises en compte par simple ajout de viscosité.

De manière analogue à l'équation de conservation de la quantité de mouvement (Eq. 2.26), le tenseur des contraintes visqueuses filtré peut s'écrire :

$$\bar{\tau}_{ij} = 2\bar{\rho}\nu\tilde{S}_{ij}^D \quad (2.79)$$

Le tenseur des contraintes résiduelles est modélisé sur le même principe en utilisant la viscosité

turbulente  $\mu_t$  :

$$\tau_{ij}^{SGS} = \bar{\rho} (\widetilde{u_i u_j} - \widetilde{u_i} \widetilde{u_j}) = 2\bar{\rho} \nu_t \widetilde{S_{ij}^D} \quad (2.80)$$

L'équation de conservation de la quantité de mouvement filtrée devient :

$$\frac{\partial \bar{\rho} \widetilde{u_j}}{\partial t} + \frac{\partial \bar{\rho} \widetilde{u_i u_j}}{\partial x_i} = -\frac{\partial \bar{P}}{\partial x_j} + \frac{\partial}{\partial x_i} (2\bar{\rho}(\nu + \nu_t) \widetilde{S_{ij}^D}) \quad (2.81)$$

Tout l'enjeu est de réussir à déterminer la valeur de la viscosité turbulente.

### **Modèle de Smagorinsky**

Il résulte du formalisme LES que les plus grandes échelles de l'écoulement sont résolues alors que les échelles de sous-maille sont modélisées. Puisque les plus petites échelles ont un comportement relativement isotrope et universel car ne dépendant pas de la géométrie, il est possible de les modéliser simplement en cherchant à reproduire leur fonction principale qui est de dissiper l'énergie cinétique turbulente. Ce type de modèle fonctionnel s'oppose aux modèles structurels qui cherchent à reproduire la structure du tenseur des contraintes de sous-maille. Le modèle classique de *Smagorinsky* [208] part du principe qu'il existe un équilibre entre production et dissipation de l'énergie cinétique au niveau de l'échelle de filtrage. La viscosité dynamique s'écrit alors :

$$\mu_t = \bar{\rho} (C_s \Delta)^2 |\widetilde{S}| \text{ avec } |\widetilde{S}| = \sqrt{2\widetilde{S_{ij}} \widetilde{S_{ij}}} \quad (2.82)$$

où  $C_s$  désigne la constante de *Smagorinsky* dont la valeur dépend de la configuration étudiée. Elle est généralement comprise entre 0.1 et 0.2. Bien que simple d'utilisation, ce modèle est connu pour être particulièrement dissipatif au niveau des parois ou dans les zones de faible turbulence.

### **Modèle de Smagorinsky dynamique**

Le principal inconvénient des modèles de tenseur de sous-maille basé sur l'hypothèse de *Boussinesq* est qu'ils ne peuvent pas représenter correctement différentes configurations turbulentes, tels que le cisaillement ou les régimes situés près du *Reynolds* critique, avec une unique constante. C'est dans ce contexte que *Germano* [80] et *Lilly* [127] proposent d'améliorer le modèle classique de *Smagorinsky* en venant calculer de façon locale et dynamique

la constante  $C_s$  à partir de la connaissance des informations résolues. De ce fait, un nouvel opérateur, noté  $\hat{\tau}$ , est introduit et le champ de vitesse résolu est filtré à une taille de filtre  $\Delta'$  supérieure à  $\Delta$ . À partir du modèle de *Smagorinsky*, le tenseur des contraintes de sous-maille  $\tau_{ij}^{SGS} = \bar{\rho} (\widetilde{u_i u_j} - \tilde{u}_i \tilde{u}_j) = 2\mu_t \tilde{S}_{ij}^D$  et le tenseur de sous-maille basé sur la vitesse filtrée deux fois  $\tau_{ij}^{SGS'} = \bar{\rho} (\widehat{u_i u_j} - \widehat{\tilde{u}_i \tilde{u}_j}) = 2\mu_t \widehat{S}_{ij}^D$  peuvent également s'écrire :

$$\tau_{ij}^{SGS} = 2\bar{\rho}(C_s\Delta)^2|\tilde{S}|.\tilde{S}_{ij} \quad (2.83)$$

$$\tau_{ij}^{SGS'} = 2\bar{\rho}(C_s\Delta')^2|\widehat{S}|.\widehat{S}_{ij} \quad (2.84)$$

L'identité de *Germano* permet de relier les tenseurs aux deux niveaux de filtrage par un terme qui dépend du champ résolu et qui peut être calculé explicitement :

$$L_{ij} = \widehat{\tau}_{ij}^{SGS} - \tau_{ij}^{SGS} = \bar{\rho} (\widehat{\tilde{u}_i \tilde{u}_j} - \widetilde{u_i u_j}) \quad (2.85)$$

En combinant les Eq. (2.83), (2.84) et (2.85), la constante de *Smagorinsky* peut être calculée à partir des deux champs de vitesse filtrés grâce à l'expression :

$$L_{ij}.\tilde{S}_{ij} = -2\bar{\rho}C_s^2 \left( \Delta^2|\tilde{S}|.\tilde{S}_{ij}\tilde{S}_{ij} - \Delta'^2|\widehat{S}|.\widehat{S}_{ij}\tilde{S}_{ij} \right) \quad (2.86)$$

Le modèle de *Smagorinsky* dynamique convient pour une large gamme d'applications mais il est coûteux et complexe à mettre en œuvre car il requiert l'utilisation d'un opérateur de filtrage explicite. En outre, le calcul de la constante  $C_s^2$  locale peut mener à des valeurs négatives, ce qui implique une valeur négative de la viscosité turbulente. Ceci correspond à un transfert d'énergie des plus petites échelles vers les grandes structures. Ce phénomène, appelé *backscatter* [27], nécessite un traitement spécifique afin d'éviter des problèmes de stabilité numérique.

## 2.4 Modélisation de la combustion

Les équations de conservation des espèces (2.27) et de l'enthalpie sensible (2.39) font intervenir des termes sources chimiques  $\dot{\omega}_k$  et thermiques  $\dot{\omega}_T$  qui sont reliés par l'expression de l'équation (2.41). Une modélisation fidèle de la chimie nécessite une évaluation précise et rigoureuse des termes sources.

La réalité du processus chimique est complexe et il fait intervenir des centaines de réactions  $N_r$ , entraînant ainsi un grand nombre d'espèces  $N_{sp}$ . Des schémas cinétiques existent pour décrire l'enchaînement de ces étapes élémentaires et les vitesses associées à ces réactions [117, 178, 236].

## 2.4.1 Cinétique chimique

### 2.4.1.1 Mécanismes réactionnels

Si l'on considère un système chimique de  $N_{sp}$  espèces intervenant dans  $N_r$  réactions. Ce système peut être décrit avec la relation suivante :

$$\sum_{k=1}^{N_{sp}} \nu'_{kj} M_k \rightleftharpoons \sum_{k=1}^{N_{sp}} \nu''_{kj} M_k \quad \text{avec} \quad j = 1, \dots, M \quad (2.87)$$

où  $\nu'_{kj}$  et  $\nu''_{kj}$  représentent les coefficients stœchiométriques de l'espèce  $k$  dans la réaction  $j$  et  $M_k$  le symbole chimique de cette espèce.

Le terme source chimique  $\dot{\omega}_k$  de l'espèce  $k$  est la somme des taux de réactions  $\dot{\omega}_{kj}$  de l'espèce  $k$  produits par les  $M$  réactions :

$$\dot{\omega}_k = \sum_{j=1}^M \dot{\omega}_{kj} = W_k \sum_{j=1}^M \nu_{kj} Q_j \quad (2.88)$$

avec  $\nu_{kj}$  le coefficient net de la réaction tel que :

$$\nu_{kj} = \nu''_{kj} - \nu'_{kj} \quad (2.89)$$

et  $Q_j$  est le taux d'avancement de la réaction  $j$  et s'écrit :

$$Q_j = k_{fj} \prod_{k=1}^{N_{sp}} \left( \rho \frac{Y_k}{W_k} \right)^{\nu'_{kj}} - k_{bj} \prod_{k=1}^{N_{sp}} \left( \rho \frac{Y_k}{W_k} \right)^{\nu''_{kj}} \quad (2.90)$$

où le premier terme à droite décrit la vitesse de réaction directe ( $f$  pour *forward*) et le second terme la vitesse de la réaction indirecte ou inverse ( $b$  pour *backward*).  $k_{fj}$  et  $k_{bj}$  sont donc les coefficients de vitesse des réactions direct et indirect. Ils doivent être déterminés expérimentalement pour chaque réaction chimique particulière. Comme les coefficients de vitesse de la

plupart des réactions dépendent fortement de la température, ils sont habituellement représentés par une formulation d'Arrhenius de la forme :

$$k_{fj} = A_j T^{\beta_j} \exp\left(-\frac{E_{aj}}{RT}\right) \quad (2.91)$$

La constante  $A_j$  est la constante pré-exponentielle,  $\beta_j$  ainsi que l'énergie d'activation  $E_{aj}$  sont disponibles pour de nombreuses réactions chimiques dans des tableaux détaillés (voir [232]).

Il suffit de connaître l'un des deux coefficients  $k_{bj}$  ou  $k_{eq,j}$  pour déterminer l'autre à partir de l'expression suivante :

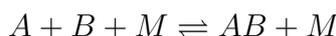
$$k_{eq,j} = \frac{k_{fj}}{k_{bj}} \quad (2.92)$$

avec  $k_{eq,j}$  est la constante d'équilibre définie grâce à la relation :

$$k_{eq,j}(T) = \left(\frac{P_0}{RT}\right)^{\sum_{k=1}^{N_{sp}} \nu_{kj}} \exp\left(\frac{\Delta S_j^0}{R} - \frac{\Delta H_j^0}{RT}\right) \quad (2.93)$$

où  $\Delta S_j^0$  et  $\Delta H_j^0$  sont respectivement les variations d'entropie et d'enthalpie au cours de la réaction  $j$  et  $P_0$  la pression de référence.

Il existe des réactions qui font intervenir un troisième corps et en général, il s'agit de réactions de recombinaison de type  $A + B \rightleftharpoons AB^*$  et  $AB^* + M \rightleftharpoons AB + M$ . La réaction globale s'écrit :



où  $M$  est appelé le partenaire de collision. Il intervient dans le processus de stabilisation de l'espèce transitionnelle ( $AB^*$ ) en récupérant son excès d'énergie.

Lorsqu'un troisième corps est nécessaire dans une réaction, les équations de taux d'avancement s'écrivent :

$$Q_j = \left(\sum_{k=1}^N \alpha_{kj} \frac{\rho Y_k}{W_k}\right) \cdot \left(k_{fj} \prod_{k=1}^N \left(\frac{\rho Y_k}{W_k}\right)^{\nu'_{kj}} - k_{bj} \prod_{k=1}^N \left(\frac{\rho Y_k}{W_k}\right)^{\nu''_{kj}}\right) \quad (2.94)$$

Les coefficients  $\alpha_{kj}$  sont utilisés pour spécifier l'efficacité de collision associée à la  $j^{ieme}$  réaction de la  $k^{ieme}$  espèce.

Calculer le taux d'avancement  $Q_j$  pour chaque réaction  $j$  revient à fournir les informations sur la constante pré-exponentielle  $A_j$ , l'exposant de température  $\beta_j$  et l'énergie d'activation  $E_{aj} = RT_{aj}$  (ou la température d'activation  $T_{aj}$  équivalente). Cela constitue une base de données appelée un schéma cinétique chimique.

### 2.4.1.2 Réduction des schémas cinétiques

Si la combustion peut être définie comme un phénomène d'oxydation de molécules simples, il s'agit en réalité d'un processus bien plus complexe. Pour une description fidèle de la combustion du méthane par exemple, nous avons besoin de transporter plus de 53 espèces et 325 réactions, l'ensemble est décrit par un mécanisme détaillé GRI-Mech 3.0 [209]. Avec une structure de molécule plus longue et plus complexe, les mécanismes de réaction des hydrocarbures deviennent également plus lourds. Le mécanisme de réaction complexe du n-heptane de *Curran et al.* [45] est donc composé de 2539 réactions entre 561 espèces. Ces mécanismes réactionnels complets et complexes sont prévus pour une utilisation avec une précision sur une large plage de pression, de température et de richesse. Cela implique une résolution sur des maillages très fins afin de traiter correctement l'ensemble des espèces intermédiaires et radicalaires. Par conséquent, les ressources informatiques qui sont allouées aux calculs utilisant ces mécanismes sont importantes et le temps de calcul est très élevé en raison de la raideur du système différentiel, qui nécessite des solutions explicites et des pas de temps très faibles comparés au pas de temps convectif qui caractérise l'écoulement. La disparité de ces temps caractéristiques liés au processus de combustion, rend nécessaire le recours à des méthodes implicites pour la résolution de ces équations de la cinétique chimique afin de s'affranchir de cette limitation. Le concept de l'une de ces méthodes est abordé en section (2.5.1.2).

Dans les problèmes multidimensionnels complexes, il faut résoudre, en plus des termes sources chimiques, des équations de transport pour chaque espèce du système. Des mécanismes complexes ne devraient donc être utilisés en règle générale que pour des problèmes très détaillés. Les performances des systèmes informatiques modernes sont certainement suffisantes pour résoudre de tels modèles dans des conditions homogènes, mais lors de la simulation 3D de configurations industrielles l'utilisation d'une cinétique chimique simplifiée peut être nécessaire dans la plupart des études de combustion.

Réduire un schéma détaillé consiste à conserver que les espèces et les réactions importantes

qui entrent dans le processus de combustion. Le schéma final réduit doit être validé sur une ou plusieurs propriétés telles que le délai d'auto-inflammation, la vitesse de la flamme ou encore le profil des espèces polluantes. Le choix des phénomènes à étudier conditionne la taille finale du schéma cinétique réduit.

Afin de réduire le coût de calcul lié aux schémas cinétiques complexes, des méthodes de réduction ont été développées. Parmi elles, les méthodes de type *Direct Relation Graph* (DRG) introduites par Lu [130] consistent à cartographier les dépendances entre les espèces d'un schéma cinétique complexe pour éliminer celles qui sont non primordiales pour une approximation correcte de la combustion. Cette dernière méthode est améliorée par Pepiot [169] pour donner *Direct Relation Graph with Error Propagation* (DRGEP). Elle prend en considération l'erreur introduite en enlevant des groupes d'espèces dans le schéma complexe initial.

Une autre méthode dite *lumping* consiste à réduire un schéma complexe en groupant plusieurs molécules présentant des comportements identiques en une seule espèce. Cela implique une réduction assez importante du nombre d'espèces.

L'Approximation des États Quasi-Stationnaires (AEQS) ou encore l'Approximation des Équilibres Partiels (AEP) consiste à négliger les phénomènes ayant une durée de vie très courte [171, 173]. Pour de plus amples informations sur les méthodes de réduction des schémas cinétiques complexes le lecteur est invité à consulter [69, 99, 132, 170].

Les schémas qui résultent de ces méthodes peuvent être classés de la manière suivante :

- Les schémas détaillés sont du même type que les schémas complexes initiaux, mais avec seulement plusieurs dizaines d'espèces et plusieurs centaines de réactions.
- Les schémas réduits possèdent une dizaine d'espèces et plusieurs dizaines de réactions. On peut distinguer deux sous-catégories :
  - Les schémas squelettiques avec lesquels toutes les espèces sont transportées et leur taux de réaction calculé à l'aide de la loi d'Arrhenius.
  - Les schémas analytiques avec lesquels certaines espèces sont calculées comme une relation algébrique d'autres espèces, déterminés à l'aide de méthodes AEQS.
- Les schémas globaux contiennent moins d'une dizaine d'espèces et quelques réactions.

Les paramètres des réactions sont ajustés pour récupérer certaines propriétés de flamme sur une gamme de paramètres précis.

Plus un schéma est réduit, moins il coûte cher à utiliser mais plus sa plage d'utilisation est réduite. Il convient de la vérifier avant de s'en servir.

Il existe également une approche de chimie tabulée [84, 133], où un nombre réduit de paramètres est stocké dans une bibliothèque. Elle se décline sous plusieurs méthodes. Comme nous ne utilisons pas cette approche pour modéliser la cinétique chimique dans le cadre des travaux de cette thèse, nous limitons à citer certaines d'entre elles sans les décrire. Parmi ces méthodes de chimie tabulée on peut citer : *Intrinsic Low Dimensional Manifold* (ILDM) [84], *In situ adaptive tabulation* (ISAT) [179, 240], *Flamelet Generated Manifold* (FGM) [160] et la méthode *Flame prolongation of ILDM* (FPI) [84].

Pour mener les travaux de cette thèse seulement la chimie de type *Arrhenius* est utilisée :

- Une chimie détaillée pour l'étude de la flamme sphérique, associée avec le modèle de transport de type *Mixture averaged* de *Hirschfelder & Curtiss*.
- Une chimie analytique est choisie pour les simulations de la flamme diphasique n-Heptane/air avec un modèle de transport simplifié.

### 2.4.2 Régimes de combustion

Les flammes générées par la combustion du mélange gazeux sont généralement divisées en deux catégories indépendantes. Il s'agit des flammes de prémélange et des flammes de diffusion appelée également flammes non prémélangées. Ces deux catégories constituent les deux régimes archétypes de flammes les plus simples. Entre ces deux régimes, on trouve d'autres régimes intermédiaires tels que les flammes partiellement prémélangées, ou encore le régime de combustion stratifiée.

Cette section présente les deux configurations de flammes, prémélangée et de diffusion ainsi que leurs propriétés.

### 2.4.2.1 La flamme prémélangée

La figure (2.5) présente une flamme de prémélange mono-dimensionnelle. Le combustible et l'oxydant (les réactifs) sont déjà mélangés avant d'entrer dans la zone de réaction. Le front de flamme est l'épaisseur de fluide dans laquelle les réactions chimiques se produisent. Il sépare les gaz frais des gaz brûlés. Les gaz frais contiennent les réactifs nécessaires à la combustion, ils sont notés par la lettre  $u$  pour *unburnt*. Les gaz brûlés comportent les produits de la combustion, leurs grandeurs physiques sont indexées par la lettre  $b$  pour *burnt*. Les indices  $F$  et  $O$  se rapportent respectivement au carburant et à l'oxydant du mélange.

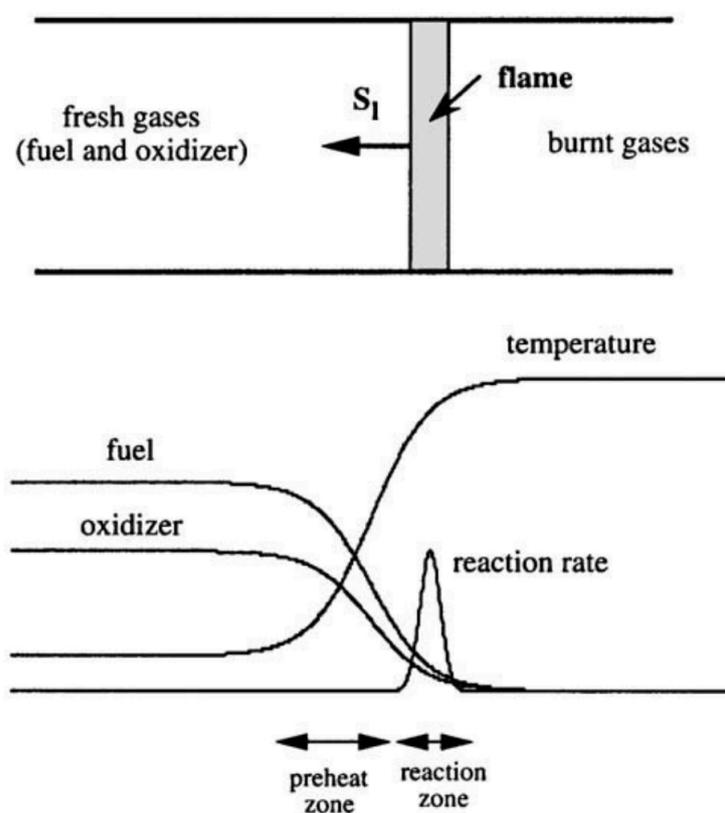


FIGURE 2.5 – Schéma d'une flamme de prémélange stationnaire mono-dimensionnelle [178].

Des variables permettant de caractériser une flamme sont introduites ci-dessous.

- La richesse  $\phi$  décrit la quantité du carburant présente dans le mélange par rapport à la quantité du carburant nécessaire à une combustion stœchiométrique. Lorsque elle est égale à l'unité, on dit que le mélange est à la richesse stœchiométrique, c'est-à-dire que les fractions massiques du carburant et du comburant sont en quantité nécessaire pour une

combustion complète du mélange. Si la richesse est supérieure à l'unité, le fuel est en excès et une partie sera présente en fin de combustion. Ce mélange est qualifié de mélange riche. Si la richesse est inférieure à un, le mélange est qualifié de pauvre. En fin de combustion, c'est une partie de l'oxydant qui restera. La richesse est donnée par l'expression suivante :

$$\phi = s \frac{Y_{F,u}}{Y_{O,u}} \quad (2.95)$$

avec  $s$  est le coefficient stœchiométrique déduit de la réaction globale de la combustion.  $\nu_F Y_F + \nu_O Y_O \rightarrow \nu_P \text{ Produits}$  avec  $\nu_F, \nu_O, \nu_P$  les coefficients molaires stœchiométriques de la réaction.

$$s = \frac{\nu_O W_O}{\nu_f W_F} \quad (2.96)$$

- La variable d'avancement, comme son nom l'indique, caractérise l'avancement de la réaction. Elle est exprimée selon plusieurs définitions. Dans la première partie de ce travail la définition donnée par l'équation (2.97) pour la combustion d'espèces carbonées est utilisée.

$$Y_C = Y_{H_2O} + Y_{CO_2} + Y_{CO} \quad (2.97)$$

- L'épaisseur de la flamme est définie à partir du gradient de température ou bien du gradient des fractions massiques. Pour de nombreux problèmes de combustion, l'estimation de cette variable est primordiale avant le calcul numérique. Cette épaisseur contrôle la résolution du maillage requise : dans la plupart des approches de combustion, la structure de la flamme doit être résolue et suffisamment de points doivent être localisés dans l'épaisseur de la flamme [178]. Ci-dessous, la définition basée sur le gradient de température est donnée :

$$\delta_{th}^0 = \frac{T_b - T_u}{\max\left(\left|\frac{\partial T}{\partial x}\right|\right)} \quad (2.98)$$

Avec  $T_u, T_b$  les températures de début et de fin de combustion, illustrées sur la figure (2.6).

- La vitesse de flamme laminaire est une propriété essentielle pour caractériser les flammes prémélangée. Elle désigne la vitesse de déplacement de l'interface entre les gaz frais et les gaz brûlés. Plusieurs expressions mathématiques viennent définir cette propriété de la flamme laminaire. Dans un cas mono-dimensionnel pour des flammes laminares non étirées en propagation libre, elle est notée  $S_L^0$ . La vitesse de flamme sera étudiée en détail dans le chapitre (3) et un formalisme de la vitesse de consommation dans une configuration de flamme sphérique en expansion sera développé.

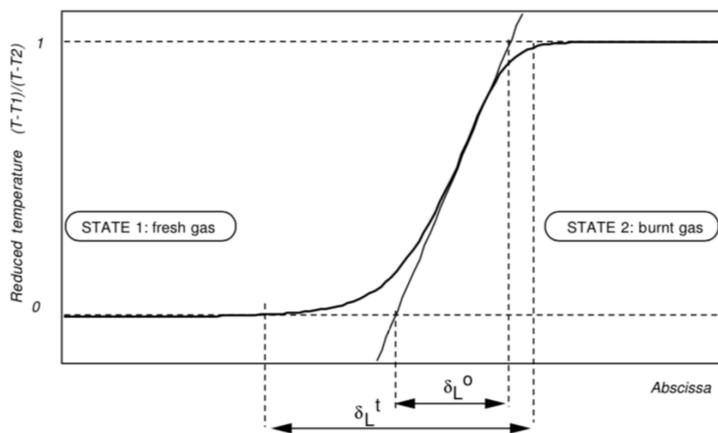


FIGURE 2.6 – Définition de l'épaisseur de flamme de prémélange [178].

## 2.4.2.2 La flamme de diffusion

Dans de nombreux processus de combustion, le combustible et l'oxydant sont séparés avant d'être injectés dans la zone de réaction où ils se mélangent et brûlent. Les flammes générées sont alors appelées flammes non prémélangées ou flammes de diffusion, car le transport du combustible et de l'oxydant dans la zone de réaction se fait principalement par diffusion en même temps que la combustion. Dans les flammes de diffusion, dont la structure est illustrée dans le schéma de la figure (2.7), le processus de diffusion est le principal moteur de mélange des réactifs dans la zone de flamme [118]. La vitesse de diffusion a été abordée dans la section 2.3.1 (p. 37).

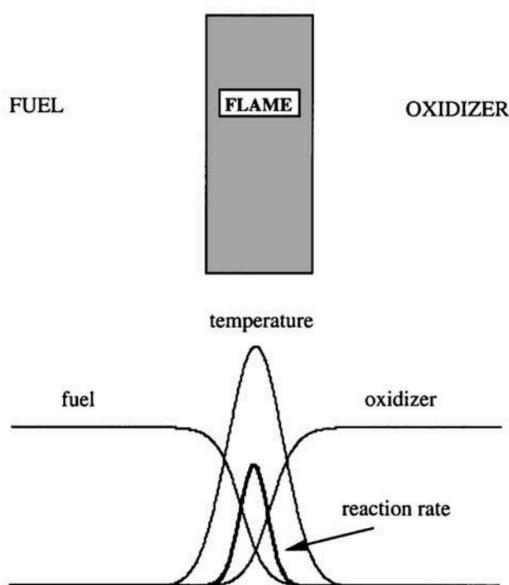


FIGURE 2.7 – Schéma d'une flamme de diffusion stationnaire mono-dimensionnelle [178].

Le processus du mélange est primordial pour définir la flamme de diffusion. Il est donc nécessaire d'introduire une variable qui définit ce mélange. Cette variable est appelée fraction de mélange et est notée  $Z$ . C'est un scalaire passif c'est-à-dire que l'équation de transport de ce scalaire ne contient pas de terme source. La fraction de mélange vaut un dans le fuel pur et zéro du côté de l'oxydant pur. Elle est définie comme :

$$Z = \frac{\phi \frac{Y_F}{Y_{F,0}} - \frac{Y_O}{Y_{O,0}} + 1}{\phi + 1} \quad (2.99)$$

avec

$$\phi = s \frac{Y_F^1}{Y_O^2} \quad (2.100)$$

et les indices 1 et 2 se réfèrent aux conditions d'injection initiales.

### 2.4.2.3 Flammes partiellement prémélangées

Les flammes partiellement prémélangées correspondent à une combustion intermédiaire des deux régimes. Le mélange des réactifs avant la flamme ne peut être que partiel selon *Peters* [172] car lié entre autres à la combustion de brouillard de gouttes, au temps de mélange ou encore à l'intensité de la turbulence. Les caractéristiques propres aux deux premiers régimes (mélange parfait ou absence totale de mélange) sont trop restrictives pour s'appliquer à la majorité des flammes rencontrées en pratique dans les laboratoires ou les installations industrielles. Pour cette raison, on définit l'indice de flamme  $FI$  (*Flame Index*) qui permet de déterminer quels régimes sont présents au sein de la zone de flamme. L'indice de flamme est similaire à l'indice de *Takeno*, proposé par *Yamashita* [239], mais variant continument 0 et 1. Il est calculé comme suit :

$$FI = \frac{1}{2} \left( 1 + \frac{\nabla Y_F \cdot \nabla Y_O}{|\nabla Y_F| |\nabla Y_O|} \right) \quad (2.101)$$

Lorsque  $FI = 0$ , on est dans une zone de flamme de diffusion, alors que quand  $FI = 1$ , la zone correspond au régime de flammes parfaitement prémélangée. Les valeurs intermédiaires indiquent la présence de flamme partiellement prémélangées.

## 2.5 Présentation de l’outil numérique YALES2

### 2.5.1 Concepts généraux du solveur

#### 2.5.1.1 Difficultés de résolution des équations bilans

La nature même de la mécanique des fluides, et notamment de la combustion turbulente, en fait un problème multi-échelles, temporelles et spatiales. Les équations bilans de l’aérothermochimie mettent en relation les phénomènes physiques de convection, diffusion et réaction. Chacun de ces phénomènes dispose de temps caractéristiques propres. Cela rend coûteuse la résolution numérique des équations bilans car celle-ci doit se faire en utilisant le pas de temps le plus faible dans un objectif de précision et de stabilité.

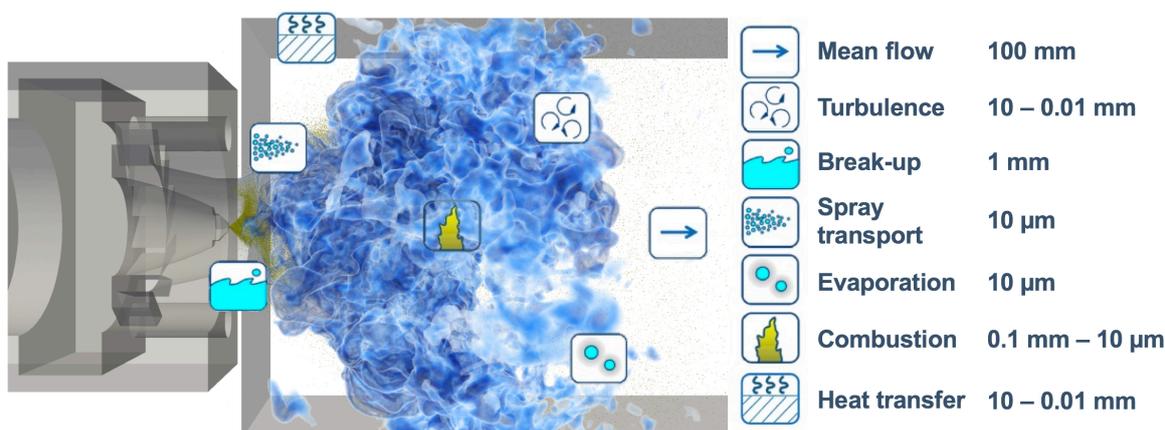


FIGURE 2.8 – Aspects multi-physiques et multi-échelles dans la chambre de combustion semi-industrielle MERCATO [18].

En plus de cette problématique de temps caractéristique, il existe une grande variété d’échelles spatiales. En simulation numérique, le domaine de calcul doit être assez grand pour être en mesure de capter les plus grandes structures. En outre, dans le cas de DNS, le maillage doit être suffisamment fin pour résoudre à la fois la structure interne de la flamme et les petites échelles turbulentes. Dans ce contexte, un nombre de Reynolds de plus en plus élevé a pour conséquence d’augmenter tellement les coûts de calcul que la simulation ne peut être exécutée en l’état.

La chimie multi-espèces et le calcul de ses termes sources  $\dot{\omega}_k$  nécessitent de nombreuses opérations mathématiques très coûteuses en temps de calcul. Plus le schéma cinétique associé à la chimie est complet, plus le calcul de ces termes sources est coûteux. En plus de la prise

en compte de la turbulence et de la combustion, certaines configurations peuvent nécessiter la résolution d'autres phénomènes physiques comme indiqué Fig. 2.8. Les écoulements diphasiques (injection de carburant liquide, dispersion de la phase liquide, atomisation, évaporation) ou l'interaction de la phase fluide avec le solide (couplage thermique fluide-solide) sont autant de mécanismes qui contribuent à rendre de plus en plus complexes les simulations réalistes.

La combustion turbulente est donc un problème multi-physiques et multi-échelles. Il convient d'adopter certaines stratégies spécifiques permettant sa résolution.

### 2.5.1.2 Stratégies adoptées et concepts généraux du solveur

YALES2 est un code de calcul qui a pour objectif la résolution DNS et LES des écoulements réactifs diphasiques fondé sur la méthode des volumes finis. Ainsi, il résout les équations de *Navier-Stokes* en une, deux ou trois dimensions. Il est capable de gérer les maillages non structurés composés de triangles, quadrilatères, tétraèdres, prismes, pyramides ou hexaèdres. Les grandeurs physiques (pression, vitesse, scalaires...), sont stockées aux nœuds du maillage. Des volumes de contrôle construits autour de chaque nœud sont utilisés pour l'intégration des équations de transport. Un exemple de volume de contrôle autour d'un nœud d'un maillage est donné sur la figure (2.9).

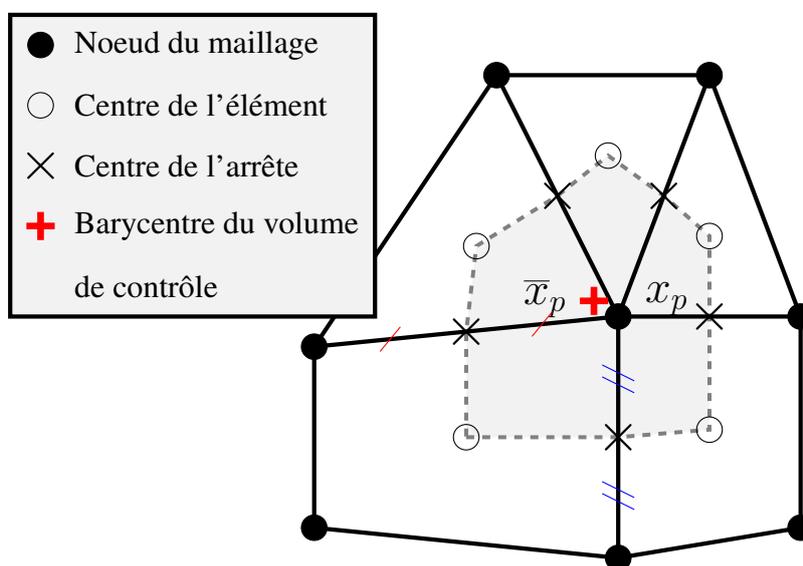


FIGURE 2.9 – Volume de contrôle basé sur un nœud du maillage dans YALES2 :  $x_p$  représente le nœud du maillage,  $\bar{x}_p$  représente le barycentre du volume de contrôle.

Le code de calcul YALES2 est développé pour être capable de réaliser des calculs massivement parallèles, utilisant les capacités des supercalculateurs. Différentes stratégies ont donc été mises en place pour relever ce défi.

### Séparation d'opérateurs

Afin de s'affranchir de la contrainte multi-échelles temporelles, le solveur YALES2 utilise la méthode de séparation d'opérateurs (*operator splitting*). Cette méthode consiste en la résolution séparée de chaque opérateur (convection, diffusion et réaction) avec son propre pas de temps caractéristique.

L'intérêt d'une telle méthode réside dans le choix du pas de temps d'une itération, pris comme le plus grand temps caractéristique entre chaque phénomène. En règle générale, il s'agit du pas de temps convectif. Les phénomènes de diffusion et de réaction réalisent plusieurs sous-étapes à l'intérieur de cette itération fluide afin de respecter leur condition de stabilité. Cependant, la séparation d'opérateur est susceptible de générer des erreurs numériques importantes, dites "erreurs de splitting". Ces erreurs sont d'autant plus importantes que les rapports de temps caractéristiques sont grands.

### Intégration raide de la chimie

Le calcul des termes sources de la chimie est un réel défi pour la simulation numérique des fluides réactifs, du fait de la multitude de temps caractéristiques non corrélés avec les échelles de temps caractéristiques du fluide. Le pas de temps chimique minimal est de l'ordre de  $10^{-9}$  s, voire de l'ordre de  $10^{-12}$  s pour une chimie hydrocarbonée, dans des conditions normales de température et de pression. Il est ainsi plusieurs ordres de grandeurs inférieur au pas de temps convectif, qui est compris entre  $10^{-5}$  s et  $10^{-7}$  s. L'utilisation d'un schéma explicite pour l'intégration des termes sources requiert obligatoirement un pas de temps de cet ordre de grandeur pour garantir la précision et la stabilité numérique. Afin de s'affranchir de cette limitation et profiter de la séparation d'opérateurs, la chimie est résolue indépendamment des autres phénomènes physiques grâce à des bibliothèques d'intégration dites *stiff*. Ces bibliothèques sont capables de résoudre des systèmes d'équations différentielles ordinaires (ODE) avec des méthodes implicites multi-pas et à pas de temps variables, dédiées à l'intégration temporelle des problèmes raides. Celle utilisée dans ces travaux se nomme CVODE [41]. Elle permet de résoudre le système chimique avec un ordre et un pas de temps variables, et un contrôle de l'erreur.

Un autre problème de performance de calcul apparaît : la quantité d'opérations mathématiques n'est pas la même d'un nœud du maillage à un autre. Globalement, la résolution est plus longue aux nœuds contenant la flamme et est beaucoup plus rapide en dehors. La différence de

temps de calcul de la chimie entre nœuds peut atteindre un rapport 10, cette valeur dépendant du schéma utilisé. Cela induit un déséquilibre de la charge de calcul entre processeurs : tous les processeurs doivent attendre que le processeur le plus lent ait fini de calculer ses termes sources avant de passer à la prochaine étape du calcul. Les performances du parallélisme sont ainsi fortement détériorées. Afin de remédier à ce problème, un algorithme de répartition de charge dédié pour la chimie, aussi appelé *scheduler* dynamique, est utilisé afin de mieux répartir la charge de calcul entre processeurs. Cette méthode est détaillée dans les travaux de *Bénard* [26].

### Double décomposition de domaine et parallélisme

L'augmentation perpétuelle des ressources de calcul encourage le développement de la CFD, car elle permet d'améliorer la fidélité des simulations en augmentant la résolution du maillage, le temps physique simulé, ou le nombre de phénomènes physiques pris en compte. Par conséquence, ces calculs doivent gérer des maillages composés de plusieurs millions voire milliards d'éléments sur des machines parallèles utilisant des milliers de processeurs. Ceci est un défi important car les outils traditionnels doivent être revus dans cet objectif. Cette problématique, partagée par d'autres domaines scientifiques, est souvent nommée "problème du *Big Data*" qui associe à la fois les problèmes d'analyse, de partage, de stockage, de transfert et de visualisation.

Pour gérer cette quantité de données en cours de calcul, la méthode la plus courante en simulation numérique des fluides est la décomposition de domaine : chaque processeur est assigné à une partie différente du domaine de calcul. L'interdépendance de ces sous-domaines est prise en compte à l'aide de communications entre les processeurs qui échangent des informations à l'interface de chaque domaine, grâce à des instructions MPI (*Message Passing Interface*). La décomposition du maillage en sous-domaines doit assurer une répartition de la charge de travail sur les processeurs la plus équilibrée possible. Dans un contexte purement eulérien, la manière la plus évidente d'y arriver consiste à découper le maillage en sous-domaines contenant la même quantité de travail. Si cette décomposition est triviale pour un maillage structuré, elle l'est beaucoup moins pour un maillage non structuré. Dans YALES2, cette opération est faite à l'aide d'une librairie externe : METIS [105] ou SCOTCH [37].

Lors des simulations diphasiques lagrangiennes, la stratégie de couplage doit être adaptée : les gouttes issues d'un spray n'étant pas réparties de manière homogène dans le domaine, la répartition proposée précédemment conduit à un déséquilibre des charges entre les processeurs.

La solution adoptée par le solveur consiste à rendre l'algorithme de décomposition également sensible à la répartition des gouttes dans le domaine, et pas seulement au nombre de cellules fluides, pour optimiser la décomposition. La bibliothèque de décomposition de maillage réalise alors un partitionnement à double contraintes.

Une particularité du code YALES2 est la double décomposition de domaine [151]. En effet, chaque sous-domaine obtenu à l'issue du premier niveau de découpage du maillage est lui-même décomposé en plusieurs groupes de cellules. Comme le montre la figure (2.10), les éléments sont découpés entre processeurs (frontière noire) puis en plus petits paquets d'éléments sur chaque processeur (frontière grise). La taille de ces groupes de cellules est telle que les données qu'ils contiennent est adaptée à la capacité de la mémoire cache des processeurs. Cette double décomposition de domaine est par ailleurs mise à profit pour optimiser les performances du solveur de Poisson. Ces groupes de cellules fournissent un maillage grossier utilisé par les solveurs linéaires bi-niveaux, tel que le PCG avec déflation [138]. Le solveur fait intervenir deux types de communications : i) des communications externes correspondant au premier niveau de décomposition et gérées par des communications MPI ; ii) des communications internes permettant les échanges entre les groupes de cellules au sein d'un même processeur, et qui ne sont pas concernées par les instructions MPI. La figure (2.11) montre le schéma de communication des données entre les groupes d'éléments, les communicateurs et les conditions aux limites.

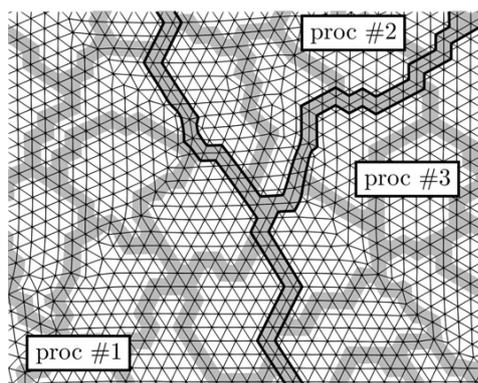


FIGURE 2.10 – Représentation de la double décomposition de domaine sur un maillage composé de triangles.

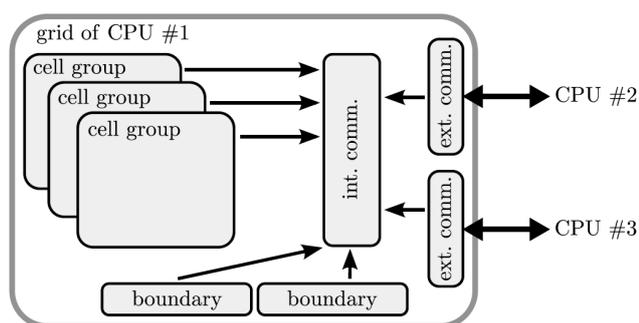


FIGURE 2.11 – Schéma de communication entre communicateurs et entre processeurs.

### Approche à faible nombre de Mach

En fonction de l'application étudiée, la masse volumique ne peut pas toujours être considérée comme constante en espace. En effet, plusieurs mécanismes sont responsables des variations de masse volumique dans l'écoulement comme les variations de pression (effet de compressibilité), les variations de température (effet de dilatation ou contraction) ou les variations de composition (mélange de fluides de masses volumiques différentes). Il convient de résoudre tout le système d'équations de l'aérothermochimie compressible de la section (2.3). Cependant, cette approche impose des pas de temps très faibles, limités par le CFL acoustique, et conduit à des temps de calcul importants.

Le nombre de *Mach* est un nombre adimensionnel défini comme le rapport de la vitesse de l'écoulement  $u$  sur celle du son  $c$  dans ce même milieu. Lorsque le nombre de *Mach* est inférieur à 0.3, le régime d'écoulement est qualifié "d'écoulement à faible nombre de *Mach*" ("*Low Mach Number*" en anglais). Il est rencontré dans de très nombreuses applications industrielles ainsi que dans les configurations étudiées lors de cette thèse. *Klainerman et Majda* [110] ont montré que l'écoulement compressible converge vers un écoulement incompressible quand le nombre de *Mach* tend vers zéro. Un nombre de *Mach* très petit devant l'unité implique une homogénéisation rapide de la pression dans le domaine. Dans ce cas, les ondes acoustiques se propagent beaucoup plus rapidement que les ondes entropiques et les fluctuations de pression ont un effet négligeable sur les propriétés thermodynamiques. La pression thermodynamique peut être considérée comme constante en espace mais peut varier en temps. En conséquence, la variation de la masse volumique  $\rho$  n'est plus soumise qu'aux effets de dilatation dus aux changements de température et au mélange de fluides de masses volumiques différentes, les effets liés aux ondes acoustiques étant négligés. On peut considérer que l'hypothèse de fluide incompressible est pertinente. Cette hypothèse permet une simplification des équations de *Navier-Stokes* et un traitement numérique différent pour leur résolution. Cette simplification autorise des pas de temps plus grands qu'en formulation compressible car on s'affranchit de la contrainte acoustique.

### Schémas numériques et solveurs

Plusieurs schémas numériques sont disponibles pour l'avancement en temps explicite. La solution retenue est un schéma proposé par *Kraushaar* [114], appelé TFV4A, qui combine les méthodes *Runge-Kutta* et *Lax-Wendroff*. L'intégration spatiale est effectuée avec un schéma

d'ordre quatre. Plus de détails sur la discrétisation spatiale dans le code sont disponibles dans la thèse de *Vantieghem* [219]. Il est possible d'introduire de la viscosité artificielle seulement s'il est nécessaire avec la formulation de *Cook & Cabot* [42].

La stabilité de l'intégration temporelle est assurée par le respect de deux critères dans le calcul du pas de temps : le CFL (*Courant Friedrichs Lewy*) basé sur la convection, le *Fourier* basé sur la diffusion si elle est explicite.

- Le **CFL**, ou nombre de Courant, assure que la distance parcourue par une onde, se propageant à la vitesse de l'écoulement  $u_i$  pendant un pas de temps numérique  $\Delta t$ , reste inférieure à la distance  $\Delta x_i$  qui sépare deux points du maillage. Le critère CFL s'écrit :

$$CFL = \frac{\mathbf{u}\Delta t}{\Delta x} \quad (2.102)$$

- Le critère de **Fourier** est l'équivalent du CFL pour la diffusion. Avec  $D$  le coefficient de diffusion, ce critère s'exprime comme :

$$Fo = \frac{D\Delta t}{\Delta x^2} \quad (2.103)$$

On peut lever la contrainte sur le critère de Fourier avec une méthode implicite.

YALES2 dispose de nombreux solveurs se proposant de résoudre différents phénomènes physiques. Les deux principaux solveurs proposent de résoudre les équations de Navier-Stokes pour les écoulements à faible nombre de *Mach* :

- Le **solveur incompressible à densité constante**, ce qui limite l'utilisation de ce solveur à des simulations isothermes non réactives.
- Le **solveur incompressible à densité variable**, qui suppose que les variations de pression, de densité et de température dues aux ondes acoustiques sont négligées. Les variations de température modifient la densité par l'intermédiaire d'une loi d'état (typiquement la loi des gaz parfaits). C'est ce solveur qui a été utilisé au cours de cette thèse.

## 2.5.2 La méthode de pas fractionnés

Dans le solveur YALES2, l'avancement en temps est basé sur la méthode de pas fractionnés proposée par *Chorin* [38], modifiée par *Kim et Moin* [109]. La vitesse est résolue à chaque pas de temps (indices  $n$ ,  $n + 1$ , etc) alors que les scalaires, la densité et la pression sont résolues sur des pas de temps décalés (indices  $n + 1/2$ ,  $n + 3/2$ , etc). Cette méthode de projection, souvent utilisée pour la simulation d'écoulements incompressibles, repose sur la décomposition d'*Helmholtz-Hodge* qui énonce qu'un champ vectoriel peut se décomposer en une partie irrotationnelle ( $\nabla \times = 0$ ) et une partie solénoïdale ( $\nabla \cdot = 0$ ). Cette décomposition, appliquée au champ de vitesse, s'écrit :

$$\mathbf{u} = \mathbf{u}^i + \mathbf{u}^s \quad (2.104)$$

où  $\mathbf{u}^s$  est la composante solénoïdale du champ de vitesse, vérifiant  $\nabla \cdot \mathbf{u}^s = 0$  et  $\mathbf{u}^i$  est la composante irrotationnelle du champ de vitesse qui vérifie  $\nabla \times \mathbf{u}^i = 0$ . La partie irrotationnelle dérive d'un potentiel scalaire et peut s'écrire  $\mathbf{u}^i = \nabla \phi$ . L'application de l'opérateur divergence à cette équation donne directement :

$$\nabla \cdot \mathbf{u} = \nabla \cdot \mathbf{u}^i = \nabla^2 \phi \quad (2.105)$$

Pour plus de clarté sur le fonctionnement du solveur incompressible à densité constante, l'équation de quantité de mouvement est résolue ci-dessous dans le cadre des écoulements incompressibles qui supposent que la densité est constante en temps et en espace. Cette équation s'écrit classiquement :

$$\frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} + \nabla \cdot (\mathbf{u}\mathbf{u}) = -\frac{1}{\rho} \nabla P + \frac{1}{\rho} \nabla \cdot \boldsymbol{\tau} \quad (2.106)$$

La décomposition permet de résoudre cette équation en deux étapes :

### 1. Étape de prédiction

Une première estimation  $\mathbf{u}^*$  de la vitesse au temps  $n + 1$  est obtenue en avançant la quantité de mouvement sans le terme de gradient de pression qui ne contribue qu'à la partie irrotationnelle du champ de vitesse :

$$\frac{\mathbf{u}^* - \mathbf{u}^n}{\Delta t} = -\nabla \cdot (\mathbf{u}^* \mathbf{u}^n) + \frac{1}{\rho} \nabla \cdot \boldsymbol{\tau}^n \quad (2.107)$$

### 2. Étape de correction

La vitesse est ensuite corrigée en réintégrant le gradient de pression :

$$\frac{\mathbf{u}^{n+1} - \mathbf{u}^*}{\Delta t} = -\frac{1}{\rho} \nabla P^{n+1/2} \quad (2.108)$$

Le calcul de  $\mathbf{u}^{n+1}$  nécessite de connaître  $P^{n+1/2}$ , qui est déterminé en résolvant l'équation de *Poisson* pour la pression obtenue en appliquant l'opérateur divergence à l'équation (2.108), et en réintégrant la contrainte de divergence nulle imposée par l'équation de continuité pour  $\mathbf{u}^{n+1}$  :

$$\nabla^2 P^{n+1/2} = \frac{\rho}{\Delta t} \nabla \cdot \mathbf{u}^* \quad (2.109)$$

En pratique, dans YALES2 l'implémentation diffère un peu de la méthode proposée par Chorin :

#### 1. Étape de prédiction

L'étape de prédiction est faite en tenant compte du terme de pression au temps  $n - 1/2$  qui est généralement assez proche de  $P^{n+1/2}$ . Ce terme conduit à une meilleure estimation de  $\mathbf{u}^*$ , ce qui permet de réduire les erreurs liées au fractionnement de l'avancement temporel.

$$\frac{\mathbf{u}^* - \mathbf{u}^n}{\Delta t} = -\nabla \cdot (\mathbf{u}^* \mathbf{u}^n) - \frac{1}{\rho} \nabla P^{n-1/2} + \frac{1}{\rho} \nabla \cdot \boldsymbol{\tau}^n \quad (2.110)$$

Lors de cette étape, l'avancement en temps explicite est pris en charge par le schéma TFV4A introduit précédemment.

#### 2. Étape de correction

L'étape de correction de la vitesse s'écrit alors :

$$\frac{\mathbf{u}^{n+1} - \mathbf{u}^*}{\Delta t} = -\frac{1}{\rho} \nabla P^{n+1/2} + \frac{1}{\rho} \nabla P^{n-1/2} \quad (2.111)$$

L'équation de Poisson permettant de calculer  $P^{n+1/2}$  devient :

$$\nabla^2 (P^{n+1/2} - P^{n-1/2}) = \frac{\rho}{\Delta t} \nabla \cdot \mathbf{u}^* \quad (2.112)$$

Cette étape est le point central de la méthode. Elle fait intervenir une équation de Poisson sur la pression. Sa résolution nécessite l'utilisation d'un solveur linéaire dont les performances sont capitales pour le calcul parallèle. C'est le propos de la section (2.5.4).

### 2.5.3 Solveur à faible nombre de *Mach* à densité variable

#### 2.5.3.1 Système d'équations résolu

*Majda et Sethian* [135] proposent d'écrire une formulation bas *Mach* à densité variable, approche intermédiaire des équations de bilan de l'aérothermochimie. À partir d'un développement asymptotique de chaque variable du système (la vitesse  $u$ , la pression  $p$ , la masse volumique  $\rho$ , l'enthalpie sensible  $h_s$ ), un nouveau jeu d'équation est obtenu pour décrire les écoulements sous l'hypothèse Low-Mach. La pression peut alors être décomposée en deux termes : la pression thermodynamique  $P_0$  supposée constante en espace et la pression dynamique  $P_2$  variable en espace et en temps. Dans un système ouvert, la pression thermodynamique du système  $P_0$  est aussi considérée constante en temps. Avec  $r$  la constante universelle des gaz, l'équation d'état s'écrit :

$$P_0 = \rho_0 r T_0 \quad (2.113)$$

En remplaçant les variables primitives par leur développement à l'ordre zéro, les équations de l'aérothermochimie sous l'approche faible nombre de *Mach* apparaissent :

- **Équation de continuité**

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial \rho u_i}{\partial x_i} = 0 \quad (2.114)$$

- **Équation de conservation de la quantité de mouvement**

$$\frac{\partial}{\partial t} \rho u_j + \frac{\partial}{\partial x_i} \rho u_i u_j = - \frac{\partial P_2}{\partial x_j} + \frac{\partial \tau_{ij}}{\partial x_i} \quad (2.115)$$

- **Équation de conservation des espèces**

$$\frac{\partial}{\partial t} \rho Y_k + \frac{\partial}{\partial x_i} \rho u_i Y_k = \frac{\partial \mathcal{F}_{k,i}}{\partial x_i} + \dot{\omega}_k \quad (2.116)$$

- **Équation de conservation de l'enthalpie sensible**

$$\frac{\partial}{\partial t} \rho h_s + \frac{\partial}{\partial x_i} \rho u_i h_s = \frac{\partial P_0}{\partial t} + \frac{\partial \mathcal{Q}_i}{\partial x_i} + \dot{\omega}_T \quad (2.117)$$

### 2.5.3.2 Méthode de résolution

La méthode décrite précédemment pour l'avancement en temps des équations incompressibles est étendue au cas à densité variable. L'avancement en temps est structuré de la manière suivante :

#### 1. Prédiction de la densité

Dans un premier temps, un prédicteur sur la densité,  $\rho^*$ , est déterminé par l'équation de conservation de la masse :

$$\frac{\rho^* - \rho^{n+1/2}}{\Delta t} = -\nabla \cdot (\rho \mathbf{u})^n \quad (2.118)$$

#### 2. Prédiction des scalaires

L'avancement des scalaires, notamment de l'enthalpie sensible  $h_s^*$  et des espèces  $Y_k^*$ , est effectué à partir du prédicteur de densité et de la quantité de mouvement disponibles à cette étape. Ces prédicteurs vont servir à calculer le prédicteur pour la température via la loi d'état. Le transport des scalaires devra donc être corrigé ou effectué à nouveau, une fois la densité et la quantité de mouvement finales déterminées. Pour un scalaire  $\phi$  quelconque, on a :

$$\frac{\rho^* \phi^* - \rho^{n+1/2} \phi^{n+1/2}}{\Delta t} = -\nabla \cdot ((\rho \mathbf{u})^n \phi^{n+1/2}) + \mathcal{D}(\phi^{n+1/2}) + \mathcal{R}(\phi^{n+1/2}) \quad (2.119)$$

où  $\mathcal{D}$  et  $\mathcal{R}$  désignent respectivement les termes de diffusion et de réaction.

#### 3a. Calcul de la température

La température  $T^*$  est déduite des scalaires prédits :

$$T^* = f(Y_k^*, h_s^*) \quad (2.120)$$

La température est déduite de l'enthalpie sensible  $h_s$  et des fractions massiques d'espèces  $Y_k$ . Cette opération est délicate car elle implique d'inverser une relation polynômiale de degré 5. YALES2 résout ce polynôme à l'aide de l'algorithme de *Newton-Raphson*, méthode itérative efficace pour trouver numériquement une approximation précise d'un zéro d'une fonction donnée.

### 3b. Correction de la densité

Ensuite, la densité est évaluée à partir des scalaires prédits et d'une loi d'état :  $\rho^{EOS} = f(P_0, T^*, Y_k^*)$ . Dans le cas d'une chimie multi-espèces et avec l'équation des gaz parfaits, on obtient :

$$\rho^{EOS} = \frac{P_0}{RT^*} \left( \sum_{k=1}^{N_{sp}} \frac{Y_k^*}{W_k} \right)^{-1} \quad (2.121)$$

La densité au temps  $n + 3/2$  est ensuite calculée à partir de la valeur prédite  $\rho^*$  et de la valeur issue de l'équation d'état  $\rho^{EOS}$  via un coefficient de relaxation  $\alpha$  :

$$\rho^{n+3/2} = \alpha \rho^{EOS} + (1 - \alpha) \rho^* \quad (2.122)$$

Quand  $\alpha = 0$ , la nouvelle densité ne prend pas en compte la loi d'état. Inversement, si  $\alpha = 1$ ,  $\rho^{n+3/2}$  ne prend pas en compte la densité prédite  $\rho^*$ . Par défaut, le coefficient de relaxation  $\alpha$  est fixé à 0.7 afin de prendre en compte les deux effets.

La densité au temps  $n + 1$  est estimée de la manière suivante :

$$\rho^{n+1} = \frac{1}{2} (\rho^{n+1/2} + \rho^{n+3/2}) \quad (2.123)$$

### 4. Prédiction de la vitesse

Une fois la densité  $\rho^{n+1}$  connue, une procédure semblable à celle du formalisme incompressible peut être mise en œuvre. La vitesse est avancée sans tenir compte de l'évolution de la pression :

$$\frac{\rho^{n+1} \mathbf{u}^* - (\rho \mathbf{u})^n}{\Delta t} = -\nabla \cdot ((\rho \mathbf{u})^n \mathbf{u}^*) - \nabla P_2^{n-1/2} + \nabla \cdot \boldsymbol{\tau}^n \quad (2.124)$$

### 5. Correction de la vitesse

Comme précédemment, la correction de la vitesse se fait en réintégrant le terme de pression :

$$\frac{(\rho \mathbf{u})^{n+1} - \rho^{n+1} \mathbf{u}^*}{\Delta t} = -\nabla (P_2^{n+1/2} - P_2^{n-1/2}) \quad (2.125)$$

L'équation de *Poisson* permettant de calculer  $P_2^{n+1/2}$  est obtenue en prenant la divergence de l'équation (2.125) et en intégrant la condition imposée par l'équation de continuité

pour  $\mathbf{u}^{n+1}$  :

$$\nabla \cdot (\rho \mathbf{u})^{n+1} = - \left( \frac{\partial \rho}{\partial t} \right)^{n+1} = - \frac{\rho^{n+3/2} - \rho^{n+1/2}}{\Delta t} \quad (2.126)$$

Dans ce cas, l'équation de *Poisson* s'écrit :

$$\nabla \cdot \left( \nabla \left( P_2^{n+1/2} - P_2^{n-1/2} \right) \right) = \frac{\rho^{n+3/2} - \rho^{n+1/2}}{\Delta t^2} + \frac{\nabla \cdot (\rho^{n+1} \mathbf{u}^*)}{\Delta t} \quad (2.127)$$

### 6. Correction des scalaires

Enfin, l'avancement des scalaires est corrigé pour tenir compte de la correction sur la vitesse. Pour un scalaire  $\phi$ , on a :

$$\frac{(\rho \phi)^{n+3/2} - (\rho \phi)^{n+1/2}}{\Delta t} = -\nabla \cdot \left( (\rho \mathbf{u})^{n+1} \phi^{n+1/2} \right) + \mathcal{D}(\phi^{n+1/2}) + \mathcal{R}(\phi^{n+1/2}) \quad (2.128)$$

### 2.5.4 Résolution de l'équation de Poisson

Les deux solveurs à faible nombre de *Mach* font intervenir une équation de Poisson sur la pression, c'est-à-dire une équation de la forme :

$$\nabla \cdot (\alpha \nabla P_2) = RHS \quad (2.129)$$

Il s'agit d'un système d'équations linéaires dont l'inconnue est le vecteur des valeurs de la pression sur les nœuds du domaine discrétisé. Sa résolution requiert de faire appel à un solveur de systèmes linéaires. La résolution de ce système peut représenter une part très importante du temps de calcul nécessaire à la simulation de chaque pas de temps. En effet, les solveurs utilisés pour cette résolution sont obligatoirement des solveurs itératifs, et le nombre d'itérations nécessaire à l'obtention d'une estimation suffisamment précise de la solution peut être élevé selon l'algorithme utilisé et les caractéristiques de la matrice de l'opérateur laplacien discret. De plus, des communications interprocesseurs sont nécessaires à chaque itération du solveur linéaire, et ces communications peuvent représenter une proportion très importante du temps total de la simulation pouvant aller jusqu'à 80 % si aucune attention particulière n'est apportée à l'implémentation de la méthode [138]. L'optimisation de la méthode de résolution de l'équation de Poisson est un point clé pour la simulation des écoulements incompressibles. Cette problématique a fait l'objet de la thèse de *Malandain* [137]. Plusieurs algorithmes sont disponibles

dans YALES2 pour inverser le système linéaire. Celui qui est retenu est le DPCG (*Deflated Preconditioned Conjugate Gradient*) [155].

## 2.6 Conclusion

Dans ce chapitre, dans un premier temps, nous avons exposé les équations de la mécanique des fluides en milieu réactif. Une attention particulière a été portée à l'expression et la modélisation des phénomènes de transport. Après avoir présenté les équations de conservation de la phase gazeuse et le phénomène de la turbulence, le formalisme LES a été appliqué aux équations bilans et les choix de modélisation de la turbulence ont été présentés. Dans un deuxième temps, la cinétique chimique et les différents régimes de combustion ont été présentés. Enfin, une présentation du code de calcul YALES2 et de ses méthodes de résolution des équations de la mécanique des fluides ont fait l'objet de la dernière section. L'approche à faible nombre de *Mach* et les différentes stratégies adoptées par le solveur permettent un gain de temps précieux pour simuler les écoulements rencontrés au cours de ces travaux de thèse.

# ÉTUDE DE LA VITESSE DE CONSOMMATION D'UNE FLAMME LAMINAIRE SPHÉRIQUE EN EXPANSION

---

## Sommaire

---

<b>3.1</b>	<b>Préambule</b>	<b>79</b>
<b>3.2</b>	<b>Introduction</b>	<b>80</b>
<b>3.3</b>	<b>La vitesse de combustion de la flamme laminaire</b>	<b>81</b>
<b>3.4</b>	<b>Formalisme de vitesse de consommation dans le cas des flammes sphériques non confinées</b>	<b>85</b>
<b>3.5</b>	<b>Formalisme de vitesse de consommation dans le cas des flammes sphériques confinées</b>	<b>89</b>
<b>3.6</b>	<b>Simulations numériques et validation</b>	<b>91</b>
3.6.1	Configuration numérique	92
3.6.2	Validation des simulations numériques	93
<b>3.7</b>	<b>Résultats et discussion</b>	<b>97</b>
<b>3.8</b>	<b>Conclusion</b>	<b>102</b>

---

## 3.1 Préambule

*Ce chapitre est en grande partie issu d'un article publié dans le journal Combustion and flame [123].*

## 3.2 Introduction

Les progrès récents des simulations numériques ont démontré la capacité des codes CFD à simuler et à prédire avec précision des processus de combustion complexes, de l'injection de carburant aux émissions polluantes. Il convient de noter que la réglementation des émissions polluantes est un paramètre clé dans la conception de systèmes de combustion tels que les moteurs d'avions, les turbines d'hélicoptères ou les brûleurs industriels. Avec l'émergence de nouveaux combustibles, les schémas cinétiques correspondants doivent être développés et validés pour de larges plages de conditions d'exploitation, exprimées en termes de rapport d'équivalence, de pression et de température. Les schémas cinétiques sont généralement validés en fonction du délai d'allumage, des profils des espèces majoritaires et/ou minoritaires et de la vitesse de combustion laminaire non étirée  $S_l^0$ .

Les objectifs de ce chapitre sont multiples. Premièrement, il vise à valider les méthodes numériques d'intégration spatiale et temporelle, présentées dans le chapitre précédent, sur des simulations 3D avec une chimie détaillée. Ces mêmes méthodes seront utilisées pour toutes les autres simulations réalisées dans le cadre de cette thèse. Parallèlement à la validation de la méthodologie, une dérivation de la vitesse moyenne de consommation de la flamme dans l'espace pour le SEF, exprimée avec n'importe quelle espèce réactif/produit, est proposée pour la configuration de la flamme sphérique à la fois dans les domaines non confinés et dans les domaines confinés. Les hypothèses formulées au cours de la dérivation sont clairement exposées et discutées. Deuxièmement, les expressions de la vitesse de consommation de flamme pour une configuration confinée seront testées en utilisant des simulations numériques directes (DNS) 3D précises avec des schémas cinétiques détaillés pour différentes flammes de méthane/air (pauvre, riche et stœchiométrique) et une flamme iso-octane/air stœchiométrique. Le cas de la flamme iso-octane/air est important car l'iso-octane est plus lourd que le méthane et son nombre de *Lewis* est supérieur à l'unité. La validation des résultats numériques par rapport aux données expérimentales démontrera la capacité de ces outils DNS à simuler des conditions expérimentales réalistes tout en utilisant des schémas cinétiques détaillés qui contiennent de nombreux temps caractéristiques. Finalement, la capacité de ces formulations à accéder à la vitesse de consommation et leur sensibilité à la vitesse d'étirement à la flamme seront étudiées.

### 3.3 La vitesse de combustion de la flamme laminaire

La vitesse de combustion laminaire  $S_l^0$  est une propriété fondamentale de la flamme qui dépend du mélange carburant/comburant et de ses conditions thermodynamiques initiales : pression, température et rapport d'équivalence. Elle représente la vitesse à laquelle les gaz frais sont consommés par le front de flamme en considérant une flamme prémélangée plane de propagation 1D non étirée. En intégrant l'équation de transport de la fraction massique du combustible sur le domaine de la flamme, on peut facilement dériver l'expression de la vitesse de combustion laminaire pour les flammes planes 1D [178] comme :

$$S_l^0 = \frac{1}{\rho_u (Y_{f,b} - Y_{f,u})} \int_{-\infty}^{+\infty} \dot{\omega}_f dx \quad (3.1)$$

avec  $\rho_u$  la densité du gaz frais,  $\dot{\omega}_f$  le taux de réaction du combustible,  $Y_{f,b}$  et  $Y_{f,u}$  sont respectivement les fractions massiques du combustible dans les gaz brûlés et les gaz frais. La vitesse de combustion laminaire  $S_l^0$  est une vitesse de consommation qui correspond au débit massique du carburant entrant dans le front de flamme. Il est à noter que l'expression de la vitesse de combustion laminaire est valable pour toutes les espèces  $k$ . Pour la configuration géométrique 1D,  $S_l^0$  correspond également à la vitesse de déplacement de la flamme par rapport aux gaz frais,  $S_{d,u}^0$ . Cette dernière représente le mouvement de la flamme et est définie comme la vitesse d'une iso-surface par rapport au flux des réactifs [83, 172, 178] :

$$S_{d,u}^0 = S_f - u_{g,u} \quad (3.2)$$

où  $u_{g,u}$  désigne la vitesse du gaz frais et  $S_f$  la vitesse absolue de la flamme ou vitesse de propagation. Compte tenu de l'accélération du flux à travers le front de flamme en raison de l'expansion du gaz, la vitesse de déplacement de la flamme (FDS)  $S_d^0$  change en conséquence. C'est pourquoi, la FDS dépend de la position considérée et choisie pour son évaluation. Elle peut être pondérée par le rapport de la densité locale à la densité des réactifs et elle est constante à travers le front de flamme. Cette vitesse de déplacement de flamme pondérée par la densité (DWFDS) est [83] :

$$\tilde{S}_d^0 = \frac{\rho}{\rho_u} S_d^0 = Cte \quad (3.3)$$

Cependant, lorsque la flamme est étirée (courbée, déformée ou les deux), toutes les vitesses de son déplacement sont différentes et sa réponse en termes de vitesse par rapport à l'étirement de

la flamme peut être significativement différente. Récemment, *Giannakopoulos et al.* [83] ont évalué l'influence de l'iso-surface, représentant la surface de la flamme, pour calculer la vitesse de déplacement pondérée en fonction de la densité pour les flammes sphériques/cylindriques en expansion. En combinant un développement asymptotique rigoureux et des simulations sphériques 1D, *Giannakopoulos et al.* [83] ont montré un large éventail de pentes pour le DWFDS, avec étirement de la flamme en fonction de l'isotherme choisi pour représenter sa surface. De plus, la sensibilité à l'étirement peut inclure un changement de signe. Pour les flammes sphériques étirées en considérant le côté gaz frais, le DWFDS est donnée par :

$$\widetilde{S}_{d,u} = \frac{dR}{dt} - u_{g,u} \quad (3.4)$$

L'indice  $u$  se réfère au côté gaz frais.  $\frac{dR}{dt}$  est la vitesse absolue de la flamme (ou vitesse de propagation  $S_f$ ) obtenue à partir de la dérivée temporelle du rayon de flamme  $R$ , qui est facilement mesurable expérimentalement, soit par ombroscopie, soit par tomographie *Schlieren* ou par tomographie laser. La détermination expérimentale de la vitesse de déplacement relative  $\widetilde{S}_{d,u}$  est une tâche complexe, puisqu'elle nécessite une mesure précise de la vitesse du gaz frais à l'entrée du front de flamme. Les développements récents du post-traitement des PIV ont été réalisés par [8, 222] afin de mesurer directement la vitesse du gaz frais local  $u_{g,u}$ . Des études DNS ont démontré que cette vitesse de déplacement par rapport aux gaz frais est insensible au rayonnement thermique [101]. Par conséquent, compte tenu des validations du schéma cinétique, l'équation (3.4) reste une expression appropriée pour les comparaisons directes entre les expériences et leurs DNS. Néanmoins,  $\widetilde{S}_{d,u}$  est très sensible à la valeur de l'isotherme considérée pour définir la surface de la flamme. Un léger changement dans l'isotherme modifie radicalement la pente de la vitesse de déplacement de la flamme et sa corrélation de l'étirement [83]. Si l'on considère le côté gaz brûlé, le DWFDS s'écrit :

$$\widetilde{S}_{d,b} = \frac{\rho_b}{\rho_u} \left( \frac{dR}{dt} - u_{g,b} \right) \quad (3.5)$$

L'indice  $b$  renvoie aux gaz brûlés. Dans cette expression,  $\rho_b$  est généralement considéré comme stationnaire et égal à la valeur adiabatique de la densité des gaz brûlés pendant la propagation de la flamme. La vitesse des gaz brûlés,  $u_{g,b}$ , est légèrement négative lorsque les pertes de chaleur et/ou les effets de compression sont pris en compte [34]. Cependant,  $u_{g,b}$  est nul pour les flammes adiabatiques en expansion et non confinées. Par conséquent, l'équation (3.6) est

généralement utilisée dans la littérature, et dans la plupart des cas, les expériences rapportent des données de vitesse de propagation de flamme étirée :

$$\widetilde{S}_{d,b} \simeq \frac{\rho_b^{eq}}{\rho_u} \frac{dR}{dt} \quad (3.6)$$

où  $\rho_b^{eq}$  est la densité des gaz brûlés dans des conditions d'équilibre thermodynamique et chimique adiabatique. Des travaux théoriques et numériques récents ont démontré que l'isotherme approprié pour l'évaluation du DWFDs doit être choisie suffisamment près des gaz brûlés afin d'obtenir une définition plus fiable de la surface de la flamme [83]. Cependant, cette approche standard consistant à mesurer la vitesse de propagation de la flamme par rapport aux gaz brûlés (Eq. 3.6) pourrait entraîner une sous-estimation ou surestimation systématique de la vitesse réelle de la flamme laminaire en fonction des effets de diffusion préférentiels qui modifient l'état des gaz brûlés à partir de la solution d'équilibre chimique adiabatique. De plus, un flux entrant, induit par le changement de densité des gaz brûlés [101] et les pertes de chaleur [34], peut affecter les données mesurées. Il convient également de noter qu'en supposant un front de flamme infiniment mince, l'équation (3.6) devrait correspondre à la vitesse de consommation de flamme moyenne dans l'espace [178] :

$$\langle S_c \rangle_{Thin} \simeq \frac{\rho_b^{eq}}{\rho_u} \frac{dR}{dt} \quad (3.7)$$

Un formalisme plus précis pour la vitesse de consommation de flamme doit être dérivé avec un ensemble minimal d'hypothèses et doit prendre en compte l'évolution du profil de la fraction de masse du combustible à l'intérieur de l'épaisseur du front de flamme. Même si l'on s'attend à ce que cette contribution soit faible, elle est susceptible d'affecter la réponse de la flamme à l'étirement. Dans l'équation (3.1), la vitesse de consommation de flamme est une quantité locale qui dépend du temps et de l'espace (le long de la direction transversale à travers le front de flamme) pour une flamme étirée. Cette quantité est un paramètre clé pour la combustion turbulente où la valeur spatiale moyenne de  $S_c$  représente directement la vitesse de combustion [12, 111, 217]. De surcroît, la vitesse de consommation est essentielle pour la modélisation de la combustion, comme c'est le cas pour les modèles de densité de surface de flamme utilisés en RANS. Dans ces modèles, la vitesse de réaction moyenne correspond au produit de la densité de surface de la flamme (c'est-à-dire la surface de flamme disponible par unité de volume) par la vitesse de consommation locale par unité de surface de flamme [226]. Cette dernière est la vitesse moyenne de consommation dans l'espace  $\langle S_c \rangle$ , et elle est liée à la vitesse de combustion

laminaire par le facteur d'étirement  $I_0$  [21]. Le facteur d'étirement peut être représenté par une corrélation de type *Markstein* [11, 215] par :

$$I_0 = \frac{\langle S_c \rangle}{S_l^0} = 1 - \ell_c \frac{\kappa}{S_l^0} \quad (3.8)$$

où  $\ell_c$  est la longueur de *Markstein* associée à la vitesse de consommation moyenne dans l'espace, et  $\kappa$  est le taux d'étirement de la flamme. Dans le contexte LES, il a été démontré que les effets de vitesse de déformation doivent être inclus dans la modélisation de la vitesse de combustion filtrée pour prédire avec précision les premières étapes de la propagation du noyau, c'est-à-dire soumis à un niveau élevé d'étirement [211]. Ceci pourrait être réalisé en utilisant des valeurs précises de la longueur de *Markstein*. Il a également été établie que dans des cas particuliers, tels que la modélisation de la déflagration ventilée, le développement initial du noyau de flamme est très sensible aux propriétés de transport qui affectent la longueur de *Markstein* [181]. La longueur de *Markstein* est également importante dans les modèles G-equation où elle est introduite via un terme diffusif pour la simulation numérique directe [107], pour prévenir des résultats numériques non physiques. Des fermetures LES basées sur cette forme instantanée de G-equation ont également été proposées [97].

Pour ces raisons, une détermination expérimentale de la vitesse de consommation et de la longueur de *Markstein* associée est de première importance. Malheureusement, une mesure directe de la vitesse de consommation est impossible, puisque le taux de réaction  $\dot{\omega}_f$  ne peut pas être mesuré expérimentalement. Ainsi, des expressions indirectes sont requises et un travail analytique doit être fait pour redéfinir la vitesse de consommation à l'aide des paramètres expérimentalement mesurables. Un travail numérique récent a revu la formulation de la vitesse de consommation moyennée spatialement pour la SEF et a proposé l'expression suivante [17] :

$$\langle S_{c,f} \rangle = \frac{dR_f}{dt} - \frac{(R_0^3 - R_f^3)}{3R_f^2} \frac{1}{\rho_u} \frac{d\rho_u}{dt} \quad (3.9)$$

avec  $R_0$  le rayon de la chambre, et  $R_f$  est un rayon de flamme équivalent basé sur la masse totale des espèces déficientes. L'équation (3.9) a été développée et validée uniquement pour les mélanges pauvres ou stoechiométriques. Par ailleurs, en supposant une compression isentropique des gaz frais, la vitesse de consommation par rapport aux gaz frais (réactifs) est donnée par l'expression :

$$\langle S_{c,f} \rangle = \frac{dR_f}{dt} - \frac{(R_0^3 - R_f^3)}{3R_f^2} \frac{1}{\gamma_u P} \frac{dP}{dt} \quad (3.10)$$

où  $\gamma_u$  est le rapport de la capacité calorifique du gaz frais. Pour dériver ces expressions, les auteurs ont défini la vitesse moyenne de consommation de la flamme dans l'espace pour le SEF comme suit :

$$\langle S_{c,f} \rangle = \frac{1}{\rho_u (Y_{f,b} - Y_{f,u}) R_f^2} \int_0^{R_0} \dot{\omega}_f r^2 dr \quad (3.11)$$

où  $R_f$  est un rayon de flamme. L'évolution temporelle de  $\langle S_{c,f} \rangle$  de l'équation (Eq. 3.11) dépend directement de l'isotherme choisie pour représenter le rayon de flamme. Ce dernier, permet de calculer l'étirement de la flamme correspondante. Le choix du rayon de flamme de référence  $R_f$  a été discuté dans de nombreux articles sur la combustion turbulente [12, 111, 217], mais jamais explicitement résolu à notre connaissance.

### 3.4 Formalisme de vitesse de consommation dans le cas des flammes sphériques non confinées

Dans cette section, la relation entre la vitesse de flamme absolue et la vitesse de consommation (basée sur l'intégrale volumique de la vitesse de réaction) est dérivée pour les géométries sphériques non confinées.

Considérons d'abord un point sur la surface de la flamme où  $Y_k(\mathbf{x}, t) = Y_k^*$  avec  $k = 1, N_{sp}$ , correspondant à la fraction de masse de carburant à un endroit spécifique. Le gradient local de la fraction massique du combustible permet de définir le vecteur normal de l'iso-surface de la flamme qui pointe vers les gaz frais  $\mathbf{n} = \nabla Y_k / |\nabla Y_k|$ . La vitesse à laquelle ce point doit se déplacer pour rester sur la surface spécifique de la flamme est égale à la vitesse absolue de cette iso-surface  $\mathbf{S}_f = S_f \mathbf{n}$ . La propagation de l'iso-surface peut être écrite sous la forme d'une équation aux dérivées partielles :

$$\frac{\partial Y_k}{\partial t} + \mathbf{S}_f \cdot \nabla Y_k = 0 \quad (3.12)$$

Il est à noter que, même si la variation de l'épaisseur du front de flamme peut être produite par l'étirement de la flamme [50], la vitesse de flamme absolue reste constante indépendamment de l'isotherme et n'est donc pas sensible à l'iso-contour qui est pris en compte. Pour les flammes sphériques en expansion, cette hypothèse est valide et de nombreuses études de simulation numérique ont démontré que la vitesse absolue de la flamme est insensible à la position de référence (isotherme) dans le front de flamme [20, 83, 90].

## Étude de la vitesse de consommation d'une flamme laminaire sphérique en expansion

De la même manière, compte tenu du profil de la densité dans l'écoulement, on obtient :

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \mathbf{S}_f \cdot \nabla \rho = 0 \quad (3.13)$$

Cette dernière équation suppose que les iso-surfaces de densité et de fraction massique ont la même vitesse absolue. Cette hypothèse est valable si la pression thermodynamique est constante dans l'espace, c'est-à-dire si le nombre de *Mach* de l'écoulement est suffisamment petit, et si les iso-surfaces de température se propagent à la même vitesse que les iso-surfaces de fraction massique. Elle sera vérifiée grâce aux simulations numériques présentées ci-après. En supposant une loi de diffusion de *Fick* avec un coefficient de diffusion  $D$ , identique à toutes les espèces, l'équation de conservation de la fraction de masse du combustible  $Y_k$  s'écrit comme suit :

$$\frac{\partial \rho Y_k}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{u} Y_k) = \nabla \cdot (\rho D \nabla Y_k) + \dot{\omega}_k \quad (3.14)$$

où  $\mathbf{u}$  est la vitesse d'écoulement locale.

En combinant les deux équations (3.12) et (3.14), l'intégration de l'équation de transport de fraction massique de carburant sur un volume  $V$  de rayon fini  $R_0$  est :

$$- \int_V \mathbf{S}_f \cdot \nabla (\rho Y_k) dV + \int_V \nabla \cdot (\rho \mathbf{u} Y_k) dV = \int_V \nabla \cdot (\rho D \nabla Y_k) dV + \int_V \dot{\omega}_k dV \quad (3.15)$$

Ce volume peut être choisi de façon à ce que le gradient de masse de la fraction de carburant soit nul à  $R = R_0$ . Ainsi, l'équation (3.15) donne :

$$- \int_V \mathbf{S}_f \cdot \mathbf{n} \cdot \nabla (\rho Y_k) dV + \int_V \nabla \cdot (\rho \mathbf{u} Y_k) dV = \int_V \dot{\omega}_k dV \quad (3.16)$$

Le deuxième terme du côté gauche est strictement égal au débit massique de carburant des gaz frais (i.e.  $Y_{f,u} \dot{M}$ ) quittant le volume  $V$ . En supposant que la vitesse absolue de la flamme  $S_f$  ne dépend que du temps et est constante sur l'ensemble du front de flamme, le premier terme du côté gauche est développé de telle sorte que :

$$\int_V \mathbf{n} \cdot \nabla (\rho Y_k) dV = \int_V \nabla \cdot (\rho Y_k \mathbf{n}) dV - \int_V \rho Y_k \nabla \cdot \mathbf{n} dV \quad (3.17)$$

La divergence du vecteur normal est strictement égale à la somme des principales courbures de la surface volumique. Pour les géométries sphériques, la divergence du vecteur normal

## Étude de la vitesse de consommation d'une flamme laminaire sphérique en expansion

est  $\nabla \cdot \mathbf{n} = \frac{2}{r}$ .

Le premier terme du côté droit de l'équation (3.17) peut être développé en :

$$\int_V \nabla \cdot (\rho Y_k \mathbf{n}) dV = \int_{A_0} \rho Y_k \mathbf{n} \cdot \mathbf{n} dA = \rho_u Y_{k,u} A_0 = \rho_u Y_{k,u} \int_0^{R_0} 8\pi r dr \quad (3.18)$$

avec  $A_0$  la surface externe du volume  $V$ . Par conséquent, l'équation (3.16) est :

$$S_f \int_0^{R_0} (\rho Y_k - \rho_u Y_{k,u}) 8\pi r dr + Y_{k,u} \dot{M} = \int_V \dot{\omega}_k dV \quad (3.19)$$

l'équation (3.19) peut être écrite sous une forme simplifiée si un rayon de flamme équivalent  $R_{eq,k}$  lié à l'espèce  $k$ , est défini :

$$R_{eq,k} = \sqrt{\frac{\int_0^{R_0} (\rho Y_k - \rho_u Y_{k,u}) 2r dr}{(\rho_b Y_{k,b} - \rho_u Y_{k,u})}} = \sqrt{\int_0^{R_0} \left( \frac{\rho Y_k - \rho_u Y_{k,u}}{\rho_b Y_{k,b} - \rho_u Y_{k,u}} \right) 2r dr} \quad (3.20)$$

Ce rayon est construit sur l'intégrale d'une variable de progrès basée sur la densité partielle de l'espèce  $k$ . En effet,  $(\rho Y_k - \rho_u Y_{k,u})/(\rho_b Y_{k,b} - \rho_u Y_{k,u})$  est une quantité qui est nulle dans les gaz frais et égale à l'unité dans les gaz brûlés. Pour un front de flamme infiniment mince, cette expression donne exactement le rayon de flamme. Ensuite, l'équation (3.19) donne :

$$S_f 4\pi R_{eq,k}^2 (\rho_b Y_{k,b} - \rho_u Y_{k,u}) + Y_{k,u} \dot{M} = \int_V \dot{\omega}_k dV \quad (3.21)$$

Enfin, une forme alternative peut être donnée pour l'intégration de la vitesse de réaction dans le volume  $V$  en introduisant à  $r = R_{eq,k}$  la vitesse fictive du côté des gaz frais notée  $u_{u,R_{eq,k}}$ . Cette vitesse fictive peut être obtenue à partir de données expérimentales en prolongeant le profil de vitesse du côté des gaz frais jusqu'au rayon considéré. Par la suite, le débit quittant le domaine  $\dot{M}$  est égal au débit fictif des gaz frais à travers l'iso-surface  $r = R_{eq,k}$ , qui s'exprime par l'expression :  $\rho_u 4\pi R_{eq,k}^2 u_{u,R_{eq,k}}$ . L'équation complète devient :

$$\int_V (\dot{\omega}_k) dV = S_f 4\pi R_{eq,k}^2 (\rho_b Y_{k,b} - \rho_u Y_{k,u}) + \rho_u Y_{k,u} 4\pi R_{eq,k}^2 u_{u,R_{eq,k}} \quad (3.22)$$

À partir de cette équation, on peut exprimer la vitesse de consommation de n'importe quelle

espèce  $k$ . Partant de la nécessité pour cette vitesse de correspondre à la définition de la vitesse de consommation des flammes planes 1D, pour des rayons infiniment grands définis dans l'équation (3.1) et l'équation (3.22), doit être normalisée par le rapport  $1/(\rho_u (Y_{k,b} - Y_{k,u}) R^2)$  pour définir la vitesse de consommation moyenne dans l'espace de l'espèce  $k$  dans la configuration de flamme sphérique en expansion non confinée et étirée. Le choix du rayon  $R$  est naturel quand on considère l'équation (3.22) :  $R = R_{eq,k}$ . Compte tenu de ce choix de rayon, la vitesse de consommation s'écrit :

$$\begin{aligned} \langle S_{c,k} \rangle_{Unconfined} &= \frac{1}{\rho_u (Y_{k,b} - Y_{k,u}) (R_{eq,k})^2} \int_0^{R_0} (\dot{\omega}_k) r^2 dr \\ &= S_f \frac{\rho_b Y_{k,b} - \rho_u Y_{k,u}}{\rho_u (Y_{k,b} - Y_{k,u})} + \frac{Y_{k,u}}{(Y_{k,b} - Y_{k,u})} u_{u,R_{eq,k}} \end{aligned} \quad (3.23)$$

Cette relation est valable pour toutes les espèces principales, c'est-à-dire les espèces qui ont des fractions massiques différentes dans les gaz frais et brûlés. Cette relation nécessite également d'avoir la densité des gaz brûlés à l'équilibre. Cette dernière est difficile à estimer à partir d'une densité mesurée dans les gaz brûlés. Car cette mesure ne serait pas nécessairement constante dans l'espace et dans le temps comme l'ont montré *Bonhomme et al.* [17]. Afin d'exprimer la vitesse de consommation de flamme avec une expression plus simple, l'équation (3.23) peut être dérivée en considérant les espèces déficientes pour les deux cas :

- $k = \text{fuel}$ , si  $\phi \leq 1$ ,
- $k = \text{oxidant}$ , si  $\phi > 1$ .

où  $\phi$  représente la richesse.

Pour ces deux cas, la fraction massique des espèces  $k$  du côté des gaz brûlés est négligeable, *i.e.*  $Y_{k,b} \approx 0$ . La vitesse de consommation de l'espèce déficiente ( $k = DS$ ) donne :

$$\langle S_{c,DS} \rangle_{Unconfined} = S_f - u_{u,R_{eq,DS}} = -\frac{1}{\rho_u Y_{u,DS} (R_{eq,DS})^2} \int_0^{R_0} (\dot{\omega}_{DS}) r^2 dr \quad (3.24)$$

Notez que l'équation (3.24) est similaire à la formulation fournie pour la vitesse de déplacement de la flamme, *i.e.* la différence entre la vitesse absolue de la flamme et la vitesse d'écoulement locale non brûlée, ici à l'iso-surface spécifique où  $r = R_{eq,DS}$ .

### 3.5 Formalisme de vitesse de consommation dans le cas des flammes sphériques confinées

Dans la présente section, nous considérons une chambre de combustion fermée et sphérique de rayon interne  $R_0$ . La flamme sphérique se propage du centre de la sphère jusqu'aux parois. L'équation de la vitesse de consommation moyennée spatialement du réactif est dérivée de la même méthodologie que celle fournie pour les flammes sphériques non confinées. L'objectif de cette dérivation est d'ouvrir la voie à une détermination expérimentale de la vitesse de consommation moyennée spatialement.

Si l'équation (3.12) est toujours valide pour les configurations confinées, l'augmentation de la densité dans le domaine, due à l'augmentation de pression à mesure que la flamme se propage, doit être prise en compte dans l'équation (3.13). En supposant une compression isentropique adiabatique, la pression et la densité sont directement liées, *i.e.*  $P/\rho^\gamma = cst$ , où  $\gamma$  est le rapport de capacités calorifiques.  $\gamma$  est supposé être constant dans le temps. Cette relation peut être dérivée par rapport au temps et conduit à :

$$\frac{1}{P} \frac{dP}{dt} = \frac{\gamma}{\rho} \frac{d\rho}{dt} \quad (3.25)$$

En raison du très faible nombre de *Mach*, la pression thermodynamique est constante dans l'espace. Cela signifie que les densités du côté des gaz frais et du côté de gaz brûlés ont une variation temporelle relative identique :

$$\frac{\gamma_u}{\rho_u} \frac{d\rho_u}{dt} = \frac{\gamma_b}{\rho_b} \frac{d\rho_b}{dt} \quad (3.26)$$

En outre, en admettant que le rapport de capacités calorifiques est équivalent dans les gaz frais et brûlés, ce qui est valable pour les mélanges considérés, l'équation suivante s'applique aussi bien aux gaz frais qu'aux gaz brûlés :

$$\frac{1}{\rho} \frac{\partial \rho}{\partial t} + \mathbf{S}_f \frac{\nabla \rho}{\rho} = \frac{1}{\rho_u} \frac{d\rho_u}{dt} \quad (3.27)$$

En effet, dans les gaz frais et brûlés, le gradient de densité est nul et on retrouve la variation temporelle. Cette équation est simplement une extension de l'équation (3.13) où la variation de

densité due à l'élévation de pression est prise en compte. En combinant les équations (3.12), (3.14) et (3.27), l'équation de transport résultante peut être intégrée sur la sphère confinée. Il convient de noter que les flux sont nuls aux limites du mur ainsi que les vitesses. De la même manière que dans le cas des flammes non confinées, nous supposons que la vitesse de propagation de la flamme est constante sur l'ensemble du front de flamme et n'évolue qu'avec le temps. Nous obtenons au final :

$$\begin{aligned}
 & -S_f \int_V \mathbf{n} \cdot \nabla (\rho Y_k) dV + \int_V Y_k \frac{\rho}{\rho_u} \frac{d\rho_u}{dt} dV = \int_V \dot{\omega}_k dV \\
 & -S_f \int_0^{R_0} (\rho Y_k - \rho_u Y_{k,u}) 2r dr + \int_0^{R_0} \left( 4\pi \rho Y_k \frac{1}{\rho_u} \frac{d\rho_u}{dt} r^2 \right) dr = \int_V \dot{\omega}_k dV.
 \end{aligned} \tag{3.28}$$

La première intégrale sur la partie gauche de l'équation (3.28) donne :

$$\int_0^{R_0} (\rho Y_k - \rho_u Y_{k,u}) 2r dr = -4\pi R_{f,eq}^2 (\rho_b Y_{k,b} - \rho_u Y_{k,u}), \tag{3.29}$$

où le rayon de flamme équivalent  $R_{eq,k}$  est défini comme pour la géométrie non confinée (Eq. 3.20). Un rayon équivalent  $R_{eq2,k}$  supplémentaire peut être introduit pour exprimer le deuxième terme intégral de la partie gauche de l'équation (3.28), de sorte que :

$$\begin{aligned}
 \frac{1}{\rho_u} \frac{d\rho_u}{dt} \int_0^{R_0} 4\pi \rho Y_k r^2 dr &= \frac{1}{\rho_u} \frac{d\rho_u}{dt} \left[ \int_0^{R_{eq2,k}} \rho_b Y_{k,b} r^2 dr + \int_{R_{eq2,k}}^{R_0} \rho_u Y_{k,u} r^2 dr \right] \\
 \frac{1}{\rho_u} \frac{d\rho_u}{dt} \int_0^{R_0} 4\pi \rho Y_k r^2 dr &= \frac{1}{\rho_u} \frac{d\rho_u}{dt} \frac{4}{3} \pi \left( R_0^3 \rho_u Y_{k,u} + R_{eq2,k}^3 (\rho_b Y_{f,b} - \rho_u Y_{k,u}) \right)
 \end{aligned} \tag{3.30}$$

d'où :

$$R_{eq2,k} = \sqrt[3]{\frac{\int_0^{R_0} (\rho Y_k - \rho_u Y_{k,u}) 3r^2 dr}{(\rho_b Y_{k,b} - \rho_u Y_{k,u})}} = \sqrt[3]{\int_0^{R_0} \left( \frac{\rho Y_k - \rho_u Y_{k,u}}{\rho_b Y_{k,b} - \rho_u Y_{k,u}} \right) 3r^2 dr} \tag{3.31}$$

Ce second rayon de flamme équivalent est basé sur la masse totale de l'espèce  $k$  contenue dans la sphère de rayon  $R_{eq2,k}$ . On peut noter que ce rayon de flamme équivalent est la généralisation du rayon de flamme proposé par *Bonhomme et al.* [17] et il est défini uniquement dans le cas d'espèces déficientes. Considérant les deux rayons de flamme équivalents  $R_{eq,k}$  et  $R_{eq2,k}$ . Le taux de réaction volumique intégral de n'importe quelle espèce  $k$  dans une géométrie sphérique

confinée de rayon interne  $R_0$  est exprimé par :

$$\int_V (\dot{\omega}_k) dV = S_f 4\pi (R_{eq,k})^2 (\rho_b Y_{k,b} - \rho_u Y_{k,u}) + \frac{4}{3}\pi \left( \rho_u Y_{f,u} R_0^3 + (\rho_b Y_{f,b} - \rho_u Y_{f,u}) (R_{eq2,k})^3 \right) \frac{1}{\rho_u} \frac{d\rho_u}{dt} \quad (3.32)$$

Par conséquent, comme pour un domaine non confiné, la vitesse de consommation de n'importe quelle espèce  $k$  peut être obtenue en multipliant cette intégrale de volume de taux de réaction par le facteur  $\frac{1}{\rho_u (Y_{f,b} - Y_{f,u}) (R_{eq,k})^2}$ . Il permet de définir la vitesse de consommation moyennée dans l'espace dans un récipient fermé par :

$$\begin{aligned} \langle S_{c,k} \rangle_{Confined} &= \frac{1}{\rho_u (Y_k^b - Y_k^u) (R_{eq,k})^2} \int_V (\dot{\omega}_k) r^2 dr \\ &= S_f \frac{(\rho_b Y_{k,b} - \rho_u Y_{k,u})}{\rho_u (Y_{k,b} - Y_{k,u})} + \frac{\rho_u Y_{k,u} R_0^3 + (\rho_b Y_{k,b} - \rho_u Y_{k,u}) (R_{eq2,k})^3}{3\rho_u (Y_{k,b} - Y_{k,u}) (R_{eq,k})^2} \frac{1}{\rho_u} \frac{d\rho_u}{dt}. \end{aligned} \quad (3.33)$$

Comme pour le développement non confiné, on peut voir que si l'on considère les espèces déficientes ( $k=DS$ ) (Eq. 3.33) donne :

$$\begin{aligned} \langle S_{c,DS} \rangle_{Confined} &= S_f - \frac{(R_0^3 - (R_{eq2,DS})^3)}{3(R_{eq,DS})^2} \frac{1}{\rho_u} \frac{d\rho_u}{dt} \\ &= -\frac{1}{\rho_u Y_{k,u} (R_{eq,DS})^2} \int_0^{R_0} \dot{\omega}_f r^2 dr \end{aligned} \quad (3.34)$$

Ici, l'équation (3.34) définit rigoureusement la vitesse de consommation en considérant une espèce de réactif. Il convient de noter que ce développement analytique garantit que le côté droit (RHS) ou le côté gauche (LHS) de l'équation (3.34) soient identiques. De point de vue expérimental, l'équation (3.34) peut être utilisée directement, car elle ne fait intervenir que l'état thermodynamique et cinétique des gaz frais et la détermination de  $\rho_b$  et  $Y_{k,b}$  n'est pas nécessaire.

### 3.6 Simulations numériques et validation

Pour obtenir une modélisation efficace de la flamme sphérique en expansion, au moins deux approches ont été récemment introduites. Premièrement, le code A-SURF (Adaptive Simulation of Unsteady Reactive Flow), développé par le Dr. Z. Chen et ses collaborateurs, a été utilisé pour évaluer les effets de radiation et de compression [34, 36, 243], les incertitudes d'extra-

polation [35] ou l'effet de diffusion de Soret [126] avec des calculs de géométrie 1D (plane, cylindrique ou sphérique). Deuxièmement, le code TORC (Transient One dimensional Reactive Flow Code), développé par le Prof. *F.N.N. Egolfopoulos* et ses collaborateurs, provient d'une modification du code PREMIX pour résoudre les équations de conservation instationnaires en coordonnées sphériques 1D. Il est capable de tenir compte du rayonnement thermique dans la limite optiquement mince [101, 238]. Ces deux codes ont été utilisés avec succès pour effectuer des comparaisons avec des données expérimentales brutes (vitesse de flamme en fonction de l'étirement de flamme), et ces comparaisons directes semblent être un moyen viable pour valider des schémas cinétiques au lieu de comparer des valeurs extrapolées [100, 220].

### 3.6.1 Configuration numérique

Dans le cadre de cette thèse, il a été choisi de modifier et améliorer un code 3D volumes finis existant afin d'effectuer des simulations de configuration de flamme sphérique en expansion laminaire (SEF). L'utilisation d'un code 3D est motivée par le fait que la conservation exacte des variables conservatrices est assurée (ce qui n'est pas le cas dans la plupart des solveurs sphériques 1D), et que ce type de code peut être appliqué à des cas plus complexes dans le futur.

Pour ce faire, le code interne YALES2 [44], basé sur la méthode des volumes finis précédemment présenté à la section (§ 2.5), a été sélectionné.

La combustion est modélisée par la chimie d'*Arrhenius* afin de fournir une description réaliste à la fois de la thermodynamique du mélange et des propriétés de transport des différentes espèces. Dans les écoulements laminaires, les échelles de temps chimiques sont d'un ordre de grandeur inférieur à celui résultant de la convection et de la diffusion. Pour cette raison, une approche de séparation des opérateurs [244] est appliquée. L'intégration du terme source chimique est effectuée indépendamment, en supposant une pression constante et une enthalpie totale constante. L'intégration se fait en utilisant les solveurs ODE raides de la librairie CVODE [41]. Dans cette dernière, une formule de différence finies en amont (BDF pour Backward Differentiation Formula) de 5<sup>ième</sup> ordre est utilisée lorsque l'intégration raide est réussie. Quand le système est plus difficile à intégrer, un schéma BDF A-stable de 2<sup>ième</sup> ordre est alors utilisé. Les vitesses de diffusion sont obtenues en utilisant l'approximation de *Hirschfelder et Curtiss* [94, 178].

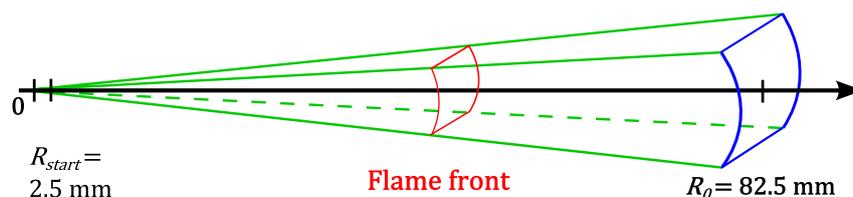


FIGURE 3.1 – Schéma du domaine de la simulation 3D.

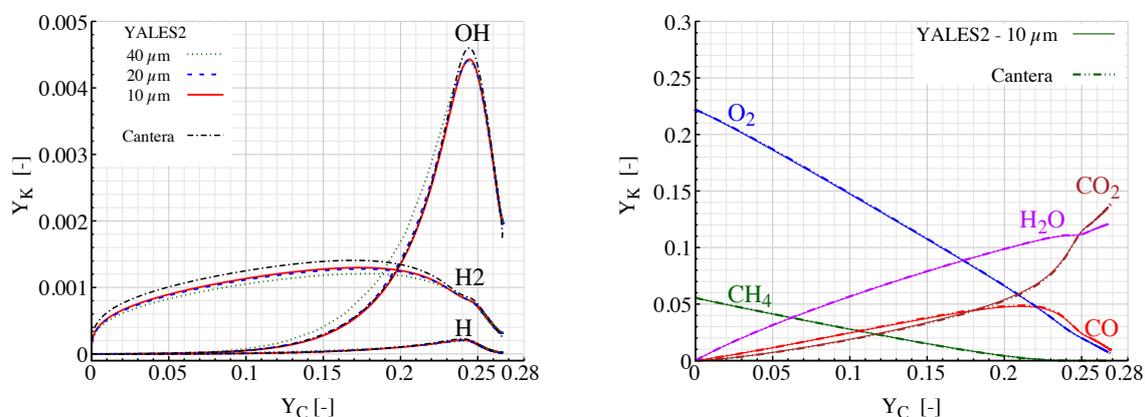
Le domaine de simulation reproduit le dispositif expérimental présent au laboratoire CO-RIA [220, 222]. Ce domaine est une partie 3D d'une sphère avec un angle d'ouverture de  $0.5^\circ$ . La partie sphérique est tronquée au centre pour éviter les problèmes de maillage et de singularité numérique. Le rayon de la portion de sphère évolue entre  $R_{trancature} = 2.5 \text{ mm}$  et  $R_0 = 82.5 \text{ mm}$ , comme indiqué dans la figure. 3.1. La maillage est divisé en deux parties qui ont une taille de maille différente. Entre  $R_{trancature} = 2.5 \text{ mm}$  et  $r = 25 \text{ mm}$ , le maillage est homogène et constant à  $\Delta x = 10 \mu\text{m}$ . Il correspond à la zone étudiée expérimentalement et les calculs sont arrêtés avant que le front de flamme n'atteigne  $r = 25 \text{ mm}$ . De  $25 \text{ mm}$  jusqu'à  $R_0$ , le maillage passe de  $\Delta x = 10 \mu\text{m}$  à  $200 \mu\text{m}$ . Les conditions aux limites sont périodiques sur les faces tangentes à la direction de propagation de la flamme et une paroi adiabatique est placée à l'extrémité du domaine pour tenir compte des effets de confinement. Les simulations sont effectuées avec deux schémas cinétiques différents en fonction du combustible. Les mécanismes *GRI-mech 3.0* de 53 espèces et 325 réactions [209] et Jerzembek [102], de 99 espèces et 601 réactions, sont utilisés respectivement pour le méthane/air et les flammes iso-octane/air. Les gaz frais sont initialement à une température de  $300 \text{ K}$  ( $373 \text{ K}$  pour l'iso-octane/air) et une pression de  $1 \text{ atm}$ . L'allumage du mélange est réalisé en substituant, en respectant la même richesse, une partie de gaz frais par un noyau de gaz brûlés entre  $R_{trancature} = 2.5 \text{ mm}$  et  $R_{allumage} = 3 \text{ mm}$ .

### 3.6.2 Validation des simulations numériques

Dans la présente étude, les vitesses de combustion non étirées ainsi que les profils d'espèces sont calculés pour les flammes unidimensionnelles (1D), laminaires et pré-mélangées à l'aide du logiciel CANTERA [88]. Afin d'évaluer la fiabilité des simulations 3D, les profils d'espèces radicales dans la zone de flamme sont tracés par rapport à la variable de progrès  $Y_c$  dans la figure (3.2), et comparés aux données de CANTERA. Trois maillages de domaine de simulation pour les cas 3D sont testés. La variable de progression  $Y_c$  est définie comme :

$$Y_c = Y_{H_2O} + Y_{CO_2} + Y_{CO} \quad (3.35)$$

où  $Y_i$  est la fraction massique de l'espèce  $i$  pour une flamme stœchiométrique  $CH_4/air$ , où la réaction chimique est la plus forte (c'est-à-dire que la zone de réaction est la plus mince).



(a) Convergence du maillage pour les espèces radi- (b) Espèces majoritaires pour le maillage le plus fin  
calaires versus CANTERA

FIGURE 3.2 – Validation des simulations 3D par rapport à CANTERA. Flamme  $CH_4/air$  à  $P = 1 atm$  et  $T = 300 K$ .

Il est montré que les résultats donnés par le maillage de taille  $10 \mu m$  sont convergents. Même s'il existe de petites différences avec les profils d'espèces radicales par rapport aux calculs de CANTERA, les profils des principales espèces correspondent exactement aux données de la simulation plane 1D (CANTERA). Seules les espèces majoritaires sont concernées par le calcul de la vitesse de consommation. Par conséquent, tous les calculs sont effectués avec le maillage le plus fin dans le présent travail. Il convient de préciser que le front de flamme est résolu spatialement avec au moins 40 points pour le cas le plus défavorable (la flamme la plus mince).

Comme mentionné précédemment, la validation du modèle actuel par rapport aux expériences est difficile, car il n'est pas possible de mesurer le terme source des espèces individuelles. Il est donc obligatoire de valider la relation entre les expressions cinématiques et cinétiques de la vitesse de consommation de la flamme sphérique fournie par l'équation (3.33). Une fois validée, cette expression permettra une mesure directe de la vitesse de déplacement de la flamme et de l'augmentation de la densité des gaz frais pour calculer la vitesse de consommation de la flamme sphérique en expansion. Les RHS et LHS de l'équation (3.33) ont été évalués dans des simulations SEF 3D avec la configuration numérique décrite dans la section précédente. Les résultats sont présentés dans la figure 3.3 pour trois valeurs de richesse. Les deux expressions sont en très bon accord pour les espèces majeures considérées. Cela valide toutes les hypothèses du modèle.

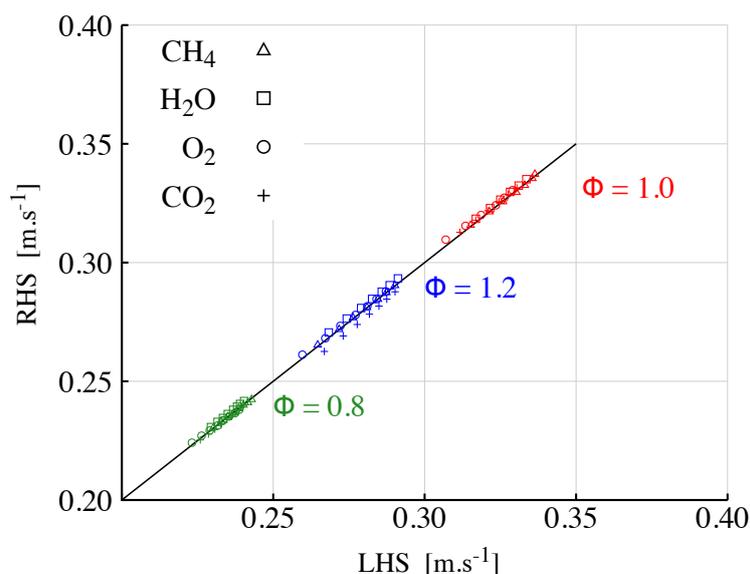


FIGURE 3.3 – Comparaison des expressions cinétique (LHS) et cinématique (RHS) pour la vitesse de consommation de la SEF.

Basé sur la recommandation de travaux récents [100, 220], le schéma cinétique utilisé dans ces simulations peut être validé en effectuant une comparaison directe entre les résultats numériques et expérimentaux, concernant à la fois la vitesse  $\widetilde{S}_{d,b}$  et  $\widetilde{S}_{d,u}$ . Les données expérimentales proviennent de Varea *et al.* [222]. Comme le montre la figure (3.4), les valeurs numériques et expérimentales de ces vitesses sont similaires pour trois valeurs de richesse des flammes  $CH_4/air$ . Les données sont tracées dans une zone d'intérêt avec un rayon de flamme compris entre  $10 < R < 20 \text{ mm}$ , où les effets d'allumage et de confinement sont négligeables [35]. L'extrapolation linéaire des données numériques est présentée par les lignes continues. La question des techniques d'extrapolation et de leur validité n'est pas abordée dans cette thèse, pour plus de détail sur ce sujet voir [100, 220, 237]. Cependant, pour la flamme méthane/air, l'extrapolation linéaire peut donner une bonne estimation de la vitesse de combustion à étirement nul. Afin d'évaluer la précision de l'extrapolation des vitesses de consommation sur la figure (3.4), la valeur de la vitesse de combustion laminaire donnée par la simulation 1D plane est représentée par la croix sur l'axe des ordonnées. Sachant que cette valeur de vitesse 1D est prise pour référence mais ne représente pas la valeur exacte. Elle est obtenue en utilisant un seul schéma cinétique détaillé mais pas d'une étude de convergence de la valeur de vitesse 1D de plusieurs schémas cinétiques. De légères différences entre les résultats expérimentaux et les résultats numériques sont observées. Ces divergences peuvent avoir deux origines différentes. Premièrement, les schémas cinétiques utilisés dans les simulations peuvent ne pas représenter exactement

la chimie des flammes. Deuxièmement, elles peuvent provenir d'erreurs expérimentales dues au traitement des mesures optiques et à l'incertitude inhérente sur le rapport d'équivalence pendant la préparation du mélange [238]. Cette deuxième incertitude sera maximale dans les cas où la variation de la vitesse de combustion laminaire est la plus importante en fonction de la richesse.

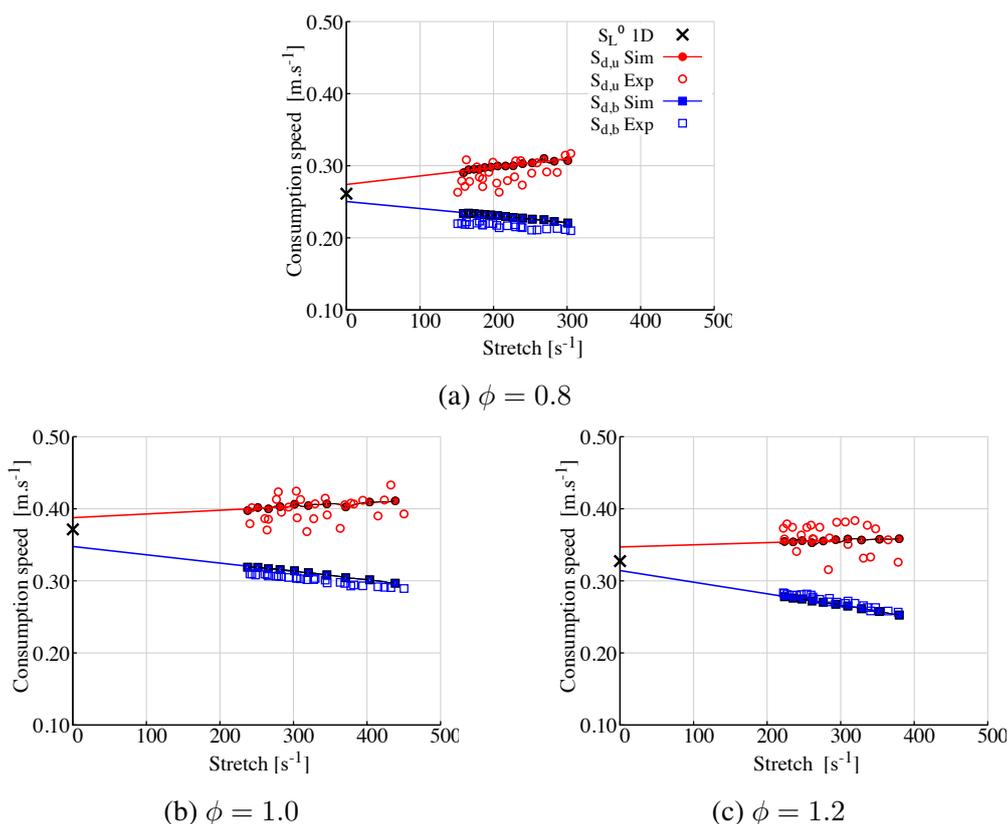


FIGURE 3.4 – Comparaison entre les données numériques et expérimentales des vitesses  $\widetilde{S}_{d,b}$  (Eq. 3.6) et  $\widetilde{S}_{d,u}$  (Eq. 3.4). Flamme  $CH_4/air$  à  $P = 1 \text{ atm}$ ,  $T = 300 \text{ K}$  et  $\phi = 0.8, 1$  et  $1.1$ . Le symbole ( $\times$ ) représente la vitesse de combustion laminaire non étirée  $S_L^0$  (Eq. 3.1).

Cette section a montré que l'approche numérique est validée pour la modélisation des flammes laminaires sphériques pré-mélangées avec une chimie détaillée. De plus, le domaine numérique a été construit pour reproduire l'installation présente au laboratoire CORIA, afin de permettre des comparaisons directes entre les résultats numériques et expérimentaux. La section qui suit présentera les résultats de l'équation (3.33) de la vitesse de consommation moyennée dans l'espace pour plusieurs espèces et une comparaison directe entre les résultats numériques et expérimentaux.

### 3.7 Résultats et discussion

La figure (3.5) montre l'évolution de la vitesse de consommation pour différentes espèces cibles de trois flammes de  $CH_4/air$  à différentes richesses.

La croix sur l'ordonnée indique la valeur à l'étirement nul (simulations 1D) pour les conditions correspondantes. Cette figure (3.5) montre que pour toute espèce réactive ou produite,

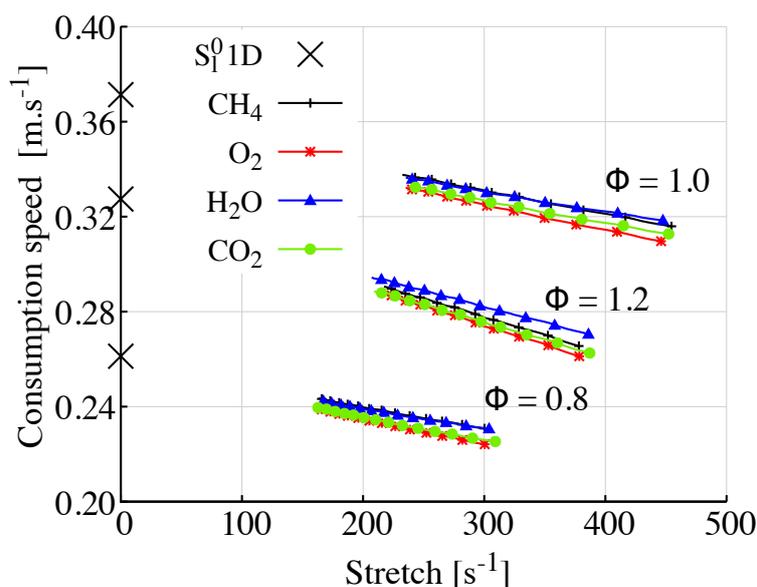
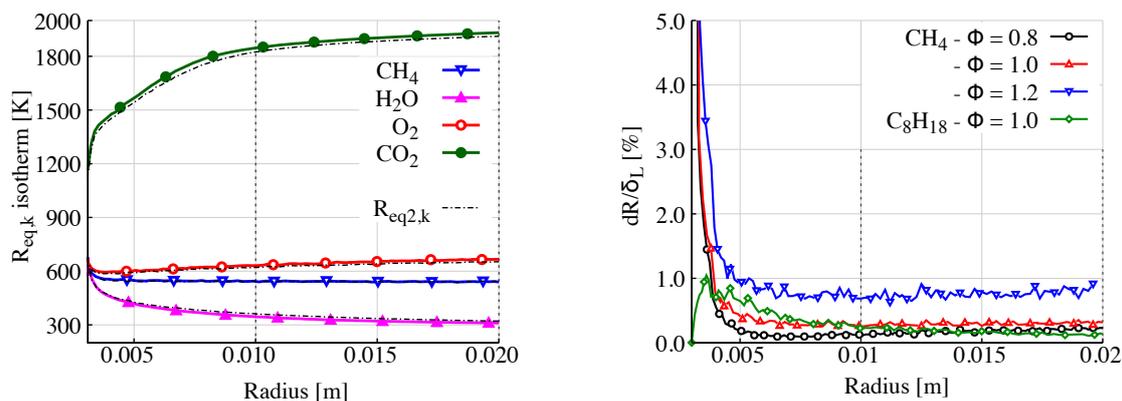


FIGURE 3.5 – Évolution de la vitesse de consommation par rapport au taux d'étirement de la flamme de l'équation (3.33) considérant plusieurs espèces  $k$ . La flamme  $CH_4/air$  à  $P = 1 atm$ ,  $T = 300 K$  et  $\phi = 0.8, 1.0$  et  $1.2$ . Les croix représentent  $S_l^0$  de l'équation (3.1).

les vitesses de consommation calculées par l'équation (3.33) sont légèrement différentes, alors qu'elles sont égales dans la configuration de flamme non étirée 1D. Néanmoins, la différence diminue avec la diminution de l'étirement de la flamme, c'est-à-dire l'augmentation des rayons de flamme, pour toutes les richesses. En outre, l'extrapolation à l'étirement nul de la vitesse de consommation de chaque espèce tend vers la même valeur. La différence qui existe entre chaque espèce pour la vitesse de consommation peut avoir plusieurs origines. Si la structure de la flamme évolue légèrement avec le temps, la vitesse de consommation peut varier selon les espèces.

Pour aller plus loin dans l'analyse et comprendre pourquoi la vitesse de consommation de flamme est une fonction de l'espèce cible, la figure (3.6a) montre les isothermes associées aux deux rayons équivalents  $R_{eq,k}$  et  $R_{eq2,k}$  contre le rayon de flamme pour différentes espèces  $k$ .

Les résultats sont présentés pour le cas stœchiométrique, puisque des observations identiques sont faites pour des conditions pauvres et riches. De plus, la figure (3.6b) montre la différence  $\Delta R$  entre les rayons  $R_{eq,k}$  et  $R_{eq2,k}$ . Des données sont fournies pour les flammes d'iso-octane/air pour valider le cas des combustibles lourds.  $\Delta R$  est normalisé par l'épaisseur de la flamme  $\delta_L$ , pour les espèces déficientes.



(a) Position de l'isotherme  $R_{eq,k}$ .  
La flamme  $CH_4/air$  -  $\phi = 1.0$ .

(b)  $\Delta R$  normalisé par l'épaisseur de flamme  $\delta_L$ .  
Flammes  $CH_4/air$  et  $C_8H_{18}/air$ .

FIGURE 3.6 – Évolution de l'isotherme  $R_{eq,k}$  et de  $\Delta R$  en fonction du rayon de flammes  $CH_4/air$  et  $C_8H_{18}/air$  pour différentes richesses à  $P = 1 atm$ ,  $T = 300 K$ .

Premièrement, sur la figure (3.6a) on peut voir que les deux rayons équivalents sont différents pour les espèces considérées et ne suivent pas les mêmes isothermes. C'est particulièrement vrai pour l'espèce  $CO_2$  pour laquelle l'isotherme correspondant évolue considérablement, tandis que la flamme se dilate. Deuxièmement, en considérant chaque espèce séparément,  $R_{eq,k}$  et  $R_{eq2,k}$  sont très proches avec une différence maximale de  $1 \mu m$  dans la région d'intérêt, c'est-à-dire  $R_f > 10 mm$ . Cela signifie que la définition des rayons équivalents à partir d'intégrations de surface ou de volume donne des résultats très similaires. Ce constat est renforcé par les résultats de la figure (3.6b) où la différence entre les deux rayons  $R_{eq,k}$  et  $R_{eq2,k}$  est inférieure à 1 % de l'épaisseur de la flamme pour les rayons de flamme  $R_f > 10 mm$ . D'ailleurs, il convient de noter que l'isotherme caractérisant l'espèce déficiente –  $CH_4$  dans la figure (3.6a) – est proche de l'isotherme d'évaporation des gouttelettes utilisée pour les mesures tomographiques qui est proche de  $T \approx 580 K$ , comme mentionné dans [222]. La figure (3.7) montre l'évolution de la vitesse de propagation en fonction du rayon de flamme pour différentes espèces  $k$ . Nous observons que la valeur de la vitesse de propagation ne dépend pas de l'espèce considérée. Par conséquent, les différentes positions de  $R_{eq,k}$  dans l'épaisseur de la flamme en fonction de  $k$

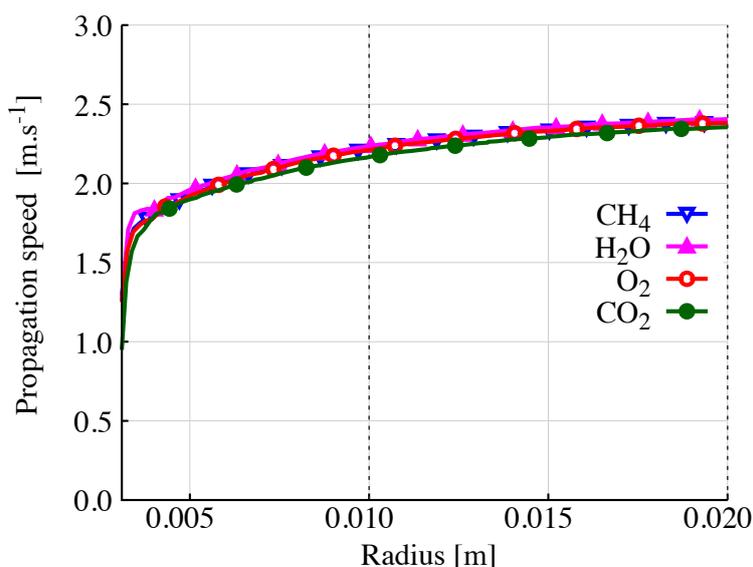


FIGURE 3.7 – Vitesse de propagation absolue liée aux deux rayons équivalents en considérant différentes espèces pour une flamme stoechiométrique  $CH_4/air$  aux conditions atmosphériques.

n'influenceront pas la valeur de la vitesse de consommation.

Il est donc possible de n'utiliser qu'un seul rayon équivalent dans la définition de la vitesse de consommation moyennée dans l'espace, ce qui rend l'équation 3.9 équivalent à l'équation 3.34. La différence entre les vitesses de consommation des espèces due à l'introduction dans les simulations de deux rayons équivalents est de l'ordre de 1 à 2  $cm/s$ . Cette incertitude est comparable à celle obtenue lors des mesures expérimentales. D'un point de vue expérimental, l'utilisation de l'équation (3.34), considérant l'espèce déficiente, est plus pratique, puisque les paramètres d'état du côté des gaz brûlés  $\rho_b$  et  $Y_{k,b}$  ne sont pas nécessaires. Ces paramètres peuvent être difficiles à prévoir pour les mélanges où l'on observe un déséquilibre ou une non-homogénéité dans les gaz brûlés. La figure (3.8) montre à la fois l'évolution de la vitesse de consommation moyenne dans l'espace (Eq 3.34) et la vitesse de déplacement de flamme pondérée par la densité  $\widetilde{S}_{d,b}$  (Eq. 3.6). Les données sont tracées par rapport au taux d'étirement de la flamme pour une flamme de  $CH_4/air$  à  $P = 1 atm$ ,  $T = 300 K$  (Fig. 3.8a), et pour les flammes d'iso-octane/air aux mêmes conditions thermodynamiques (Fig. 3.8b). Pour chaque cas, en fonction de la richesse, les données sont obtenues en utilisant les espèces déficientes. Les valeurs de la vitesse de combustion laminaire  $S_l^0$  (Eq. 3.1) sont représentées par une croix.

La vitesse spatiale moyenne de consommation  $S_{c,k}$  (Eq. 3.34) montre un comportement

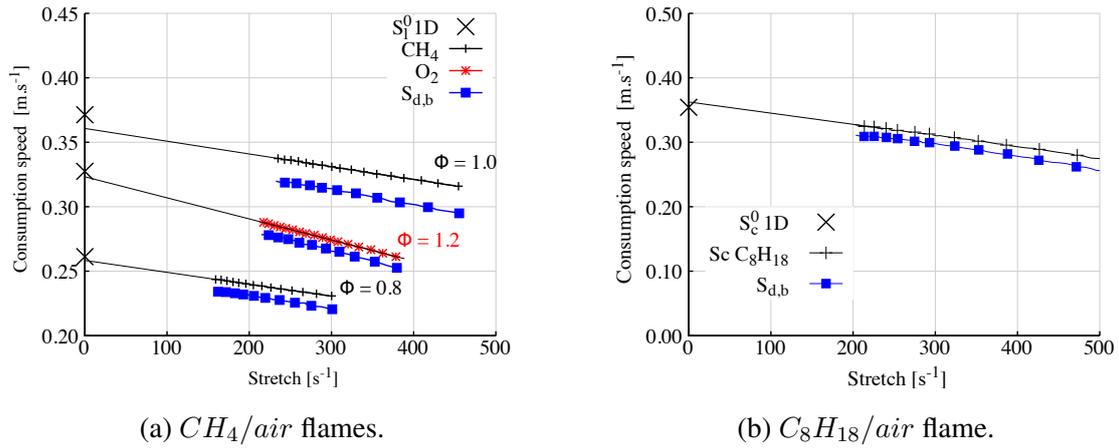


FIGURE 3.8 – Comparaison de la vitesse de consommation moyenne dans l’espace de l’équation (3.34), et de la vitesse de déplacement de flamme pondérée par la densité de l’équation (3.6). Les vitesses de consommation moyennes dans l’espace sont tracées pour les espèces déficientes CH<sub>4</sub>/air ou O<sub>2</sub>. La flammes de CH<sub>4</sub>/air à  $P = 1 \text{ atm}$ ,  $T = 300 \text{ K}$  et  $\phi = 0.8, 1$  et  $1.1$ .

linéaire par rapport au taux d’étirement de la flamme. Pour la flamme CH<sub>4</sub>/air, la sensibilité à l’étirement, *i.e.* la longueur de *Markstein*  $\ell_c$  augmente avec la richesse [17]. En comparant les valeurs de  $S_{c,k}$  et  $\widetilde{S}_{d,b}$  à étirement nul, on peut voir que la vitesse de consommation moyenne dans l’espace sera plus précise pour prédire la vitesse de combustion laminaire non étirée. En effet, pour  $S_c$  l’extrapolation à l’étirement zéro est très proche de la valeur  $S_l^0$  de la vitesse de combustion laminaire. Par conséquent, la capacité de déterminer avec précision la vitesse de combustion laminaire  $S_l^0$  à partir de la vitesse de consommation spatiale moyenne est prouvée. Les données de  $\widetilde{S}_{d,b}$  semblent montrer un comportement non linéaire face à l’étirement de la flamme à faible taux d’étirement. Cela peut souligner la sensibilité de  $S_{d,b}$  au confinement de la flamme, comme mentionné par [17]. Pour aller plus loin dans l’analyse, la figure (3.9) rapporte les simulations de la vitesse de consommation  $S_c$  et  $\widetilde{S}_{d,b}$ , pour un cas simulé jusqu’à 4 cm de rayon de flamme. Pour la vitesse de consommation, le RHS et le LHS de l’équation (3.34) sont tracés. La même configuration, c’est-à-dire le rayon interne de la chambre, la méthode d’allumage et le schéma cinétique sont utilisés. La taille du maillage est modifié à 20  $\mu\text{m}$  afin de réduire le nombre d’heures CPU nécessaires pour la simulation de flamme. Le cas d’une flamme stoechiométrique méthane/air est présenté. Comme le montre la figure (3.9) on peut voir que :

- Les deux termes RHS et LHS de l’Eq. (3.34), provenant de la vitesse de développement analytique, sont toujours identiques même à faible vitesse d’étirement lorsque le confine-

ment apparaît.

- La vitesse de consommation de flamme présente clairement un comportement linéaire. Cette affirmation est confirmée et prouvée pour les grands rayons de flamme, c'est-à-dire un faible taux d'étirement. De plus, la vitesse de consommation correspond à la valeur plane 1D des simulations CANTERA. On peut donc dire que la vitesse de consommation n'est pas sensible au confinement. Cela est en parfait accord avec le travail précédent de *Bonhomme* et al.. [17].
- Contrairement à la vitesse de consommation,  $\widetilde{S}_{d,b}$  qui montre clairement un comportement non linéaire pour les grands rayons de flamme. L'extrapolation jusqu'à l'étirement nul est donc impossible en utilisant des flammes à rayons larges.

Par conséquent, la vitesse de consommation moyennée dans l'espace, en utilisant l'espèce déficiente, semble être un bon candidat pour déterminer avec précision la vitesse de combustion laminaire et la longueur de *Markstein* associée à partir de données expérimentales. Cependant, d'un point de vue expérimental, le défi réside dans la difficulté de mesurer avec suffisamment de précision le terme de compression  $\frac{1}{\rho_u} \frac{d\rho_u}{dt}$ .

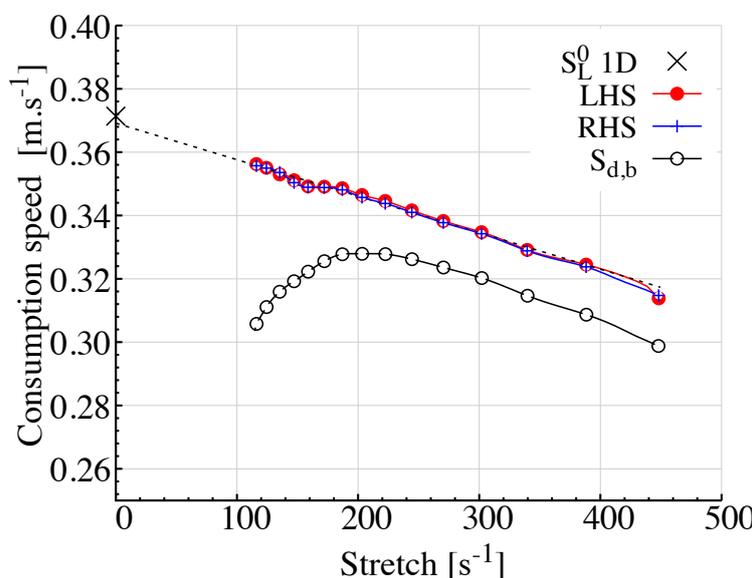


FIGURE 3.9 – Comparaison de la vitesse de consommation moyenne de l'équation (3.34) et de la vitesse de déplacement de flamme pondérée par la densité de l'équation (3.6). Flamme CH<sub>4</sub>/air à  $P = 1 \text{ atm}$ ,  $T = 300 \text{ K}$  et  $\phi = 1.0$

### 3.8 Conclusion

Ce chapitre rapporte une dérivation rigoureuse de la relation entre la vitesse de consommation moyenne dans l'espace et la vitesse de flamme absolue pour les configurations de flamme sphérique en expansion. Les géométries ouvertes et confinées sont prises en compte. Ce développement a permis d'identifier deux rayons équivalents, l'un à partir d'une surface et l'autre à partir d'une intégration de volume. L'expression générale de la vitesse de consommation en géométries confinées (Eq. 3.33) permet de retrouver les définitions classiques développées dans la littérature au fil des années. Nous avons souligné que le développement analytique de la vitesse de consommation est exempt d'hypothèses ou d'approximations restrictives (étirement ou états gazeux thermodynamiques) qui sont généralement faites dans les approches classiques. De ce fait, l'expression de la vitesse de consommation semble être un bon candidat pour évaluer les données de vitesse de combustion ainsi que l'étirement de la sensibilité à la flamme  $\ell_c$ . La validation des expressions analytiques se fait à l'aide d'un outil numérique. Ce nouvel outil a été développé à partir du code YALES2. Des simulations DNS 3D de flammes sphériques en expansion ont été réalisées. Trois cas avec différentes richesses (pauvre, riche et stœchiométrique) pour les flammes méthane/air ont été simulés. Tout d'abord, les vitesses de déplacement par rapport aux gaz frais et brûlés sont comparées aux données expérimentales. Un très bon accord est observé. Ensuite, les données numériques pour les flammes  $CH_4/air$ , en utilisant l'expression analytique développée dans cette étude (Eq. 3.33), sont analysées. Les résultats ont montré que n'importe quelle espèce, réactifs ou produits, peut évaluer l'expression analytique de la vitesse de consommation. De faibles différences sont observées en fonction de l'espèce considérée. Néanmoins, la différence diminue avec l'avancement du front de flamme et elle est du même ordre de grandeur que l'incertitude inhérente aux mesures expérimentales. De surcroît, il a été démontré que les deux rayons introduits pour le développement de la vitesse de consommation,  $R_{eq,DS}$  et  $R_{eq2,DS}$  sont très similaires dans la fourchette de  $10 < R < 20 \text{ mm}$ . Cette plage de rayons correspond à la plage expérimental typique. De plus, les isothermes correspondants pour  $R_{eq,DS}$  et  $R_{eq2,DS}$  sont très proches et comparables à l'isotherme d'évaporation des gouttelettes de l'huile utilisées dans les expériences tomographiques. Ainsi, l'expression analytique de la vitesse de consommation, en considérant une espèce déficiente (Eq. 3.34), apparaît fiable pour une utilisation à des fins expérimentales. Dans le cas où le terme de compression  $\frac{1}{\rho_u} \frac{d\rho_u}{dt}$  peut être mesuré expérimentalement avec une précision suffisante, le développement analytique de la vitesse de consommation conduirait donc à une estimation précise et sans hypothèse de la

## Étude de la vitesse de consommation d'une flamme laminaire sphérique en expansion

vitesse de combustion et de la longueur de *Markstein*  $\ell_c$ .

Au terme de ce chapitre, les méthodes numériques d'intégration spatiale et temporelle, présentées dans le chapitre 2, sont validées sur une configuration de flamme sphérique monophasique en expansion. Cela est réalisé en utilisant des schémas cinétiques détaillés, avec des temps caractéristiques différents, sur un maillage suffisamment fin pour des calculs DNS 3D. Avant d'aller vers la simulation de flammes de spray, le chapitre qui suit présentera la modélisation de la phase dispersée des flammes diphasiques et un modèle d'évaporation multi-composants.



# MODÉLISATION DE L'ÉVAPORATION D'UNE GOUTTE ISOLÉE MULTI-COMPOSANTS

---

## Sommaire

---

<b>4.1</b>	<b>Introduction</b>	<b>106</b>
<b>4.2</b>	<b>Modélisation numérique de la phase dispersée</b>	<b>106</b>
4.2.1	Classification des écoulements particuliers	107
4.2.2	Description Euler-Euler	108
4.2.3	Description Euler-Lagrange	109
4.2.4	Cinématique de la goutte	110
<b>4.3</b>	<b>Modélisation de la composition d'une goutte d'un fuel multi-composants</b>	<b>112</b>
4.3.1	Les surrogates	113
4.3.2	Modèles d'une goutte de fuel liquide	114
<b>4.4</b>	<b>Évaporation d'une goutte de carburant isolée</b>	<b>117</b>
4.4.1	Hypothèses du modèle	119
4.4.2	Propriétés thermodynamiques et de transport	120
4.4.3	Modèle de la phase gazeuse	126
4.4.4	Modèle de la phase liquide	131
4.4.5	Couplage avec la phase gazeuse	133
<b>4.5</b>	<b>Conclusion</b>	<b>136</b>

---

### 4.1 Introduction

Dans les écoulements réactifs diphasiques, plusieurs phénomènes physiques se produisent simultanément avec des échelles de temps et d'espace très variables. Ces phénomènes comprennent l'injection du combustible liquide, son atomisation en ligaments (atomisation primaire) puis en petites gouttes (atomisation secondaire) et finalement l'évaporation des gouttelettes qui favorise le mélange du carburant gazeux avec l'air de la chambre. Ce chapitre est consacré à la description des écoulements multi-phasiques rencontrés dans la combustion de sprays ainsi qu'une description détaillée du processus d'évaporation des gouttes issues de l'atomisation. Le chapitre se focalise sur le modèle d'évaporation d'une goutte isolée, multi-composants en se basant sur le modèle classique de *Spalding* [210] implémenté dans le code YALES2 durant les travaux de thèse de *N. Enjalbert* [64], puis utilisé et validé sur des cas académiques et industriels dans le cadre des thèses de *B. Farcy* [67] et *L. Guedot* [92]. Ce modèle est ici étendu pour prendre en considération la convection naturelle autour de la goutte décrite par le modèle d'*Abramzon et Sirignano* [3].

### 4.2 Modélisation numérique de la phase dispersée

Le combustible stocké sous forme d'un volume liquide est injecté dans la chambre de combustion sous forme d'un spray, via un processus d'atomisation à travers lequel le jet liquide est désintégré en ligaments puis en petites gouttes. L'atomisation est générée par la quantité de mouvement du liquide, l'exposition à une vitesse élevée du gaz ou par l'énergie mécanique extérieure appliquée par un dispositif d'injection se servant de la vibration et/ou de la rotation. L'aspect aléatoire de ce processus d'injection fait que le spray obtenu est caractérisé par une distribution de taille de gouttes qui varie selon l'application visée.

Dans le cas de la combustion dans les moteurs diesel ou à allumage commandé, les turbines à gaz, les moteurs fusées et les fours industriels, le rendement énergétique requiert une atomisation efficace pour augmenter la surface d'échange entre le fuel liquide et le gaz afin d'atteindre des taux élevés d'évaporation et de mélange. Les écoulements diphasiques réactifs rencontrés dans les chambres de combustion sont constitués d'une phase porteuse gazeuse et d'une phase liquide dispersée. Une modélisation directe de ces écoulements diphasiques, où toutes les échelles de temps et d'espace seraient résolues, est aujourd'hui hors de portée des

plus gros super-calculateurs. Ce coût limite drastiquement la plage d'utilisation d'une telle approche et la cantonne à des cas canoniques simples. Pour des cas industriels ou semi-industriels, d'autres approches de modélisation sont proposées dans la littérature afin de pallier ce problème de coût. Les écoulements gaz/particules (gouttes) peuvent être décrits en résolvant les équations de continuité, de quantité de mouvement et d'énergie, modifiées pour tenir compte des interactions avec la phase dispersée. Ces interactions comprennent le transfert de masse entre la phase liquide et la phase gazeuse ainsi que les transferts de quantité de mouvement et d'énergie (chaleur). Les méthodes de modélisation de ces écoulements sont réparties en deux grandes familles : l'approche Eulérienne et l'approche Lagrangienne [106, 141, 149, 165, 197]. Elles sont décrites brièvement dans la section 4.2.2 et la section 4.2.3.

### 4.2.1 Classification des écoulements particuliers

Un jet liquide suffisamment puissant injecté dans un moteur à combustion interne, se désintègre en petites gouttes, entraîne et met en mouvement le gaz environnant. En retour, le gaz entraîne avec lui les gouttes dans sa course ou les freine dans leurs trajectoires et réduit leur résistance selon s'il est injecté dans la même direction que le spray ou s'il est statique. Il est donc important de s'intéresser à l'interaction entre les gouttes et le gaz. Cette interaction est particulièrement significative lorsque la masse totale et la quantité de mouvement des particules sont comparables à celles du gaz, et lorsque la taille des particules est suffisamment petite pour que le couplage d'une particule avec le gaz soit important.

*Elghobashi* [61, 62] introduit une classification des écoulements particuliers, selon la charge des particules dans la phase porteuse (la fraction volumique) et le nombre de *Stokes* associé, définie comme suit :

$$St = \frac{\tau_p}{\tau_g}, \quad (4.1)$$

où  $\tau_p$  est le temps de relaxation des particules ou, autrement dit, le temps de réponse des particules à l'écoulement du gaz et  $\tau_g$  le temps caractéristique de l'écoulement gazeux c'est-à-dire le temps que met le gaz pour répondre aux perturbations générées par l'écoulement particulaire.

Plus l'écoulement est chargé en particules, plus les processus physiques mis en jeu deviennent complexes et plus ils font intervenir des collisions simples ou multiples qui nécessitent une modélisation.

**One-way coupling :** pour les écoulements peu chargés en particules de petites tailles, l'impact de l'écoulement sur les particules est important, mais le transfert de quantité de mouvement des particules vers l'écoulement reste négligeable. Seule la modélisation des forces aérodynamiques sur la particule est nécessaire, c'est le One-way coupling.

**Two-way coupling :** lorsque la densité en particules augmente, tout en restant dans le domaine d'un écoulement particulaire dispersé, les particules modifient l'écoulement en agissant sur sa quantité de mouvement. La rétroaction des forces aérodynamiques doit donc être prise en compte, c'est le Two-way coupling.

**Four-way coupling :** pour les écoulements particuliers denses, les particules vont être amenées à se rencontrer fréquemment. Les particules échangent de la quantité de mouvement entre elles, soit directement par collision, soit par passage proche en perturbant la couche limite formée autour des particules. Cette situation est dénommée Four-way coupling.

### 4.2.2 Description Euler-Euler

La description Eulérienne d'un spray considère l'ensemble des particules comme un milieu continu respectant un système d'équations de conservation. Cette description est aussi appelée « modèle à deux fluides » [57, 63]. Elle consiste à transporter les propriétés locales moyennes de la phase liquide. L'évaluation des grandeurs particulières nécessite le transport d'équations supplémentaires dans lesquelles la modélisation est basée sur des hypothèses plus ou moins restrictives [149]. Les méthodes basées sur l'approche Eulérienne sont largement répandues dans les modèles RANS car leur principal avantage réside dans le fait qu'elles utilisent le même formalisme et la même résolution que la phase porteuse. Les algorithmes de traitement et de résolution numérique de la phase gazeuse peuvent être utilisés de la même manière pour la phase dispersée, ce qui simplifie son développement dans les codes parallélisés. En outre, les deux phases partagent le même maillage, ce qui implique un couplage direct sans aucune interpolation entre la phase liquide et gazeuse. Le coût de calcul de la phase dispersée sera donc similaire au coût de calcul de la phase porteuse, et indépendant du nombre de particules et de leur répartition.

L'approche « Two-Fluid (TF) » est utilisée dans le cas d'écoulements de particules à faible nombre de Stokes. Elle est dite mono-disperse en vitesse et en taille de goutte car les propriétés moyennes de la phase liquide sont uniquement définies par sa densité en nombre de gouttes et sa

vitesse moyenne. Cette approche a été étendue aux écoulements turbulents [71] et est nommée Formalisme Eulérien Mésoscopique (FEM). Elle repose sur une décomposition statistique de la vitesse des particules en une vitesse moyenne de la phase liquide, appelée vitesse corrélée ou mésoscopique, et une vitesse propre à chaque particule, appelée vitesse décorrélée.

À l'image de la polydispersion en vitesse, une polydispersion en taille de gouttes est introduite lorsque le spray présente une importante dispersion des diamètres de goutte. L'approche « Two-Fluid » devient alors une approche « multi-fluides » qui divise les particules en plusieurs classes [121]. Il faut alors résoudre autant d'équations de la phase liquide que de classes considérées, ce qui pénalise le coût de calcul. Il est ensuite possible de combiner l'approche « multi-fluides » et le formalisme Eulérien mésoscopique (approche FEM) pour prendre en compte à la fois la polydispersion en vitesse et la polydispersion en taille de goutte [229].

Les méthodes à PDF (Probability Density Function) présumée [7] consistent à utiliser des lois de probabilité pour modéliser les distributions en taille, en température et en vitesse de façon à les rendre polydisperses suivant ces trois paramètres (une loi log-normale pour la distribution en taille et une distribution gaussienne pour la température et la vitesse par exemple [149]).

D'autres inconvénients, tels que les trajectoires complexes des particules au sein d'un même volume de contrôle, sont également difficiles à modéliser dans le formalisme Eulérien. Cependant, la méthode de quadrature DQMOM (Direct Quadrature Method of Moment) [139], bien que coûteuse, permet de prendre en compte les croisements de trajectoires [52]. Le lecteur pourra consulter [229] ou [206] pour de plus amples détails sur les différentes méthodes de quadrature dans l'approche Eulérienne.

### 4.2.3 Description Euler-Lagrange

Dans l'approche Lagrangienne, le brouillard de gouttes n'est plus considéré comme un milieu continu mais comme un ensemble de particules physiques discrètes. Chaque particule possède sa propre trajectoire et des propriétés individuelles (vitesse, température, diamètre) sur lesquelles sont appliquées des échanges de masse, de quantité de mouvement et d'énergie avec la phase porteuse. Ce suivi individuel permet de simuler indépendamment l'évaporation de chacune d'entre elles. Puisque l'emplacement des particules discrètes peut ne pas coïncider avec les nœuds du maillage, il est nécessaire d'utiliser des méthodes d'interpolation et de projection performantes afin de limiter les erreurs numériques liées au couplage. Cette approche en *two-way*

*coupling* tient compte de la rétroaction des particules sur la phase gazeuse par l'intermédiaire de termes sources calculés pour chaque particule et réintroduits aux nœuds du maillage de la phase porteuse [59, 61].

Cette approche offre l'avantage de s'affranchir des effets de polydispersion ou des problèmes de croisements de trajectoire inhérents à l'approche Eulérienne. Afin de gagner en coût CPU, on peut regrouper un certain nombre de gouttes discrètes en une particule numérique, dont le poids numérique correspond au nombre de particules physiques décrites par ce groupe. Toutefois, l'augmentation du poids numérique des particules se fait au détriment de la précision du calcul [64]. Une autre difficulté réside dans le calcul parallèle puisque la répartition des particules est souvent différente de la distribution des cellules discrétisant la phase Eulérienne. Un processeur pourrait avoir une grande quantité de particules à traiter tandis que les autres n'en auraient que très peu dans la zone proche injecteur. Des algorithmes de partitionnement de maillage efficaces sont donc nécessaires afin d'éviter les problèmes de « load-balancing » dus à la répartition inhomogène des gouttes dans le domaine de calcul [141].

Cette méthode est largement validée en LES pour des simulations académiques [53, 71, 166, 189, 214] ou des configurations réelles de type industriel [67, 203].

L'approche Euler-Lagrange en *two-way coupling*, développée dans le code YALES2 dans le cadre de différentes thèses [64, 67, 92], sera privilégiée pour les simulations à venir. Le *four-way coupling*, qui reprend le formalisme du *two-way coupling* en intégrant l'interaction entre particules, n'est pas utilisé car l'hypothèse de dilution est respectée dans les zones d'intérêt. La prise en compte des collisions notamment n'est pas nécessaire au vu des faibles fractions volumiques considérées.

### 4.2.4 Cinématique de la goutte

La modélisation de la phase liquide est basée sur l'approche Lagrangienne des particules ponctuelles. Cette approche est justifiée car les gouttelettes de liquide sont pour la plupart sphériques dans la zone d'intérêt, suffisamment diluées et sont plus petites que la taille de la grille. Les équations de mouvement pour une gouttelette unique sont :

$$\frac{d\mathbf{x}_p}{dt} = \mathbf{u}_p \quad (4.2)$$

$$\frac{dm_p \mathbf{u}_p}{dt} = \mathbf{F}_p \quad (4.3)$$

où  $\mathbf{x}_p$  est la position de la particule  $p$ ,  $\mathbf{u}_p$  sa vitesse.

La masse de la particule  $m_p$  est donnée en fonction de son diamètre en se basant sur l'hypothèse de la sphéricité de la goutte.

$$m_p = \rho_p \frac{\pi}{6} d_p^3 \quad (4.4)$$

$\mathbf{F}_p$  est la résultante des forces extérieures, classées en trois catégories [77] :

- force de gravitation
- forces aérodynamiques : force de portance et de la traînée
- force de collision avec les parois et/ou avec les autres particules

Dans le cadre de ce travail , les forces de collisions sont négligées et la force  $\mathbf{F}_p$  se décompose en deux contributions :

$$\mathbf{F}_p = \mathbf{F}_p^G + \mathbf{F}_p^A \quad (4.5)$$

$\mathbf{F}_p^G$  désigne la force de gravité et  $\mathbf{F}_p^A$  la force aérodynamique de traînée.

- Poussé d'*Archimède* :

$$\mathbf{F}_p^G = (\rho_p - \rho) \frac{\pi}{6} d_p^3 \mathbf{g} \quad (4.6)$$

Avec  $\rho$  la masse volumique de la phase gazeuse,  $\rho_p$  la masse volumique de la phase liquide et  $\mathbf{g}$  désigne l'accélération de la pesanteur.

Dans le cas d'un écoulement particulaire dans un milieu gazeux,  $\rho_p \gg \rho$ , les effets de flottabilité sont négligés. L'équation 4.6 devient  $\mathbf{F}_p^G = m_p \mathbf{g}$ . De plus si l'écoulement porteur est fortement turbulent les forces de gravité seront également négligées.

- Traînée : dans ce modèle, uniquement la force de traînée d'une goutte isolée est prise en compte, les forces générées par le mouvement des autres particules dans l'écoulement

sont négligées. Dans le cadre de ses hypothèses, la force de traînée d'une goutte isolée exercée par le gaz sur la particule est exprimée par la relation suivante,

$$\mathbf{F}_p^A = m_p \frac{1}{\tau_p} (\mathbf{u}_p - \mathbf{u}_\infty) \quad (4.7)$$

où  $\mathbf{u}_\infty$  représente la vitesse du fluide non perturbé au voisinage de la gouttelette et  $\tau_p$  est un temps de relaxation et dépend du régime d'écoulement, caractérisé par le nombre de *Reynolds* particulaire :

$$Re_p = \frac{d_p |\mathbf{u}_p - \mathbf{u}_\infty|}{\nu} \quad (4.8)$$

$$\tau_p = \frac{4}{3C_D Re_p} \frac{\rho_p d_p^2}{\rho \nu} \quad (4.9)$$

avec  $d_p$  le diamètre de la goutte et  $\nu$  sa viscosité cinématique.

Selon les différents régimes d'écoulements, de nombreuses corrélations existent pour le coefficient de traînée  $C_D$  [72]. Dans le régime  $1 < Re_p < 1000$ , la corrélation empirique de *Shiller et Naumann* [119] est utilisée. Si  $Re_p > 1000$  et selon *Clift et al.* [40], le coefficient de traînée  $C_D$  n'est pas affecté par le sillage derrière la particule et reste constant. Le coefficient  $C_D$  correspondant à chaque régime est donné par les relations ci-dessous :

$$\left\{ \begin{array}{ll} C_D = \frac{24}{Re_p}, & Re_p < 1 \\ C_D = \frac{24}{Re_p} + \frac{3.6}{Re_p^{0.313}}, & 1 < Re_p < 1000 \\ C_D = 0.44, & 1000 < Re_p < 200000 \end{array} \right. \quad (4.10)$$

### 4.3 Modélisation de la composition d'une goutte d'un fuel multi-composants

Les différents secteurs industriels utilisent des carburants liquides comme l'essence, le kérosène (carburateurs), le diesel et même les carburants d'origines non-fossiles. Ces carburants conventionnels sont des mélanges très complexes d'une centaines d'espèces, réparties sur différentes catégories d'hydrocarbures, les n-alcanes, les iso-alcanes, les cyclo-alcanes, les aroma-

tiques, des composés polycycliques etc.

Malgré la progression incessante de la puissance de calcul, la modélisation détaillée de la combustion de ces combustibles réels reste extrêmement difficile pour deux raisons : premièrement, il est presque impossible d'identifier toutes les molécules individuelles présentes dans les combustibles réels ainsi que leurs compositions. Deuxièmement, on ne dispose pas d'informations détaillées sur la cinétique chimique de tous les composants. Si toutes les espèces identifiées sont incluses dans les études de simulation des différents processus physiques, le temps de calcul serait prohibitif. C'est dans cette perspective que des méthodes numériques et des algorithmes d'optimisation de la simulation ont été développés afin d'exploiter au mieux les ressources informatiques. Cependant, la difficulté de modélisation et le coût élevé de la simulation constituent encore un réel challenge. Cela est dû, notamment, à la complexité de la composition des combustibles.

Pour surmonter ces défis, la recherche dans le domaine de la cinétique chimique a permis de mettre au point des combustibles de substitution appelés « surrogates ». Ils ont pour objectif de simplifier le processus de combustion des combustibles réels en représentant le carburant par un mélange de quelques hydrocarbures purs dont les propriétés thermophysiques, thermochimiques et cinétiques chimiques sont bien connues.

### 4.3.1 Les surrogates

Un surrogate est un carburant constitué d'un nombre limité de composants purs. Son comportement correspond à celui d'un carburant réel qui contient un nombre très élevé de composants. Il est formulé pour imiter une ou plusieurs propriétés particulières du combustible cible, comme l'évaporation [1, 182, 201, 247], les propriétés thermodynamiques [24, 60, 96, 164, 196] ou les caractéristiques de combustible réel imité [29, 79, 144, 218]. Bien qu'un surrogate nécessite plus de composants purs pour combiner toutes ces propriétés et correspondre au carburant conventionnel cible, la limitation de leur nombre reste tout de même nécessaire pour simplifier leur étude et représenter la cinétique chimique des mélanges complets des carburants cibles.

Il existe plusieurs méthodes proposées dans la littérature pour spécifier le nombre et les pourcentages des composants dans un surrogate. Une approche très répandue consiste à spécifier des composés de chaque classe chimique dans un carburant cible [175]. La figure (4.1) montre quelques classes chimiques rencontrées dans le diesel.

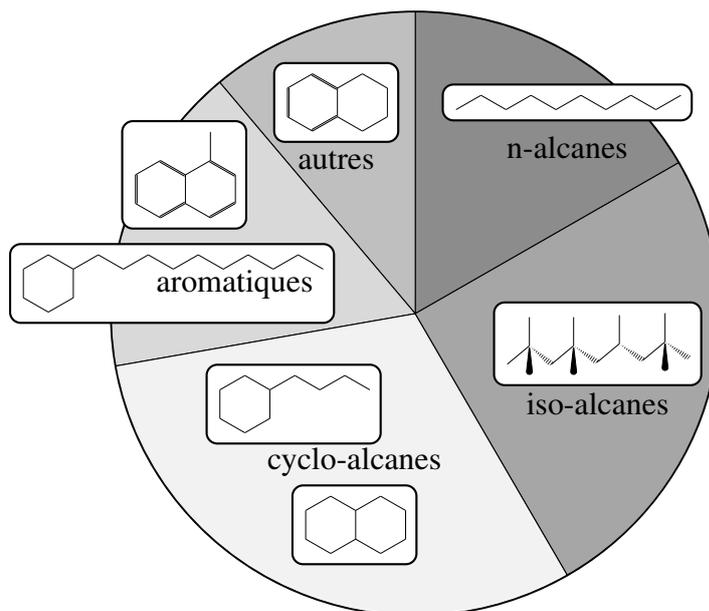


FIGURE 4.1 – Classes d'hydrocarbures rencontrées dans le diesel [175].

### 4.3.2 Modèles d'une goutte de fuel liquide

Dans un moteur à combustion, le carburant liquide est injecté dans la chambre de combustion où il se désintègre en petites gouttes via le processus d'atomisation primaire et secondaire. Les gouttes forment ainsi un nuage qui s'évapore pour créer des composants gazeux, correspondant à la composition de la phase liquide. Ces composants issus de l'évaporation viennent s'ajouter au mélange gazeux environnant.

L'étude du processus d'évaporation, nécessite une modélisation de la goutte liquide selon sa composition. La figure (4.2) résume quelques modèles d'une goutte de carburant, basés sur la composition dans la phase liquide et dans le film gazeux généré lors du processus d'évaporation. Les composants liquides sont notés  $Y_{l,i}$ , les composants gazeux  $Y_{g,i}$ , les surrogates liquides  $S_{l,i}$ , les surrogates gazeux  $S_{g,i}$  et les composants gazeux issus de l'évaporation du surrogate liquide  $S_{l,i}$  sont notés  $Y_{g,i}^{S_{l,1,2,\dots}}$ .

Si l'on considère le cas le plus basique d'un carburant liquide pur, constitué d'une seule espèce chimique, la goutte mono-composant est représentée sur le schéma (a). Elle est constituée d'un seul composant  $Y_{l,1}$  côté phase liquide qui s'évapore pour donner une espèce  $Y_{g,1}$  dans la phase gazeuse. De la même manière, un carburant liquide pur multi-espèces est schématisé par une goutte multi-composants liquides, constituée de  $Y_{l,1}, Y_{l,2} \dots$  dans l'exemple (b). En s'évaporant, la goutte libérera des composants gazeux correspondants  $Y_{g,1}, Y_{g,2}, \dots$

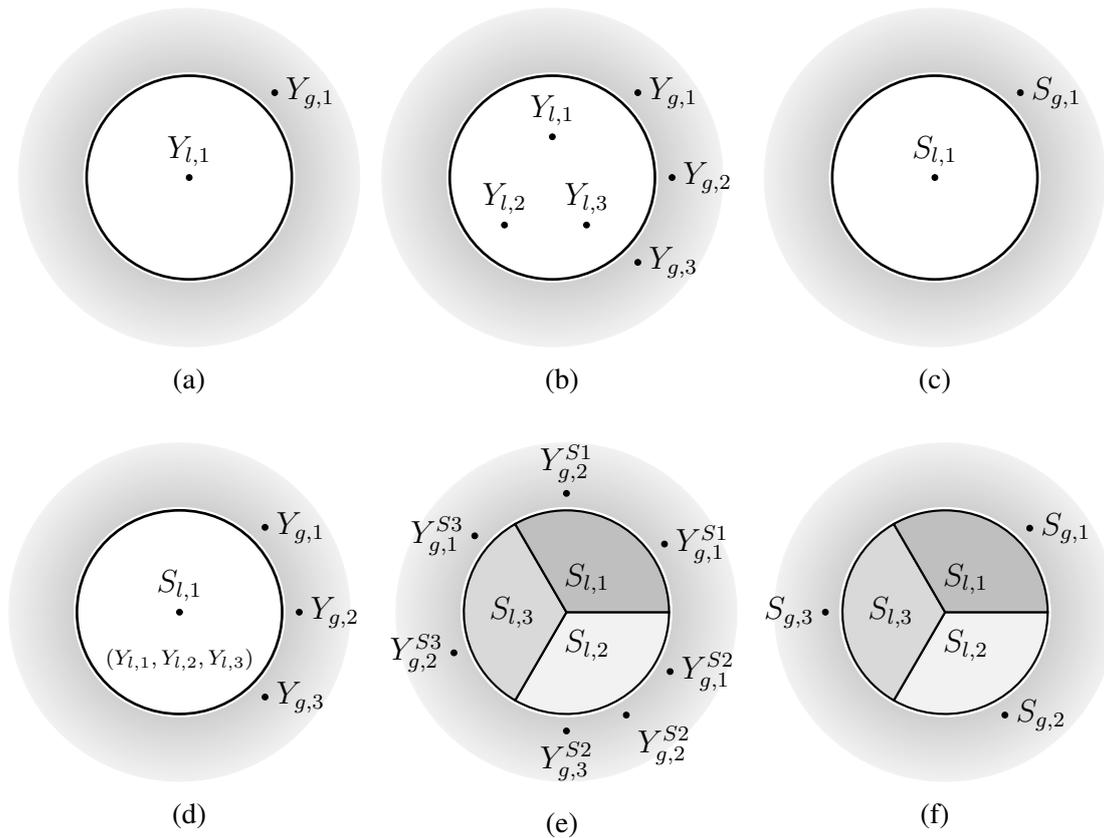


FIGURE 4.2 – Schéma illustrant la composition d'une goutte d'un carburant liquide. Modélisation d'une goutte, composition liquide / gazeuse : (a) mono-composant, (b) multi-composant, (c) surrogate liquide/surrogate gazeux, (d) surrogate liquide / mélange gazeux multi-composants, (e) mélange de surrogates liquides / mélange gazeux multi-composants et (f) mélange de surrogates liquides / mélange de surrogates gazeux.

Quand le nombre d'espèces qui constituent le carburant augmente considérablement, il devient nécessaire d'utiliser un fuel surrogate. Cela dans le but de simplifier la modélisation de la thermodynamique et de la cinétique et réduire le temps de calcul comme évoqué précédemment.

La littérature scientifique nous fournit différents fuels surrogates pour un carburant donné. Le type de surrogate utilisé dépend de l'application finale visée, des propriétés d'un spray après atomisation, de la cinétique chimique ou de la simulation de la combustion [168, 175, 183]. Comme exemple, un surrogate mono-composant comme le n-heptane est utilisé pour la cinétique de combustion du diesel [45, 128, 213] et le n-dodécane pour les propriétés physiques du carburant diesel [9, 51, 167]. Cependant, un surrogate mono-composant ne peut pas représenter complètement, à lui seul, les propriétés physico-chimiques et les propriétés de la combustion. Des études récentes [68, 93, 175, 176, 234] présentent des surrogates multi-composants dont la composition peut être schématisée comme sur la figure (d). Le but est de

reproduire simultanément la majorité des propriétés du combustible cible, comme ceux étudiés ici [2, 4, 104, 108, 152, 153].

Dans le cas du kérosène, la phase gazeuse peut être modélisée en utilisant par exemple soit : le schéma cinétique *2S\_KERO\_BFER* [74] ou bien le schéma cinétique basé sur le travail de *Luche* [132]. Dans le premier cas, le surrogate du kérosène liquide est représenté par un seul composant liquide noté KERO comme schématisé sur le modèle (c) de la figure (4.2). En s'évaporant, celui-ci libère un seul composant gazeux du même nom dans le mélange environnant. Dans le deuxième cas, c'est un composant marqué KERO-LUCHE qui constitue un surrogate du kérosène liquide. Il est construit à base de trois composants, dont les pourcentages en masse sont :  $nC_{10}H_{22}$  (76.6%),  $C_9H_{12}$  (13.2%) et  $C_9H_{18}$  (10.1%). Les propriétés de KERO-LUCHE sont calculées comme la moyenne des propriétés de ses trois composants. Lors de l'évaporation d'une goutte de ce surrogate, trois espèces gazeuses se mélangeront au gaz autour de la goutte, selon le modèle (d).

Nous pouvons citer également d'autres fuels surrogates du kérosène : le Jet A-1 utilisé dans l'aviation civile et défini par la norme internationale AFQRJOS<sup>1</sup>. Il est composé de n-décane (69%), n-propylcyclohexane (11%) et n-propylbenzène (20%) [194]. Le carburant JP-8, utilisé dans l'aviation militaire américaine, est modélisé par différents surrogates avec un nombre différent de composants : surrogate à 12 composants [142, 202], 5 composants [43, 228] etc. Pour plus de détails sur les surrogates du kérosène et leurs compositions, le lecteur peut se référer à la thèse de *L. Boulet* [18].

Les derniers modèles de la composition de la goutte (e,f) sont une combinaison des autres modèles. Ils modélisent un mélange de surrogates pour constituer un carburant multi-composants [60, 96, 176].

Un modèle d'évaporation multi-composants doit idéalement être capable de prendre en compte toutes les configurations moyennant des hypothèses sur l'évaporation des composants.

---

1. AFQRJOS pour Aviation Fuel Quality Requirements for jointly Operated Systems

### 4.4 Évaporation d'une goutte de carburant isolée

Le processus d'évaporation des gouttelettes comprend deux phases principales : (1) détachement de molécules de carburant de la surface de la gouttelette dans le gaz à proximité immédiate des gouttelettes et (2) diffusion de la vapeur de carburant de la surface depuis la gouttelette vers le gaz ambiant. La modélisation mathématique du premier processus est beaucoup plus complexe que le deuxième. En se reposant sur l'hypothèse que la vapeur de carburant à proximité de la surface des gouttelettes est toujours saturée, la modélisation s'est concentrée principalement sur le deuxième processus, ignorant les détails du premier. Ainsi le taux d'évaporation du combustible est égal au taux de diffusion du combustible de la surface des gouttelettes au gaz ambiant. Les modèles qui en découlent sont connus sous le nom de modèles hydrodynamiques de l'évaporation des gouttelettes [199].

Le modèle le plus simple pour l'évaporation des gouttelettes a été proposé par *Maxwell* en 1877 [76]. Comme introduit au début de ce chapitre, ce modèle autrement appelé classique ou modèle de *Spalding* est le premier modèle d'évaporation utilisé dans le code YALES2. Selon ce modèle le taux d'évaporation est gouverné uniquement par le processus de diffusion. En 1989 *Abramzon et Sirignano* [3] proposaient un autre modèle d'évaporation basé sur le modèle classique. Ce nouveau modèle prend en compte les effets de propriétés thermophysiques variables, le nombre de *Lewis* non unitaire dans le film de gaz et l'effet du flux de *Stefan* sur la chaleur et le transfert de masse entre la gouttelette et le gaz [3]. Les principales hypothèses de ces modèles sont rappelées ci-dessous (Cf. §4.4.1).

Le processus d'évaporation par diffusion est modélisé en considérant une goutte sphérique. L'écoulement gazeux autour de la goutte est supposé purement radial.

La vapeur de la goutte se propage et se diffuse loin de la surface de la goutte. Le transfert de chaleur est dirigé radialement vers la surface de la goutte contrairement à la convection. À la surface des gouttes, une partie de la chaleur du gaz est utilisée pour le changement de phase et le reste est dirigé vers l'intérieur du liquide. Cela conduit à l'augmentation de la température du liquide à la surface et à l'intérieur de la goutte, conduisant à l'évaporation de la goutte en éjectant de la vapeur à l'interface liquide/gaz et génère un flux convectif appelé convection de *Stefan* mentionné dans le paragraphe précédent.

Le processus d'évaporation décrit ci-dessus est associé au processus de transfert thermique. Si la température de la goutte est inférieure à celle du milieu ambiant, un transfert thermique s'effectue par conduction du milieu ambiant vers la surface de la goutte. Cet apport d'énergie à la goutte va servir, en première partie, à vaporiser la goutte, la partie restante sert à chauffer la goutte à condition que l'apport en énergie par le transfert thermique soit supérieur à la chaleur latente de vaporisation. Si la température de surface de la goutte est supérieure à celle du milieu ambiant, le processus de transfert thermique a alors lieu de la surface de la goutte vers le milieu ambiant. Cette énergie qui quitte la goutte et la chaleur latente d'évaporation contribuent au refroidissement de la goutte.

Les équations de conservation des système réactifs multi-composants sont données en détails dans le livre *Principles of combustion* de Kuo [116]. Quant aux modèles d'évaporation, ils sont décrits dans le livre de W. Sirignano, *Fluid dynamics and transport of droplets and sprays* [207] ainsi que dans les thèses de C. Njé Njé [157] et N. Doué [55] sur lesquelles est basé le modèle d'évaporation multi-composants décrit ici.

Récemment, S. Sazhin [199, 200] résume les dernières avancées en terme de modélisation de l'évaporation de gouttelettes de fuel et expose les défis qui lui sont associés notamment ceux liés aux transferts thermiques et à la composition de la goutte. Il aborde également des problèmes encore non résolus tels que l'évaporation des gouttes non sphériques, l'effet des interactions inter-gouttelettes, les gouttes multi-composants, etc.

Les caractéristiques thermodynamiques de la goutte (température, composition) sont déterminées en appliquant les équations de conservation de la masse et de l'énergie à la particule. Nous nous référons à la phase gazeuse par l'indice  $g$ , à la phase liquide par l'indice  $l$  et aux variables liées à la particule par l'indice  $p$ . Les propriétés du gaz dans le milieu ambiant sont désignées à l'aide de l'indice  $\infty$ . Les propriétés thermodynamiques à la surface de la goutte sont notées *surf*. Les particules considérées sont des gouttes mono-composant, multi-composants ou surrogate. La notation  $i$  sera utilisée pour désigner les espèces, gazeuse ou liquide, dont est constituée la goutte. La figure (4.3) résume ces notations liées à l'évaporation de la goutte.

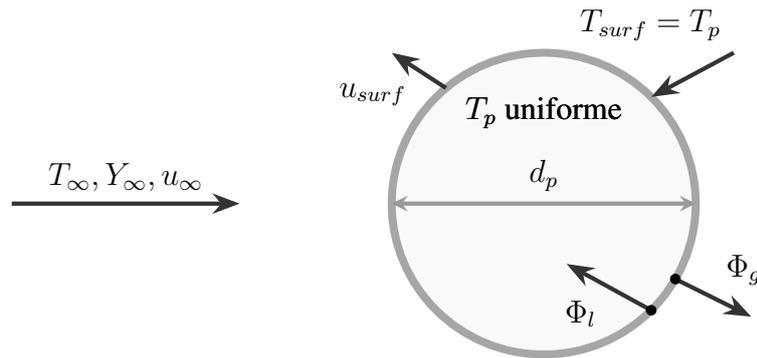


FIGURE 4.3 – Schéma et notations utilisées par le modèle d'une goutte en évaporation. Inspiré de [64].

#### 4.4.1 Hypothèses du modèle

Les hypothèses ci-dessous sont celles données par *C. Njé Njé* [157] et reprises dans la thèse de *N. Doué* [55]. Elles sont généralement admises pour la description du modèle d'évaporation.

**Hypothèse 1** La goutte est supposée parfaitement sphérique, en supposant que les phases d'atomisation primaire et secondaire sont achevées. Dans un spray, la formation des gouttes est caractérisée entre autres par le nombre sans dimension de *Weber*  $We = \rho_p d_p |\mathbf{u} - \mathbf{u}_p|^2 / \sigma$  où  $\sigma$  est la tension de surface du liquide et  $\mathbf{u}$  la vitesse du gaz. Si  $We < 12$ , la goutte est considérée stable. Pour  $We < 5$  l'hypothèse de la sphéricité de la goutte est vérifiée et les déformations de l'interface sont négligeables [207].

**Hypothèse 2** Les interactions avec les autres particules ne sont pas prises en compte.

**Hypothèse 3** La conductivité thermique du liquide est supposé infinie, la température dans la goutte est uniforme.

**Hypothèse 4** La diffusivité thermique du liquide étant très inférieure à celle du gaz, le temps caractéristique thermique de la phase porteuse est très court devant celui de la goutte. La réponse thermique est donc supposée quasi-stationnaire dans le gaz, les dérivées temporelles seront négligées.

**Hypothèse 5** La surface de la goutte est supposée à l'équilibre thermodynamique avec le gaz environnant. La loi de *Clausius-Clapeyron* peut donc être utilisée pour calculer la pres-

sion partielle de vapeur saturante de l'espèce  $k$  à la surface de la goutte :

$$P_{k,surf} = P_{ref} \exp \left( \frac{W_k L_{v,k}}{R} \left( \frac{1}{T_{boil}} - \frac{1}{T_p} \right) \right) \quad (4.11)$$

où  $L_{v,k}$  est la chaleur latente de vaporisation de l'espèce  $k$  sous forme liquide,  $R$  la constante des gaz parfait,  $W_k$  sa masse molaire,  $T_p$  la température de la goutte et  $T_{boil}$  est la température d'ébullition de la goutte à la pression de référence  $P_{ref} = 1 \text{ atm}$ .

**Hypothèse 6** Les propriétés du milieu ambiant (mélange gazeux hors espèce évaporée) sont supposées constantes, de la surface de la goutte à l'infini.

**Hypothèse 7** La phase gazeuse est constituée d'un mélange idéal de gaz parfaits. Il n'y a pas de réaction chimique dans le gaz.

**Hypothèse 8** La phase liquide est constituée d'un mélange de liquides idéaux. Il n'y a pas de réaction chimique entre les différentes espèces du liquide.

**Hypothèse 9** La solubilité du gaz ambiant dans le liquide est négligeable.

**Hypothèse 10** Le rapport de masse volumique entre le liquide et le gaz permet de supposer que la seule force exercée par la phase gazeuse sur les gouttes est la traînée.

**Hypothèse 11** L'effet de la gravité est négligeable.

**Hypothèse 12** Les transferts radiatifs entre la goutte et son entourage sont négligés.

### 4.4.2 Propriétés thermodynamiques et de transport

Les équations du modèle d'évaporation dépendent des propriétés physiques du mélange gazeux. Il est donc important de connaître les propriétés de chaque espèce et les lois de mélange qui les régissent.

Les propriétés thermodynamiques et de transport du gaz qui entoure la surface de la goutte sont calculées à l'état de référence. Pour caractériser cet état intermédiaire, noté par la suite avec l'indice  $_{ref}$ , *Abramzon et Sirignano* [3] utilisent la loi de *Hubbard* [95] vérifiée par des données expérimentales et recommandée par *Yuen et Chen* [245]. Cette loi est donnée par l'équation (4.12) et consiste à considérer les propriétés de la phase gazeuse à partir d'une température

et d'une composition de référence qui sont une moyenne pondérée à  $2/3 - 1/3$  des valeurs à la surface et à l'infini.

$$\begin{aligned} T_{ref} &= \frac{2}{3}T_{surf} + \frac{1}{3}T_{\infty} \\ Y_{ref,k} &= \frac{2}{3}Y_{surf,k} + \frac{1}{3}Y_{\infty,k} \end{aligned} \quad (4.12)$$

La figure 4.4 rappelle les notations utilisées dans le cadre de cette loi.

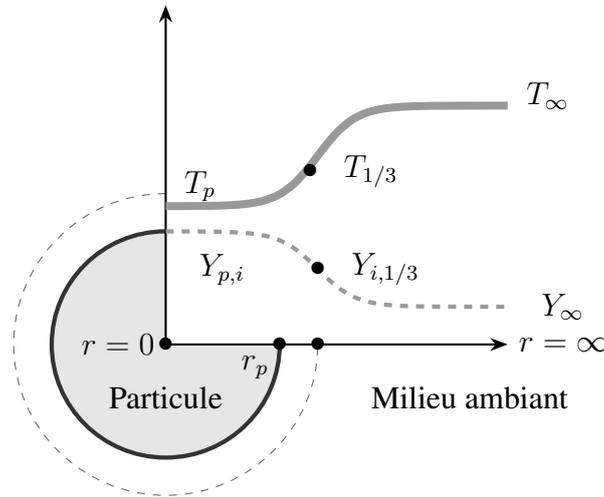


FIGURE 4.4 – Schéma d'une goutte s'évaporant dans un milieu ambiant gazeux.

Les propriétés physiques de la goutte, à savoir, la chaleur spécifique de la vapeur du fuel  $Cp_v$ , la chaleur spécifique du gaz ambiant  $Cp_{g,ref}$ , la conductivité thermique du mélange  $\lambda_{g,ref}$ , la viscosité dynamique du mélange  $\mu_{g,ref}$  et le coefficient de diffusion  $D_{g,ref}$  sont calculées à l'état de référence exprimée par l'équation (4.12).

### Chaleur spécifique

Dans le chapitre (2), la chaleur spécifique massique est définie par la relation (2.18). Elle donne la capacité calorifique pour un mélange à partir des propriétés individuelles de chaque espèce. Dans le cas de l'évaporation, le mélange liquide/vapeur est constitué de plusieurs composants. Il est nécessaire de calculer la chaleur spécifique de chaque composant  $Cp_i$  avec la même expression (2.18) puis calculer  $Cp_m$  du mélange des composés par la relation suivante [186] :

$$Cp_m = \sum_i Y_i Cp_i \quad (4.13)$$

avec  $Y_i$  la fraction massique liquide ou gazeuse des composants de la gouttes.

### Chaleur latente d'évaporation

La chaleur latente d'évaporation du fuel liquide  $L_{v,i}$ , est choisie constante ou tabulée. Dans le cas d'une goutte multi-composants,  $L_v$  du mélange est calculée par l'expression suivante [186] :

$$L_v = \sum_i \xi_i L_{v,i} \quad (4.14)$$

où  $\xi_i$  est la fraction des taux d'évaporation défini par la relation (4.29).

### La viscosité

La propriété de viscosité dynamique des mélanges évaporés est calculée avec la formule de *Wilke* (Eq. 2.45) à l'état de référence de composition et de température.

### La conductivité

Comme pour la viscosité, la conductivité thermique du mélange est calculée à l'état de référence de composition et de température avec la formule de *Brokaw* (Eq. 2.46).

### La diffusivité

Le calcul du coefficient de diffusion est différent selon la nature des composants du fuel liquide. Dans le cas d'un composant pur, la diffusion est calculée en utilisant la loi de mélange de *Hirschfelder et Curtiss* évoquée dans la section (2.3.1) avec l'équation (2.33) calculée à l'état de référence comme pour les propriétés physiques précédentes.

Si le fuel liquide est modélisé par un surrogate, le coefficient de diffusion de surrogate est calculé différemment. Pour obtenir l'expression du coefficient de diffusion dans le cas d'un fuel surrogate, nous posons l'hypothèse d'auto-similarité des profils des espèces évaporées qui constituent le surrogate et le profil du surrogate lui même (voir Fig. 4.5). Cette hypothèse stipule que le profil de la fraction massique de l'espèce surrogate évaporée est de la même allure que la somme des fractions massiques des espèces qui le composent. Elle est à son maximum au voisinage de la goutte et s'annule en s'éloignant de la surface de la goutte vers le milieu ambiant ( $\infty$ ).

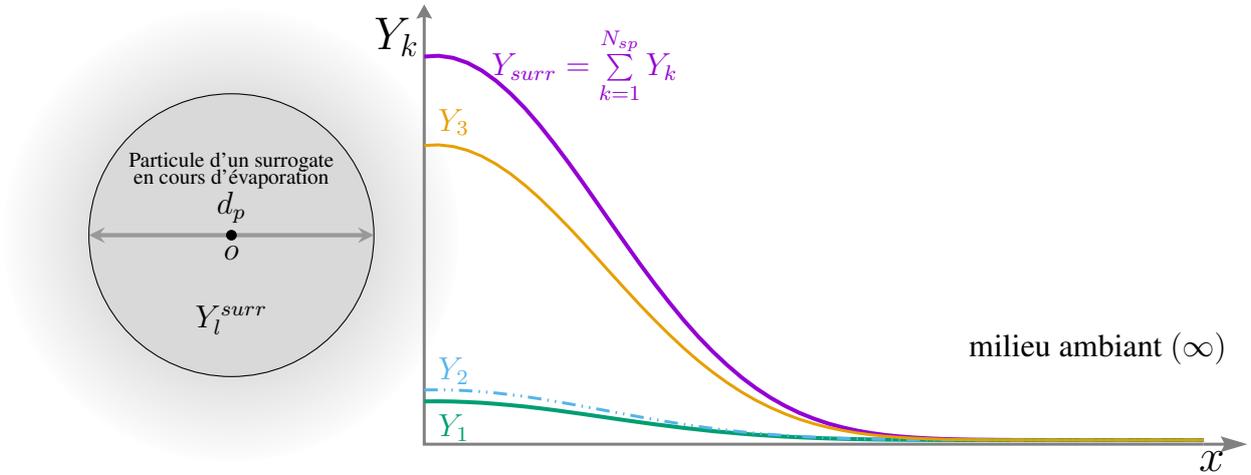


FIGURE 4.5 – Schéma illustrant l'hypothèse d'auto-similarité des profils des espèces évaporées pour le cas d'un surrogate. Les profils sont issus de la simulation de l'évaporation d'une goutte isolée d'un fuel surrogate.

Pour un surrogate, la fraction massique s'écrit :

$$Y_{surr} = \sum_{k=1}^{N_{sp}} Y_k \quad (4.15)$$

L'hypothèse d'auto-similarité des profils, précédemment posée, se traduit par l'expression suivante :

$$\frac{\nabla Y_k}{Y_k} = \frac{\nabla Y_{surr}}{Y_{surr}} \quad (4.16)$$

$$\rho D_k^* \nabla Y_k = \rho D_k^* \frac{Y_k}{Y_{surr}} \nabla Y_{surr} \quad (4.17)$$

En sommant sur chaque terme, la dernière équation (4.17) se réécrit :

$$\sum_{k=1}^{N_{sp}} \rho D_k^* \nabla Y_k = \sum_{k=1}^{N_{sp}} \rho D_k^* \frac{Y_k}{Y_{surr}} \nabla Y_{surr} \quad (4.18)$$

Par analogie, nous pouvons réécrire le terme de droite de la manière suivante :

$$\rho D_{surr} \nabla Y_{surr} = \sum_{k=1}^{N_{sp}} \rho D_k^* \frac{Y_k}{Y_{surr}} \nabla Y_{surr} \quad (4.19)$$

L'expression de diffusivité pour un fuel surrogate peut désormais s'écrire :

$$D_{surr} = \frac{\sum_{k=1}^{N_{sp}} D_k^* Y_k}{\sum_{k=1}^{N_{sp}} Y_k} \quad (4.20)$$

Si l'hypothèse d'auto-similarité des profils n'est pas faite, il n'est plus possible d'écrire une telle diffusivité.

### Les nombres sans dimensions

Tout au long de ce modèle, différents nombres adimensionnels seront utilisés. Il convient de rappeler ici leurs définitions.

**Nombre de Schmidt** caractérise le rapport entre les effets visqueux donnés par la viscosité cinématique  $\nu = \mu/\rho$  et la diffusivité  $D_i$  de l'espèce  $i$  :

$$Sc_i = \frac{\mu_{ref}}{\rho_{ref} D_{ref}^i} \quad (4.21)$$

**Nombre de Prandtl** compare la viscosité du mélange à sa diffusivité thermique  $\alpha = \frac{\lambda}{\rho C_p}$  :

$$Pr = \frac{\mu_{ref} C_{p,ref}}{\lambda_{ref}} \quad (4.22)$$

**Nombre de Reynolds** associé à la goutte défini précédemment par l'équation (4.8) et est rappelée ici :

$$Re_p = \frac{d_p |\mathbf{u}_p - \mathbf{u}_\infty|}{\nu} \quad (4.23)$$

**Nombres de Sherwood / Nusselt** caractérisent les transferts de masse / énergie entre un fluide et une interface. Le nombre de *Sherwood*, noté  $Sh$ , est propre à chaque espèce et est obtenu par l'adimensionnement du gradient de concentration  $\nabla Y_i$ . Le nombre de *Nusselt*, noté  $Nu$ , est obtenu en adimensionnant le gradient de température  $\nabla T$ .

Il existe plusieurs corrélations empiriques pour modéliser ces deux nombres adimensionnels pour une goutte isolée en mouvement sans prise en compte de l'écoulement de *Stefan*

(p. 117). La première corrélation est la corrélation de *Frösling, 1938* [75] :

$$\begin{cases} Sh_i = 2 + 0.55 Re_p^{1/2} Sc_i^{1/3} \\ Nu = 2 + 0.55 Re_p^{1/2} Pr^{1/3} \end{cases} \quad (4.24)$$

Cependant, cette corrélation surestime le taux de transfert pour  $Re_p < 10$  et prédit une sensibilité physique incorrecte de la vitesse de transfert aux faibles fluctuations de vitesse près d'un *Reynolds* particulaire nul ( $Re_p \approx 0$ ) [3].

La deuxième corrélation est proposée par *Clift et al.* [40] et utilisée initialement dans le modèle d'évaporation d'*Abramzon et Sirignano* [3] :

$$\begin{cases} Sh_i = 1 + (1 + Re_p Sc_i)^{1/3} f(Re_p) \\ Nu = 1 + (1 + Re_p Pr)^{1/3} f(Re_p) \end{cases} \quad (4.25)$$

avec  $f(Re_p) = 1$  si  $Re_p \leq 1$  et  $f(Re_p) = Re_p^{0.077}$  si  $1 < Re_p < 400$ . L'équation (4.25) se rapproche des résultats numériques obtenus par différents auteurs dans la plage  $0.25 < (Pr, Sc) < 100$  avec une erreur inférieure à 3 % [3].

La corrélation de *Ranz-Marshall* [184] est celle utilisée dans le cadre de cette thèse. Elle permet de modéliser les effets de la convection dans le cas d'une sphère qui ne s'évapore pas.

$$\begin{cases} Sh_i = 2 + 0.6 Re_p^{1/2} Sc_i^{1/3} \\ Nu = 2 + 0.6 Re_p^{1/2} Pr^{1/3} \end{cases} \quad (4.26)$$

Par la suite et pour tenir compte du flux de *Stefan*, les nombres de *Sherwood* et de *Nusselt* seront utilisés avec des expressions modifiées (équations. 4.36, 4.37). Ces dernières permettent d'inclure les effets convectifs tout en gardant un système à symétrie sphérique.

*Miller et al.* [145] ont montré que la chaleur et les flux massiques de la goutte dépendent fortement de l'évaluation des propriétés de transport et thermodynamiques des phases gazeuse et liquide.

### 4.4.3 Modèle de la phase gazeuse

Le modèle de la phase gazeuse concerne le transfert de masse et de chaleur au cours de processus d'évaporation. Il englobe le taux d'évaporation massique et les différents paramètres de calcul qui lui sont associés.

Le taux d'évaporation massique d'une goutte multi-composants est donné comme suit :

$$\dot{m} = \sum_{i=1}^N \dot{m}_i = \begin{cases} \pi d_p \rho_g D_{i,g} Sh_i^* \ln(1 + B_{m,i}) \\ \pi d_p \frac{\lambda_g}{C_{p_v}} Nu^* \ln(1 + B_T) \end{cases} \quad (4.27)$$

avec  $\xi_i$  le rapport de fraction massique de l'espèce  $i$  et le flux massique totale (Eq. 4.29),  $Sh_i^*$  et  $Nu^*$  le nombre de *Sherwood* et *Nusselt* modifiés définis ci-dessous (Eqs. 4.36, 4.37).  $B_{m,i}$  le nombre de transfert de masse du composant  $i$  et  $B_T$  est le nombre de transfert de chaleur. Ces deux paramètres, également appelés les nombres de *Spalding*, sont très importants pour le modèle d'évaporation. Le nombre de *Spalding* massique  $B_{m,i}$  peut être défini de la première expression de la relation (4.27) comme suit :

$$B_{m,i} = \frac{Y_{g,i}^s - Y_{g,i}^\infty}{\xi_i - Y_{g,i}^s} \quad (4.28)$$

En supposant que les fractions massiques dans le gaz ambiant sont nulles, les valeurs de  $\xi_i$ , le rapport de flux massique de l'espèce  $i$  et le flux massique total, peuvent être calculées par l'expression [216] :

$$\xi_i = \frac{\dot{m}_i}{\dot{m}} \quad (4.29)$$

où  $\dot{m}_i$  est le débit massique de vapeur pour l'espèce  $i$ .

Le nombre  $B_{m,i}$  caractérise les effets de transfert de masse en fonction des fractions massiques de l'espèce évaporée à la surface de la goutte et à l'infini. La fraction massique dans le milieu ambiant est interpolée depuis les nœuds du maillage Eulérien. La fraction massique à la

surface est exprimée en fonction de la fraction molaire et des masses molaires :

$$Y_{k,surf} = \frac{X_{k,surf} W_k}{W_{surf}} \quad (4.30)$$

avec

$$W_{surf} = X_{k,surf} W_k + (1 - X_{k,surf}) \bar{W}_{j \neq k, surf} \quad (4.31)$$

La masse molaire à la surface  $W_{surf}$  est calculée comme une moyenne pondérée par les fractions molaires  $X_{k,surf}$  de la masse molaire de l'espèce évaporée  $W_k$  et de toutes les autres espèces  $\bar{W}_{j \neq k, surf}$ . La masse molaire du mélange hors espèce évaporée,  $\bar{W}_{j \neq k, surf}$  est uniforme de la surface à l'infini, d'après l'hypothèse (5), et peut donc être calculée de la manière suivante :

$$\bar{W}_{j \neq k, surf} = \bar{W}_{j \neq k, \infty} = \frac{1 - Y_{k, \infty}}{1 - Y_{k, \infty} \frac{W_{\infty}}{W_k}} W_{\infty} \quad (4.32)$$

La fraction molaire d'espèce évaporée à la surface  $X_{i,surf}$  est déduite de la pression partielle calculée d'après la formule de *Clausius-Clapeyron* (Eq. 4.11) :

$$X_{k,surf} = \frac{P_{k,surf}}{P} \quad (4.33)$$

Les deux paramètres  $B_{m,i}$  et  $B_T$  sont reliés par la relation suivante :

$$B_T = (1 + B_{m,i})^{\phi_i} - 1, \quad (4.34)$$

avec

$$\phi_i = \frac{Cp_v}{Cp_g} \frac{Sh_i^* P_r}{Nu^* Sc_i}, \quad (4.35)$$

et  $Cp_v$  la chaleur spécifique moyenne de la vapeur du fuel liquide dans le film autour de la goutte, calculée à la température et à la composition de référence  $T_{ref}$  et  $Y_{ref}$  respectivement.  $Cp_g$  est la chaleur spécifique à pression constante du mélange gazeux à l'état de référence.

Nous rappelons que toutes les propriétés physiques moyennes du film gazeux de la goutte sont calculées dans les conditions de référence selon la règle d'*Hubbard* et al. [95], recommandée par *Yuen et Chen* [245] (cf – 4.4.2).

Pour tenir compte de l'effet de la convection et de l'écoulement de *Stefan* sur l'évapora-

tion des gouttes, les nombres de *Sherwood* et de *Nusselt* modifiés sont déterminés à partir des nombres de  $Sh^0$  et de  $Nu^0$  sans écoulement de *Stefan* donnés par les corrélations précédentes. Ils sont donnés par les expressions suivantes :

$$Sh_i^* = 2 + \frac{Sh_i^0 - 2}{F(B_{i,m})} \quad (4.36)$$

$$Nu^* = 2 + \frac{Nu^0 - 2}{F(B_T)} \quad (4.37)$$

avec  $F(B)$  la fonction établie par *Abramzon-Sirignano* [3] à partir de l'analyse d'un problème d'évaporation de gouttelette dans un écoulement avec développement d'une couche limite laminaire autour de la goutte. Elle se décline sous deux formes, une pour chaque nombre de *Spalding*,  $B_{m,i}$  et  $B_T$ , pour définir deux facteurs de correction pour l'épaisseur du film, comme le montrent *Abramzon et al.* [3]. Elle est donnée par l'expression suivante :

$$F(B) = (1 + B)^{0.7} \frac{\ln(1 + B)}{B} \quad (4.38)$$

*Abramzon et al.* estime la variation de cette fonction entre 1 et 1.28 lorsque  $B$  varie de 0 à 8, puis elle reste constante pour les valeurs de  $8 \leq B \leq 20$  et  $1 \leq (Pr, Sc) \leq 3$ .

$Sh_i^0$  et  $Nu^0$  sont les nombres de *Sherwood* et *Nusselt* sans l'écoulement de *Stephan* calculés d'après les corrélations *Ranz-Marshall* (1952) [184] définies par l'expression de l'équation (4.26).

Ce que nous venons de voir montre que la résolution du problème de l'évaporation repose sur les coefficients de transfert de masse et de chaleur. Une fois les  $B_{m,i}$  connus, nous pouvons calculer  $B_T$  à l'aide de la relation (4.34).

#### 4.4.3.1 Calcul des coefficients de transfert de masse, $B_{m,i}$

Pour calculer les  $B_{m,i}$ , nous avons besoin de calculer d'abord les fractions de taux d'évaporation  $\xi_i$  avec la condition suivante :

$$\sum_i \xi_i = 1 \quad (4.39)$$

De l'équation (4.28), on réécrit l'expression de  $\xi_i$  en fonction du nombre de *Spalding*  $B_{m,i}$  et des fractions massiques.

$$\xi_i = \frac{(1 + B_{m,i})Y_{i,g}^s - Y_{i,g}^\infty}{B_{m,i}} \quad (4.40)$$

De la première expression de taux d'évaporation  $\dot{m}$  donnée à l'équation (4.27), nous pouvons écrire :

$$1 + B_{m,i} = \exp\left(\frac{x}{D_{i,g}Sh_i^*}\right) \text{ avec } x = \frac{\dot{m}}{\pi\rho_g d_p} \quad (4.41)$$

En remplaçant l'expression (4.41) dans l'équation (4.40), tout en respectant la condition de l'équation (4.39), on obtient le système final à résoudre par l'algorithme de *Newton-Raphson* :

$$f\left(\frac{\dot{m}}{\pi\rho_g d_p}\right) = f(x) = 1 - \sum_i \frac{Y_{i,g}^s \exp\left(\frac{x}{D_{i,g}Sh_i^*}\right) - Y_{i,g}^\infty}{\exp\left(\frac{x}{D_{i,g}Sh_i^*}\right) - 1} = 0 \quad (4.42)$$

La dérivée de  $f(x)$  est donnée par la relation suivante :

$$f'\left(\frac{\dot{m}}{\pi\rho_g d_p}\right) = f'(x) = - \sum_i \frac{\exp\left(\frac{x}{D_{i,g}Sh_i^*}\right) (Y_{i,g}^\infty - Y_{i,g}^s)}{D_{i,g}Sh_i^* \left[\exp\left(\frac{x}{D_{i,g}Sh_i^*}\right) - 1\right]^2} \quad (4.43)$$

L'algorithme *Newton-Raphson* permettant de trouver la solution de la fonction  $f(x)$  :

$$x^{n+1} = x^n - \frac{f(x^n)}{f'(x^n)} \quad (4.44)$$

La variable  $x$  est initialisée avec une valeur  $x_1$  définie comme suit :

$$x_1 = \frac{\sum_i X_{i,g}^s D_{i,g} Sh_i}{\sum_i X_{i,g}^s} \ln(1 + B_M) \quad (4.45)$$

Avec :

$$B_M = \frac{\sum_i Y_{i,g}^s - \sum_i Y_{i,g}^\infty}{1 - \sum_i Y_{i,g}^s} \quad (4.46)$$

La valeur de  $B_M$  mono-composant est la meilleure initialisation de  $B_{m,i}$  pour converger l'algorithme de *Newton-Raphson*.

Une fois l'équation (4.42) résolue, il est possible de trouver toutes les valeurs de  $\xi_i$  et  $B_{m,i}$  grace aux équations (4.40) et (4.41).

#### 4.4.3.2 Calcul des coefficients de transfert de chaleur, $B_T$

Le nombre de *Spalding* thermique  $B_T$  est calculé à partir de l'expression de l'équation (4.34). Comme nous pouvons le constater, l'expression de  $B_T$  dépend du *Nusselt* qui dépend lui même de  $B_T$  (4.37). Il est donc nécessaire de réaliser un calcul sur  $B_T$  avec une méthode itérative de type point fixe.

Une autre relation exprimant  $B_T$  peut être dérivée en fonction de la différence de température, de la chaleur latente des composants de la goutte et du chauffage transféré à la goutte (Voir les thèses de C. Njé Njé [157] et N. Doué [55] pour plus de détails).

$$B_T = \frac{\sum \xi_i C_{p_{v,i}} (T^\infty - T^s)}{\sum \xi_i L_{v,i} + \frac{\dot{Q}_l}{\dot{m}}}, \quad (4.47)$$

Cette expression de  $B_T$ , indépendante de  $B_{m,i}$ , est introduite pour définir une valeur initiale de  $Nu^*$ , calculée pour  $B_T = B_T^0$  en posant l'hypothèse qu'initialement la goutte n'est pas chauffée ( $\dot{Q}_l = 0$ ) :

$$B_T^0 = \frac{C_{p_v} (T^\infty - T^s)}{\sum \xi_i L_{v,i}}. \quad (4.48)$$

Le nombre  $Nu^*$  résultant sert à calculer une nouvelle valeur de  $B_T$  qui sera injectée dans l'équation (4.37) pour calculer  $Nu^*$  et ainsi de suite jusqu'à convergence de  $B_T$ .

#### 4.4.3.3 Critère de convergence

La convergence pour les coefficients de transfert de masse  $B_{m,i}$  et d'énergie  $B_T$  est déterminée avec le critère suivant :

$$\left| B^n - B^{n-1} \right| \leq \varepsilon_B, \quad (4.49)$$

avec  $\varepsilon_B$  la précision désirée pour le calcul des nombres de *Spalding*  $B_{m,i}$  ou  $B_T$ . Cette précision est fixée à  $\varepsilon = 10^{-6}$  pour réaliser les différents cas de validation.

Dans le cas d'un liquide mono-composant, une seule itération suffit pour converger les nombres de *Spalding*. En multi-composants, généralement 3 à 5 itérations suffisent.

### 4.4.4 Modèle de la phase liquide

Le modèle de la phase liquide est destiné à modéliser le transfert de chaleur et de masse à l'intérieur de la goutte. Un chauffage transitoire des liquides à l'intérieur de la goutte peut modifier considérablement l'échelle de temps du processus de chauffage interne. Et dans le cas des gouttes multi-composants, différents composants s'évaporent à des vitesses différentes, créant des gradients de concentration dans la phase liquide. Pour tenir compte de la diffusion de la chaleur et de la masse à l'intérieur de la goutte, il existe plusieurs modèles. *Abramzon* et *Sirignano* [207] les classifient en six types dans l'ordre croissant de leur complexité :

1. modèle de goutte à température constante : dont est issue la loi  $D^2$  selon laquelle le carré du diamètre de la goutte diminue linéairement avec le temps ;
2. modèle à diffusion infinie du liquide : la température et la composition de la goutte supposées uniformes, mais elles varient dans le temps ;
3. modèle à diffusion limitée : la convection dans la goutte est négligée. Les profils de température et de composition dans le liquide ne sont plus uniformes mais restent à symétrie sphérique ;
4. modèle à diffusion effective : c'est une extension du modèle précédent où les effets de convection dans la goutte sont pris en compte. Il considère le modèle à diffusion limitée et la recirculation interne de la goutte ;
5. modèle de vortex de *Hill* : il décrit la recirculation à l'intérieure de la goutte via la dynamique des tourbillons ;
6. solution de *Navier-Stokes* : solution exacte et complète des équations de *Navier-Stokes* à l'intérieure de la goutte et dans le flux gazeux.

Pour satisfaire l'hypothèse (3) énoncée dans la section 4.4.1, le modèle de diffusion liquide qui nous intéresse et qui est utilisé ici pour le modèle d'évaporation est le modèle à diffusion infinie. Ce dernier stipule que la goutte est sujette à la circulation interne du liquide qui entraîne un mélange rapide. La composition de la goutte et sa température sont uniformes en espace mais varient tout de même en temps.

Ce modèle est contesté par *Lara-Urbaneja* et *Sirignano* [120] pour sa définition de la notion « mélange rapide ». En effet, ils proposent d'interpréter ce qu'on appelle « mélange rapide » comme la limite infinie des grosses gouttes par rapport au temps de diffusion liquide. Cependant, ce modèle reste adapté dans les cas où la durée de vie de la goutte est largement supérieure au temps de diffusion des espèces liquides.

#### 4.4.4.1 Calcul de la température

L'équation décrivant l'évolution de la température au cours du temps est donnée par le bilan d'énergie dans la goutte :

$$\rho_p C_{pl} \frac{\pi d_p^3}{6} \frac{dT_p}{dt} = \dot{Q}_l \quad (4.50)$$

Le chauffage de la goutte  $\dot{Q}_l$  est déduit de la relation de  $B_T$  (Eq. (4.47)) :

$$\dot{Q}_l = \dot{m} \left[ \frac{C_{pv}(T^\infty - T^s)}{B_T} - L_v \right], \quad (4.51)$$

$\rho_p$ , la densité du liquide, est donnée constante.  $C_{pl}$ , la chaleur spécifique du fuel liquide, est renseignée constante ou tabulée en fonction de la température pour une pression donnée.

Une expression finale de la température de la goutte est obtenue :

$$T^{n+1} = T^n + \frac{6}{\pi d_p^3} \frac{\Delta t}{\rho_p C_{pl}} \dot{Q}_l \quad (4.52)$$

#### 4.4.4.2 Calcul de la composition de la goutte

De même, le bilan de masse de chaque espèce  $i$  donne :

$$\rho_p \frac{dY_{l,i}}{dt} = \frac{6}{\pi d_p^3} \dot{m} (Y_{l,i} - \xi_i) \quad (4.53)$$

ce qui revient à écrire :

$$Y_{l,i}^{n+1} = Y_{l,i}^n + \frac{6}{\pi d_p^3} \frac{\Delta t}{\rho_p} \dot{m} (Y_{l,i}^n - \xi_i) \quad (4.54)$$

### 4.4.4.3 Calcul du diamètre de la goutte

À partir de l'expression du débit massique on peut déterminer le nouveau diamètre de la goutte :

$$\dot{m} = \frac{\pi \rho_p}{6} \frac{d(d_p^3)}{dt} \quad (4.55)$$

Le diagramme de la figure (4.6) décrit les étapes principales du modèle d'évaporation présenté dans ce chapitre.

### 4.4.5 Couplage avec la phase gazeuse

#### 4.4.5.1 Échange entre les particules et la phase gazeuse

La rétroaction des particules sur la phase porteuse se fait par l'intermédiaire de trois termes sources sur la conservation de la masse  $\Theta_M$ , de la quantité de mouvement  $\Theta_D$  et de l'enthalpie  $\Theta_H$ , qui sont ajoutés aux équations de conservation du solveur Eulérien. Ces termes source sont ponctuels et localisés à la position des particules, et calculés en fonction des propriétés de chaque particule. Le terme source massique, projeté sur le maillage Eulérien, s'écrit :

$$\Theta_M(\mathbf{x}, t) = \frac{1}{\Delta V} \sum_{i=1}^{N_p} -\dot{m}_p^{(i)} \delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}_p^{(i)}(t)) \quad (4.56)$$

où  $\delta$  est la distribution de Dirac, et  $\Delta V$  un volume de contrôle, choisi comme étant égal au volume de contrôle relatif à la cellule du maillage Eulérien contenant la particule. De même, le terme source intervenant dans l'équation de conservation de la quantité de mouvement, issu de la résultante des forces aérodynamiques exercées sur la particule par la phase continue s'écrit :

$$\Theta_D(\mathbf{x}, t) = \frac{1}{\Delta V} \sum_{i=1}^{N_p} -\mathbf{F}_p^{(i)} \delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}_p^{(i)}(t)) \quad (4.57)$$

Le terme source d'énergie résulte à la fois de l'énergie prélevée par le chauffage de la particule et par le changement d'état des espèces évaporées :

$$\Theta_H(\mathbf{x}, t) = \frac{1}{\Delta V} \sum_{i=1}^{N_p} \left( -m_p^{(i)} C_{p,l} \frac{dT_p^{(i)}}{dt} + \dot{m}_p^{(i)} L_v \right) \delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}_p^{(i)}(t)) \quad (4.58)$$

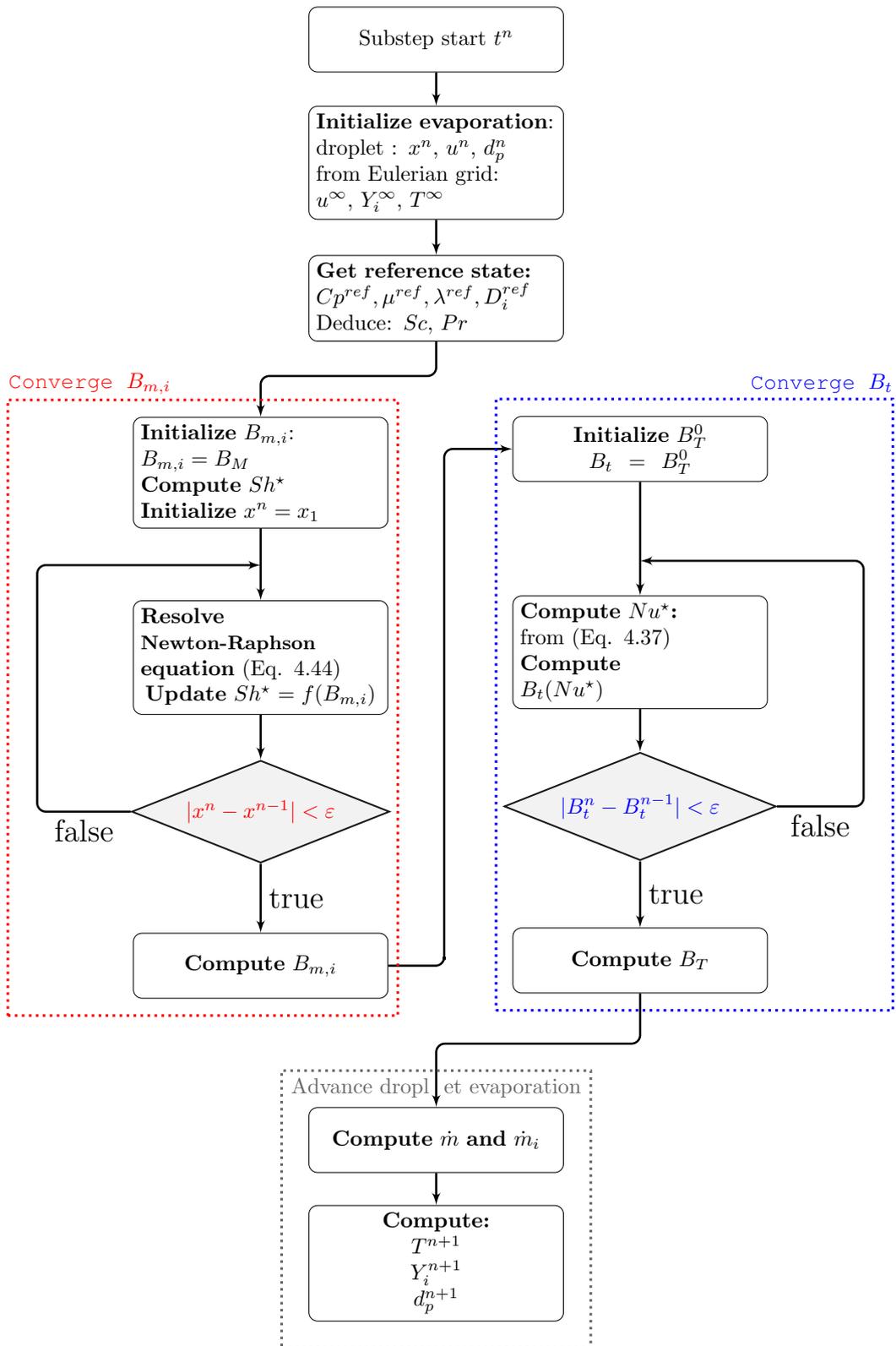


FIGURE 4.6 – Description de l’algorithme du modèle d’évaporation multi-composants.

### 4.4.5.2 Formalisme LES : interaction avec la turbulence

Dans un contexte LES, seules les grandeurs correspondant aux échelles résolues sont disponibles. Les fluctuations de sous mailles doivent faire l'objet d'une modélisation.

#### Impact de la phase dispersée sur la turbulence de sous-maille

La première question qui se pose est de savoir si les modèles de turbulence classiques sont toujours valides dans le cas d'écoulements chargés en particules. En effet, la présence de particules peut avoir deux impacts sur le spectre de turbulence : les plus petites particules sont susceptibles de dissiper l'énergie cinétique turbulente, alors que les plus grosses peuvent augmenter la turbulence. [16, 192]. Par ailleurs, la ségrégation des particules par les tourbillons de sous-maille n'étant pas prise en compte, les effets du two-way coupling peuvent être localement mal estimés [70, 187]. Les modèles de sous-maille conçus pour les écoulements monophasiques ne sont a priori pas prévus pour prendre en compte ces effets. Cependant, hormis une étude de *Yuu et al.* [246] qui propose un modèle de turbulence dépendant du nombre de Reynolds des particules, la plupart des études récentes [103, 206, 230] utilisent les modèles de turbulence classiques (*Smagorinsky* notamment), sans y apporter de modification particulière. La même approche sera utilisée ici.

#### Impact des fluctuations de sous maille de la phase porteuse sur les particules

Le solveur Lagrangien utilise les grandeurs Eulériennes pour calculer l'avancement des particules ( $\varphi = \{u_i, T_p, Y, p\}$ ). Or en LES, les échelles de sous-mailles ne sont pas résolues. Les particules n'ont accès qu'aux quantités filtrées  $\tilde{\varphi}$  au lieu de  $\varphi$ , et ne voient pas les fluctuations de sous-mailles. Une modélisation supplémentaire doit donc être introduite pour exprimer  $\varphi$  en fonction de  $\tilde{\varphi}$ . *Okong'o et Bellan* [161] comparent plusieurs approches :

- La première consiste à négliger les effets de sous-mailles sur l'avancement de la goutte :  
$$\varphi = \tilde{\varphi}.$$
- Une autre approche consiste à modéliser  $\varphi$  comme une variable aléatoire suivant une loi Gaussienne de moyenne  $\tilde{\varphi}$  et de variance de sous mailles  $\sigma_\varphi^{sgs}$  qui doit également être estimée [162].
- Un modèle analytique de la forme  $\varphi = \tilde{\varphi} + \bar{\sigma} \text{sign}(\nabla^2 \tilde{\varphi})$  est également proposée [162].

Ils en concluent que la première approche donne de meilleurs résultats que la deuxième mais moins bons que la troisième. *Bini et Jones* [13] proposent un autre modèle basé sur le Reynolds particulaire  $Re_p$  pour modéliser les fluctuations de vitesse. Le même genre de modèle est développé pour les fluctuations de température [13]. Utilisé dans plusieurs études, ce modèle montre de très bons résultats. Cependant, ces modèles sont utiles pour le calcul du terme de traînée lorsque les fluctuations non résolues de vitesse sont de l'ordre de la vitesse de la particule ou plus importantes, c'est-à-dire, selon la classification d'*Elgobashi* [62], pour les très petites particules ( $\tau_p/\tau_k < 1$ ). Dans le cas d'un spray évaporant, ce cas de figure n'est rencontré qu'en fin de vie des gouttes, et l'essentiel du spray peut être considéré comme étant insensible aux fluctuations de sous-maille. Ces dernières sont donc négligées dans les travaux présentés ici, et l'hypothèse  $\tilde{\varphi} = \varphi$  est utilisée.

### 4.5 Conclusion

La modélisation de l'évaporation d'une goutte multi-composants a été traitée dans ce chapitre. D'abord la modélisation de la phase dispersée est présentée tout en décrivant l'approche Eulérienne et Lagrangienne du spray. Ensuite, nous avons présenté la modélisation de la composition d'une goutte pour les fuels mono- et multi-composants. Enfin, nous avons détaillé le développement du modèle d'évaporation d'*Abramzon-Sirignano* tout en apportant une amélioration sur le calcul des propriétés de transport des fuels notamment la diffusivité. Cette dernière est calculée selon la nature de la composition du fuel liquide. Dans le cas d'un surrogate, une hypothèse d'auto-similarité des profils est nécessaire pour pouvoir utiliser cette nouvelle expression de diffusivité.

Le chapitre suivant est consacré aux validations avec différents cas du modèle d'évaporation exposé dans ce chapitre.

# VALIDATION DU MODÈLE D'ÉVAPORATION SUR UNE GOUTTE ISOLÉE

---

## Sommaire

---

<b>5.1</b>	<b>Introduction</b>	<b>137</b>
<b>5.2</b>	<b>Cas d'évaporation mono-composant pour une goutte statique</b>	<b>139</b>
5.2.1	n-Heptane	139
5.2.2	Kérosène	144
<b>5.3</b>	<b>Cas d'évaporation multi-composants pour une goutte statique</b>	<b>152</b>
5.3.1	n-heptane/n-hexadécane	152
<b>5.4</b>	<b>Évaporation d'une goutte isolée dans un écoulement d'air</b>	<b>160</b>
5.4.1	Cas d'évaporation d'une goutte mono-composant en convection forcée	161
5.4.2	Cas d'évaporation d'une goutte bi-composants : n-heptane/n-décane	162
<b>5.5</b>	<b>Effet de la flottabilité sur l'évaporation de la goutte en convection naturelle</b>	<b>167</b>
<b>5.6</b>	<b>Conclusions</b>	<b>171</b>

---

## 5.1 Introduction

Ce chapitre traite de la validation du modèle d'évaporation mono-composant et multi-composants présenté dans le chapitre précédent pour une goutte isolée. Ce type de configuration simple est souvent utilisé pour valider les modèles d'évaporation car la symétrie sphérique permet d'obtenir des solutions analytiques moyennant quelques hypothèses discutées précédemment lors de la dérivation du modèle.

Dans les simulations présentées dans ce chapitre, une goutte est créée au centre d'un domaine de calcul 3D avec différentes compositions et températures. Le milieu ambiant est constitué initialement d'azote à une température donnée. La composition du gaz environnant et sa température évoluent pendant la simulation à cause des échanges de masse et de chaleur avec la goutte. Le diamètre, la température et la composition sont calculés numériquement avec le modèle d'évaporation et sont ensuite confrontés aux mesures expérimentales issues des études de *Chauveau et al.* [33], de *Nomura et al.* [158], de *Ghassemi et al.* [81, 82] et de *Daïf et al.* [47]. Dans les études expérimentales, la difficulté de mise en œuvre réside dans la maîtrise des conditions initiales et dans le maintien de la goutte dans la position souhaitée. Pour cela, les expérimentateurs déposent le liquide sur des fibres très fines, qui peuvent introduire des effets parasites non modélisés. Ce point sera détaillé sur les cas de validation.

Dans ce chapitre, on s'intéressera principalement à des gouttes isolées immobiles pour lesquelles les modèles de *Spalding* et d'*Abramzon-Sirignano* sont très similaires. On va donc chercher à comparer deux états de l'art dans le code de simulation YALES2 : i) le modèle de *Spalding* avec propriétés de transport (*Schmidt* et *Prandtl*) constantes tel qu'il est décrit dans la thèse de *B. Farcy* [67], ii) le modèle d'*Abramzon-Sirignano* (AS) avec propriétés de transport recalculées dynamiquement avec l'évolution de la goutte, qui a été développé et implémenté dans cette thèse.

Pour compléter la validation, un cas de goutte isolée placée dans un écoulement d'air chaud, est proposé en fin de chapitre. En effet, les différences entre les deux modèles sont exacerbées lorsque la goutte est soumise à une convection forcée car le modèle d'*Abramzon-Sirignano* corrige les coefficients de transfert de masse et de chaleur à la surface de la goutte pour prendre en compte les effets convectifs. Les résultats de l'étude numérique sont comparés aux résultats expérimentaux issus de l'étude de *Daïf et al.* [47].

## 5.2 Cas d'évaporation mono-composant pour une goutte statique

Pour le cas d'une goutte mono-composant, deux combustibles sont étudiés : le n-heptane, avec une composition pure, et un surrogate pour le kérosène.

### 5.2.1 n-Heptane

Le n-heptane ( $C_7H_{16}$ ) a été choisi comme premier fuel liquide mono-composant parce qu'il a été largement étudié dans la littérature et permet donc des comparaisons à la fois expérimentales et numériques. L'intérêt pour ce fuel pur vient de la possibilité de l'utiliser comme surrogate de l'essence pour des applications automobiles.

Dans l'expérience de *Nomura et al.* [158] (Fig. 5.1a), une goutte de n-heptane, de diamètre initial  $d_0 \in [600, 800] \mu m$ , est suspendue sur une fibre en quartz dont l'extrémité a une forme sphérique de diamètre  $d_{quartz} = 0.15 \text{ mm}$  pour maintenir la goutte en position. L'atmosphère est composée d'azote au repos à une température qui varie de  $400 \text{ K}$  à  $800 \text{ K}$  afin d'éviter l'oxydation. Pour annuler l'effet de la gravité, le système est placé en chute libre.

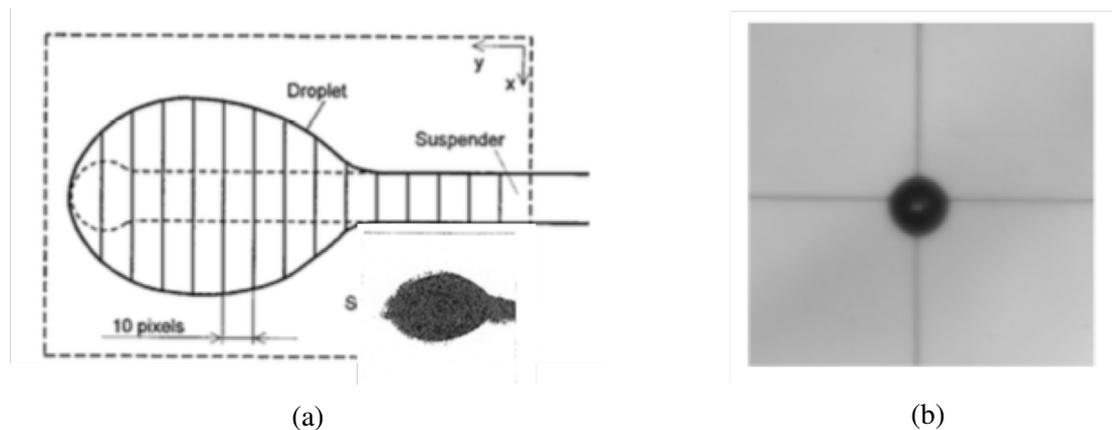


FIGURE 5.1 – (a) Expérience de *Nomura et al.*(1996) [158]. (b) Expérience de *Chauveau et al.*(2008) [33].

*Chauveau et al.*[33] refait la même expérience (Fig. 5.1b) avec une goutte de n-heptane de  $d_0 = 500 \mu m$ , en remplaçant la fibre de quartz par un système de deux fibres croisées de diamètre  $d_{quartz} = 14 \mu m$ . Ainsi la sphéricité de la goutte est mieux conservée et les effets de conduction de la chaleur dans la fibre de quartz sont limités par rapport à la première ex-

périence [32]. Le dispositif de suspension de la goutte explique les grandes différences entre les résultats expérimentaux des deux expériences notamment sur le temps d'évaporation de la goutte. Dans l'expérience de *Chauveau et al.*, il est deux fois supérieur par rapport à celle de *Nomura et al.* (voir Fig. 5.2).

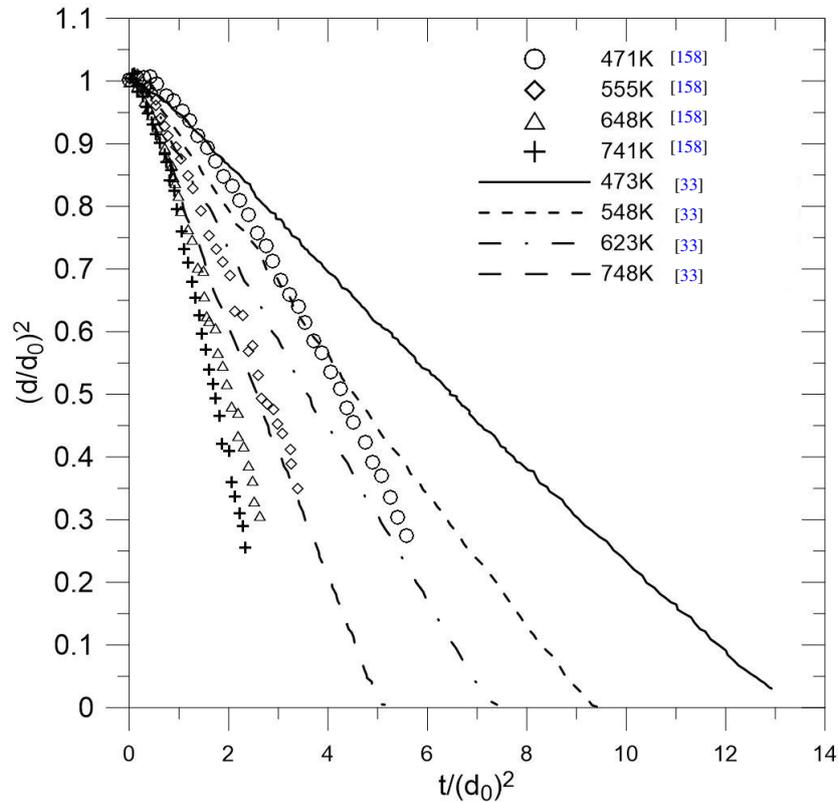


FIGURE 5.2 – Comparaison expérimentale de la durée de vie des gouttes de n-heptane de *Chauveau et al.*[33] et de *Nomura et al.*[158] pour différentes températures ambiantes. Figure tirée de [32].

*Yang et Wang* [241] ont réalisé une étude numérique reproduisant l'expérience réalisée par *Nomura* pour étudier les effets de rayonnement et de la conduction thermique de la fibre. Ils ont calculé une goutte isolée de n-heptane sous les mêmes conditions pour une large gamme de température et pression du gaz ambiant. Ils ont considéré trois cas : (i) le premier calcule l'évaporation générée par le transfert de chaleur entre le gaz et la phase liquide sans introduire de source terme de chaleur. (ii) Le deuxième cas prend en compte la contribution due à la fibre de verre. (iii) Le dernier cas prend en considération le transfert radiatif émis par les parois intérieures du four où la goutte est placée. Le résultat de leur étude montre que lorsque les effets de rayonnement et de conduction dans la fibre n'ont pas été pris en compte dans le calcul, le taux d'évaporation est jusqu'à 50% plus faible selon les conditions de température et de pression. Ils

ont également montré que les résultats de *Nomura* sont très sensibles aux contributions des termes sources de la fibre et de transfert radiatif. Les détails de l'étude et ses conclusions sont disponibles dans le papier de *Yang et Wang* [241].

Dans les simulations, les propriétés physiques de n-heptane liquide sont tabulées (voir Fig. 5.3) sur une large gamme de températures. La pression de la vapeur saturante est calculée avec la relation de *Clausius Clapeyron* (Eq. 4.11). Le tableau 5.1 résume les propriétés thermodynamiques du n-heptane liquide ( $C_{pl}$  et  $L_v$ ) en se basant sur la référence précédente.

Propriété	Valeur	Unité
<b>Température d'ébullition</b>	371.58	$K$
<b>Masse molaire</b>	0.100204	$kg/mol$
<b>Masse volumique</b>	688	$kg/m^3$
<b>Chaleur latente de vaporisation</b>	314.339	$kJ/kg$
<b>Chaleur spécifique</b>	2541.70	$kJ/kg/K$

TABLE 5.1 – Propriétés thermodynamiques du n-heptane liquide à  $T = 371K$  [242].

La figure ci-dessous (Fig. 5.3) montre les deux propriétés  $L_v$  et  $C_{pl}$  en fonction de la température selon les données issues de *Yaws et al.* [242]. Les données numériques issues de *Yaws et al.* sur la chaleur latente de vaporisation (a) sont comparées aux données expérimentales données par *Majer et al.* [136].

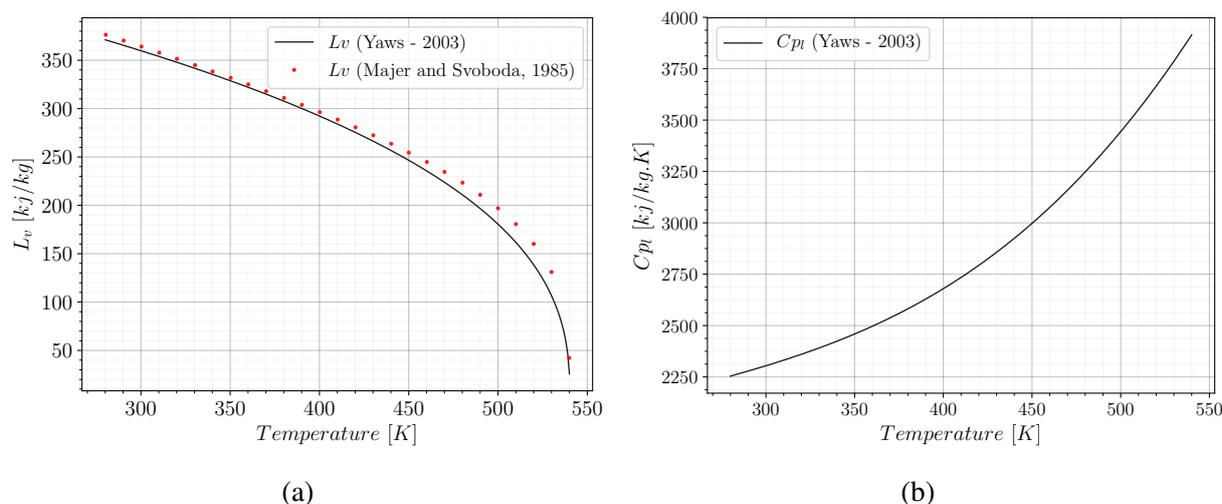


FIGURE 5.3 – Propriétés physiques du n-heptane liquide en fonction de la température [242]. (a) Chaleur latente de vaporisation  $L_v$ . (b) Chaleur spécifique  $C_{pl}$ .

Les nombres de *Schmidt* et *Prandtl* du n-heptane gazeux sont constants dans le cas du modèle de *Spalding* et variables dans le cas du modèle d'*Abramzon-Sirignano* (AS). Les nombres adimensionnels sont présentés sur la figure (5.4) selon le modèle d'évaporation. Dans le modèle (AS), les deux nombres sont calculés d'une manière dynamique à l'état de référence avec les équations (Eq. 4.21) et (Eq. 4.22), et ils montrent une variation au cours du temps des propriétés physiques qui entrent en jeu pour différentes valeurs de température initiale.

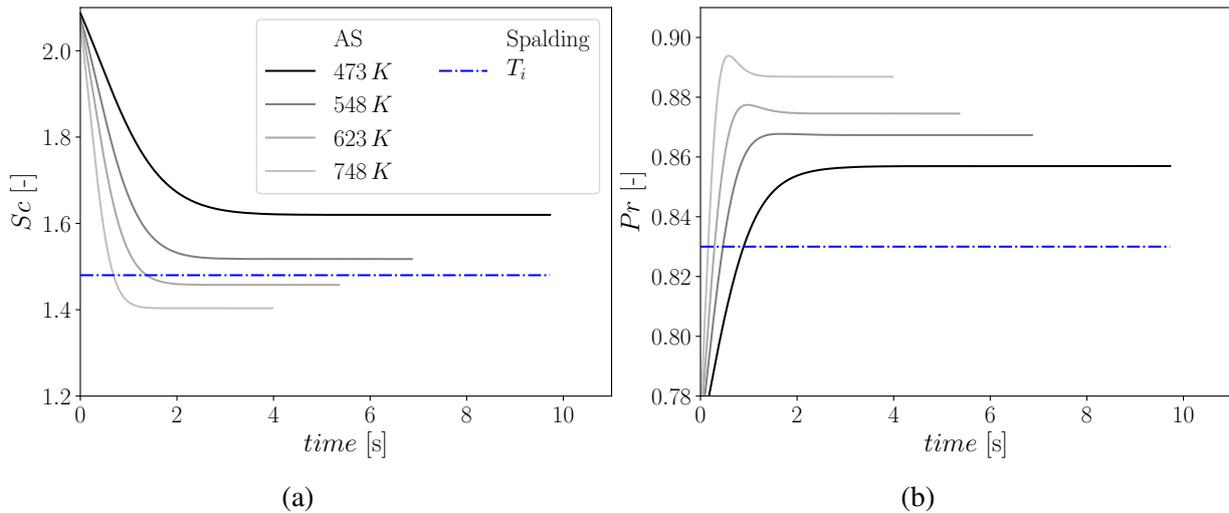


FIGURE 5.4 – Évolution temporelle des nombres (a)  $Sc$  et (b)  $Pr$  du n-heptane gazeux pour différentes valeurs de température initiale. Dans le cas du modèle de *Spalding* chaque nombre présente une seule courbe pour les différentes valeurs de température initiale  $T_i$ .

Les résultats de l'évaporation des gouttes n-heptane sont présentés sur la figure (5.5). Plusieurs conditions de température d'air ont été simulées.

Comme introduit au début de ce chapitre, dans le cas d'une goutte isolée immobile, les deux modèles d'évaporation de *Spalding* et d'*Abramzon-Sirignano* prédisent le même temps d'évaporation ainsi qu'une même température. En comparant les résultats numériques des deux modèles, on retrouve les mêmes conclusions avec un léger écart sur la température de la goutte dans un milieu à basse température. Ces écarts constatés sur la température de la goutte sont dus à la méthode d'évaluation des deux nombres adimensionnels *Schmidt* et *Prandtl*. En effet dans le modèle de *Spalding*, ces nombres sont constants contrairement au modèle d'*Abramzon-Sirignano* où ils varient au cours du calcul d'évaporation (voir Fig. 5.4).

Le temps d'évaporation donné par les deux modèles numériques est délimité par les résultats des deux expériences. Il est en bon accord sur les temps courts avec les résultats expérimentaux de *Chauveau* surtout lorsque l'on augmente la température du gaz ambiant, le diazote.

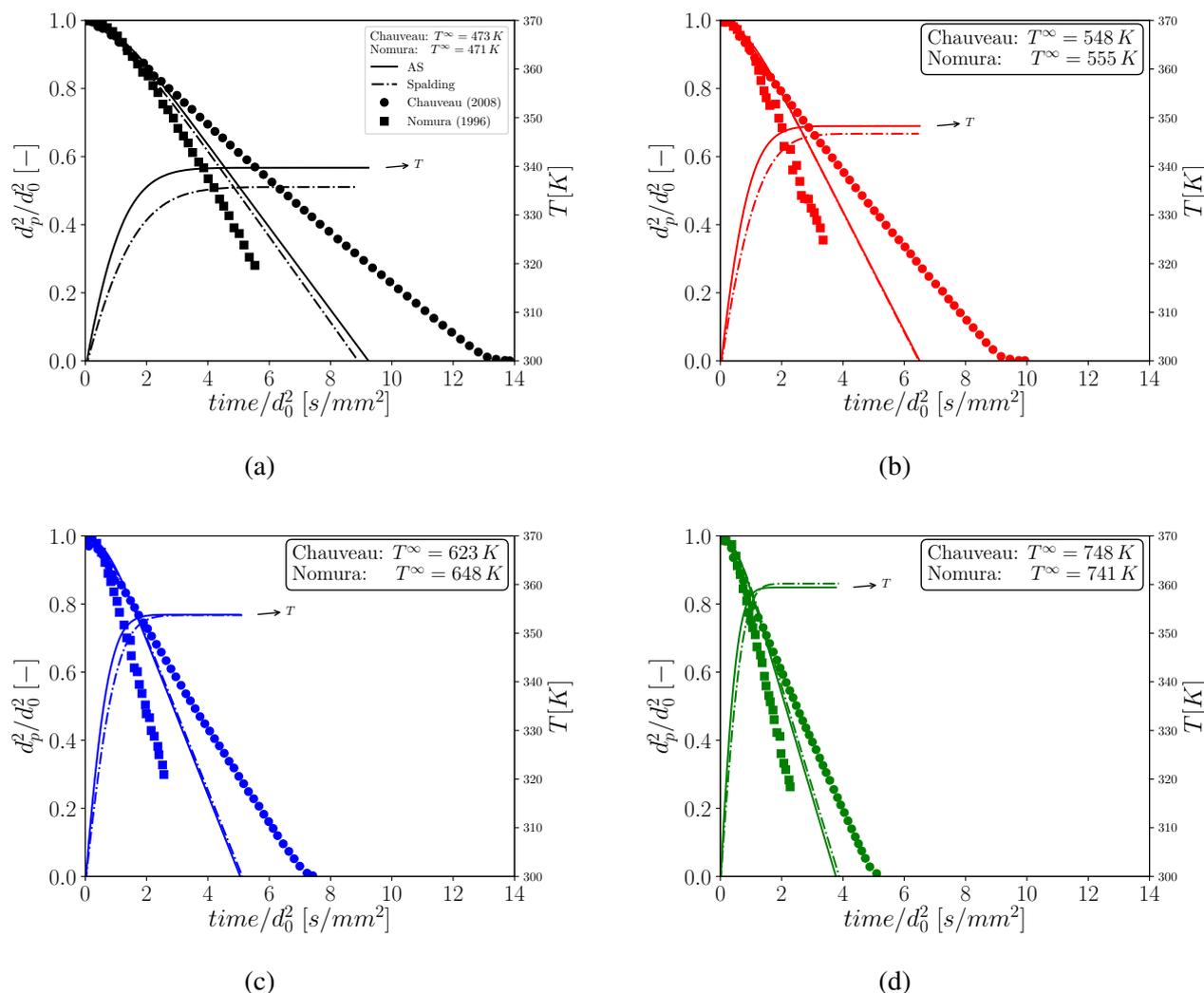


FIGURE 5.5 – Comparaison d'évaporation de gouttes de n-heptane avec les expériences de *Chauveau et al.* [33] et *Nomura et al.* [158] et les modèles d'évaporation d'*Abramzon-Sirignano* (AS) et de *Spalding* ( $P = 0.1 \text{ MPa}$ ).

L'utilisation d'une fibre épaisse dans le cas de *Nomura et al.* apporte un flux de chaleur conséquent à la goutte qui augmente le taux d'évaporation, ce qui peut expliquer l'écart avec les résultats numériques. Cependant, les deux modèles d'évaporation sous-estiment le temps d'évaporation comparé aux résultats de *Chauveau et al.*. De plus, le dispositif de fibre croisées, mise en place pour accrocher la goutte dans le cas de *Chauveau et al.*, n'influence pas le taux d'évaporation contrairement aux autres systèmes de suspension de la goutte. En effet, dans une étude sur les effets de la conduction thermique à travers la fibre servant de support pour accrocher la goutte [33], *Chauveau* montre que le taux d'évaporation des gouttes augmente linéairement avec la section transversale de la fibre (voir Fig. 5.6). Ceci implique que le transfert conductif de chaleur est proportionnel à la surface de la section transversale de la fibre, équi-

valent au carré du diamètre de la fibre  $d_f^2$ . Une extrapolation de la relation linéaire reliant  $d_f^2$  et le taux d'évaporation de la goutte jusqu'à  $d_f^2 = 0$  correspond quasiment au taux d'évaporation obtenu par la technique des fibres croisées.

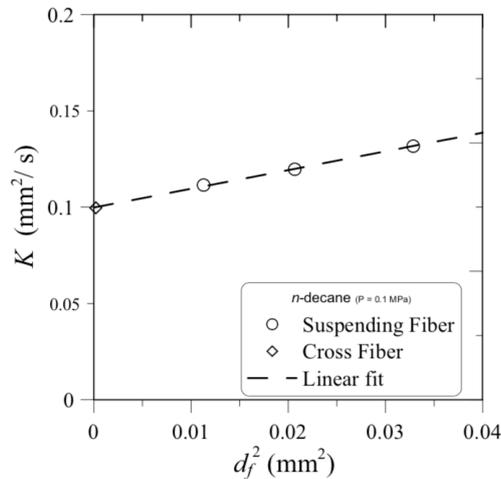


FIGURE 5.6 – Évolution du taux d'évaporation des gouttes de n-décane en fonction du diamètre au carré de la fibre de support *Chauveau et al.* [33].

### 5.2.2 Kérosène

Le kérosène est un fuel qui regroupe plusieurs mélanges de milliers de composants appartenant à différentes classes chimiques (alcanes, aromatiques, composés polycycliques, ...). À ces différentes classes de composés chimiques, on y ajoute différents additifs pour intervenir sur une ou plusieurs propriétés du mélange final que l'on souhaite obtenir. Tous ces procédés de production donnent des types différents du kérosène qui se traduisent dans ses propriétés physiques comme la température d'ébullition, la température de fusion, le point de congélation, la volatilité, etc.

Dans cette partie, l'expérience de *Ghassemi et al.* ( Fig. 5.7) [82] nous sert de référence pour valider le modèle d'évaporation sur une goutte de kérosène. La goutte est suspendue à une fibre de quartz d'un diamètre  $d_f = 0,125 \text{ mm}$ . L'extrémité de la fibre est arrondie avec un diamètre  $d_{fe} = 0,250 \text{ mm}$  afin d'assurer un bon maintien de la goutte. Dans la configuration numérique, la goutte d'un diamètre initial  $d_0 = 1,52 \text{ mm}$  est placée au centre d'un large cube de dimensions  $1 \times 1 \times 1 \text{ m}^3$  pour éviter les effets numériques des bords. Le cube est pré-rempli de diazote à  $T_g = 973 \text{ K}$  sous une pression atmosphérique.

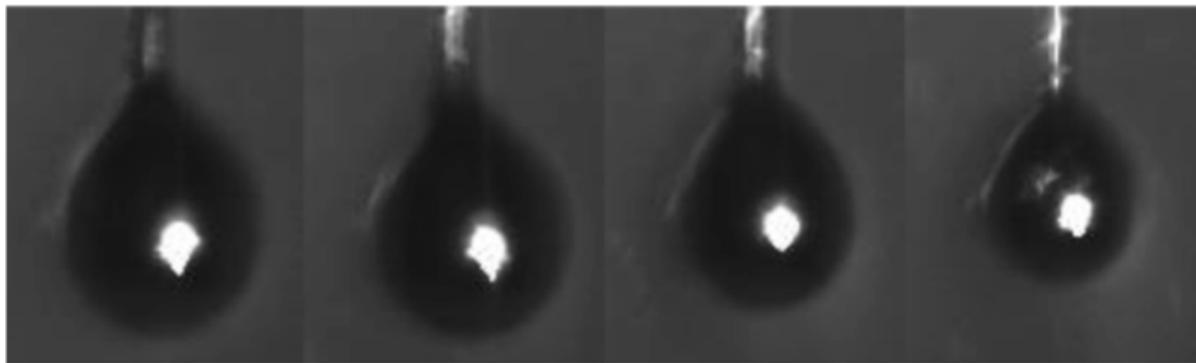


FIGURE 5.7 – Images séquentielles de l'expérience de *Ghassemi* et al. [82] montrant l'évaporation de la goutte du kérosène

Pour réaliser cette validation, trois calculs sont mis en place avec différents modèles de composition du kérosène afin de vérifier l'influence du modèle choisi sur l'évaporation d'une goutte isolée. Le premier modèle consiste en une goutte de kérosène composée d'un surrogate mono-espèce représenté par un composant générique, appelé KERO, issu du schéma cinétique BFER\_KERO développé par *Franzelli* [74]. Ses propriétés thermodynamiques et de transport sont une combinaison linéaire des propriétés données par les polynômes NASA de trois espèces de base [74]. Pour cette étude de validation, les propriétés de la phase liquide ( $L_v, C_{pl}$ ) sont tabulées à partir des données de *Yaws* [242] pour le composant dodécane. En effet, d'après *Ghassemi* citant *Goodger* [87], les propriétés moyennes globales du kérosène sont très proches de celle du dodécane.

Le deuxième modèle de la composition du kérosène est basé sur le schéma semi-détaillé de *Luche* [132]. Il s'agit d'un surrogate du kérosène noté KERO\_LUCHE, avec trois espèces, le n-décane ( $nC_{10}H_{22}$ ), le n-propylcyclohexane ( $CYC_9H_{18}$ ) et le propylbenzène ( $PHC_3H_7$ ). Les surrogates de kérosène choisis sont tous les deux dérivés d'un autre surrogate à trois espèces développé par *Cathonnet* [28] et *Dagaut* [46]. Chacune des trois espèces fait partie d'une des trois grandes classes des composés chimiques du kérosène. La différence principale entre les deux surrogates KERO\_BFER et KERO\_LUCHE réside dans la cinétique chimique de la phase gazeuse. Lors de son évaporation le surrogate mono-composant KERO libère une seule espèce générique dans la phase gazeuse selon le modèle de composition liquide de la figure (4.2c) et la description du mélange gazeux est celui du mécanisme KERO\_BFER [74] à six espèces et deux réactions. Le surrogate KERO\_LUCHE, quant à lui, libère les trois espèces qui le composent dans la phase gazeuse lors de son évaporation selon un schéma du modèle de la composition liquide de la figure (4.2d). Le tableau (5.2) donne les fractions massiques et les masses molaires

des espèces du composant générique KERO-LUCHE [197] et du composant KERO [74].

Nom de l'espèce	formule	fraction massique	masse molaire [g/mol]
décane	$NC_{10}H_{22}$	0.767	142.184
propylbenzène	$PHC_3H_7$	0.132	120.194
propylcyclohexane	$CYC_9H_{18}$	0.101	126.241
<b>KERO-LUCHE/KERO</b>	$C_{9.73957}H_{200542}$	1.0	137.195

TABLE 5.2 – Définition du surrogate du kérosène KERO-LUCHE [132].

À partir des espèces listées dans le tableau ci-dessus, on construit un fuel liquide multi-composants. Chaque espèce qui constitue le surrogate est considérée comme un composant indépendant avec ses propriétés propres. Lesdites propriétés liquides, issues des données de *Yaws et al.*, sont résumées dans le tableau suivant (Tab. 5.3).

Propriété		$NC_{10}H_{22}$	$PHC_3H_7$	$CYC_9H_{18}$
<b>Température d'ébullition</b>	[K]	447.30	432.00	429.90
<b>Masse molaire</b>	[kg/mol]	0.142285	0.120194	0.126242
<b>Masse volumique</b>	[kg/m <sup>3</sup> ]	724.7	900.0	790.7
<b>Chaleur latente de vaporisation</b>	[kJ/kg]	281.466	319.410	289.043
<b>Chaleur spécifique</b>	[kJ/kg/K]	2642.36	2082.56	2231.58

TABLE 5.3 – Propriétés thermodynamiques des trois composants liquides de base à la température d'ébullition [242].

Les trois cas étudiés sont résumés dans le tableau ci-dessous (Tab. 5.4). Par soucis de simplification, on associe un code de référence pour chaque cas afin de s'y référer par la suite dans les graphes et les commentaires.

#Réf - Cas test	Modèle du fuel	Nombre de composants	Nombre d'espèces de chaque composant
K1-KERO-BFER	mono-composant	1	1
K2-KERO-LUCHE	mono-composant / surrogate	1	3
K3-KERO-MC	multi-composants	3	1

TABLE 5.4 – Modèles du fuel kérosène utilisés dans les cas tests.

La figure (5.8) présente l'historique d'évaporation de la goutte de kérosène. Elle montre le carré du diamètre de la première simulation (K1) en fonction de temps d'évaporation comparé

à celui de l'expérience de *Ghassemi et al.* [82], ainsi que la température de la goutte. Le modèle d'évaporation (AS) est en bon accord avec les résultats de *Ghassemi et al.*.

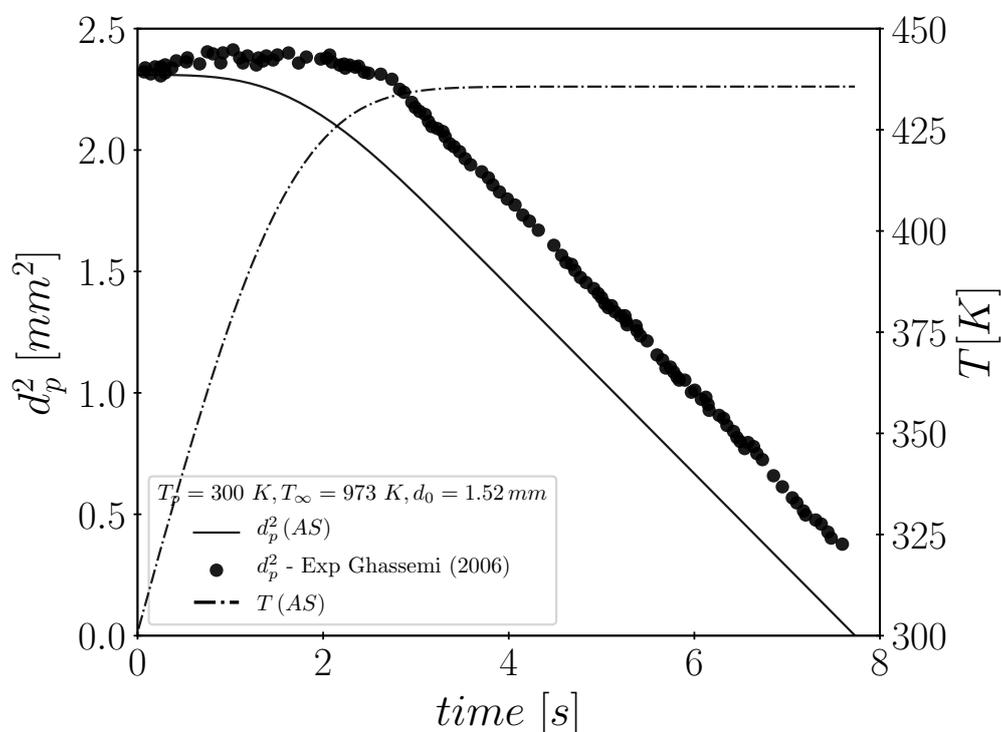


FIGURE 5.8 – Évolution du diamètre au carré et de la température de la goutte de kérosène à  $T = 973 K$  pour le cas K1. Comparaison avec les résultats expérimentaux de *Ghassemi et al.* [82].

La courbe de régression de la surface de la goutte présente deux comportements distincts de l'évaporation de la goutte du kérosène. Comme *Ghassemi* l'a déjà noté dans son article, la première étape présente la période de préchauffage de la goutte durant laquelle le diamètre augmente puis diminue. Dans ce cas de figure, l'augmentation du diamètre au carré  $(\Delta d^2)_{max}$  est estimée à 4%, ce qui correspond à une variation du diamètre initial de 2%. Ce comportement observé expérimentalement sur ce cas du kérosène, est dû au chauffage de la goutte par conduction thermique depuis le gaz environnant et à la dilatation thermique qui s'en suit [82]. Le temps de chauffage de la goutte en évaporation est également étudié par *Morin et al.* [148]. Pour des gouttelettes de biocarburants dérivés d'huiles végétales, cette période de préchauffage est divisée en trois zones : zone d'augmentation du diamètre ou de dilatation, zone plateau où le diamètre est constant et la dernière zone d'évaporation de la goutte avec un taux modéré. Ce phénomène d'expansion et de contraction du diamètre lors de la période de préchauffage n'est pas observé numériquement du fait que la densité du liquide est considérée constante et n'est

pas soumise aux effets de la température. La variation du diamètre de la goutte, due à la variation de la densité avec la température, n'est pas modélisée. Le temps de préchauffage  $t_0$ , correspond au temps mis par la goutte pour atteindre un état quasi-stable. Durant cette période, la température de la goutte et son taux d'évaporation augmentent fortement (Fig. 5.9a). Ce temps coïncide avec le maximum de taux d'évaporation massique ( $\dot{m}$ ). Une fois que la température de la goutte avoisine la température d'ébullition, l'évaporation de la goutte commence pour atteindre une régression linéaire de la surface de la goutte, la température de la goutte n'évolue plus et le taux d'évaporation massique ne fait que diminuer. À partir de l'instant  $t_0$ , l'évaporation contrôle la taille de la goutte et on récupère la loi  $d^2$  présentée par la régression linéaire du diamètre au carré. Ainsi, le carré du diamètre se ré-écrit comme  $d_p^2 = d_0^2 - C_{evap}dt$ , avec  $C_{evap}$  le coefficient d'évaporation, exprimé comme la dérivée temporelle du diamètre carré de la goutte (Eq. 5.1). Ce coefficient d'évaporation, ou le taux d'évaporation, peut être extrait de la partie linéaire de la courbe d'évaporation dont la pente est négative.

$$C_{evap} = -\frac{d(d_p^2)}{dt} . \quad (5.1)$$

Dans ce cas d'évaporation de la goutte du kérosène, le coefficient  $C_{evap}$  se stabilise à la valeur expérimentale donnée par Ghassemi  $C_{evap} = 0.39 \text{ mm}^2/\text{s}$  comme présenté sur la figure ( Fig. 5.9b).

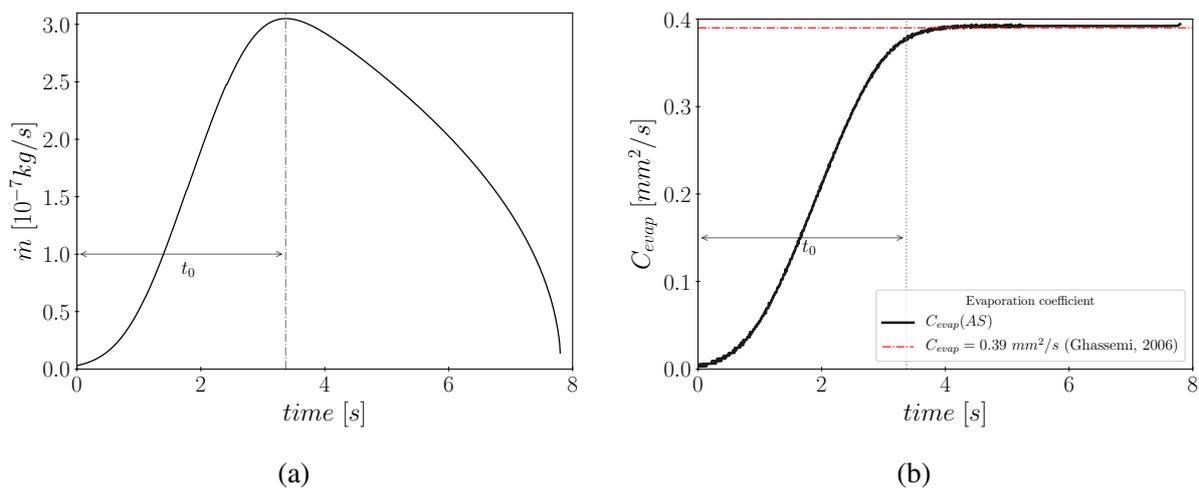


FIGURE 5.9 – Évaporation de la goutte du kérosène : (a) Coefficient d'évaporation  $C_{evap}$  (b) taux d'évaporation massique  $\dot{m}$ .

Dans les mêmes conditions expérimentales, la dernière simulation est reconduite avec d'autres modèles de composition liquide de la goutte exposés à la section 4.3. Les différentes compositions de la goutte du kérosène sont présentées précédemment dans le tableau (Tab. 5.4).

La figure (5.10) montre une comparaison de l'évolution de carré du diamètre d'une goutte de kérosène avec différentes compositions. Nous rappelons ici que le cas présenté *supra*, est celui d'une goutte (K1) dont la composition est modélisée par un surrogate mono-espèce (KERO\_BFER). La goutte (K2) est composée d'un surrogate multi-espèce (KERO\_LUCHE) avec des fractions massiques définies dans le tableau (5.2). Les propriétés du composant générique KERO\_LUCHE sont calculées comme une moyenne des trois espèces principales citées ci-dessus. Les propriétés thermodynamiques et de transport sont données dans *Franzelli et al.* [74] et *Sanjosé et al.* [197]. Enfin, le cas multi-composants de la goutte (K3), composée des trois espèces du tableau (5.2), chacune considérée comme un composant indépendant avec ses propres propriétés liquides.

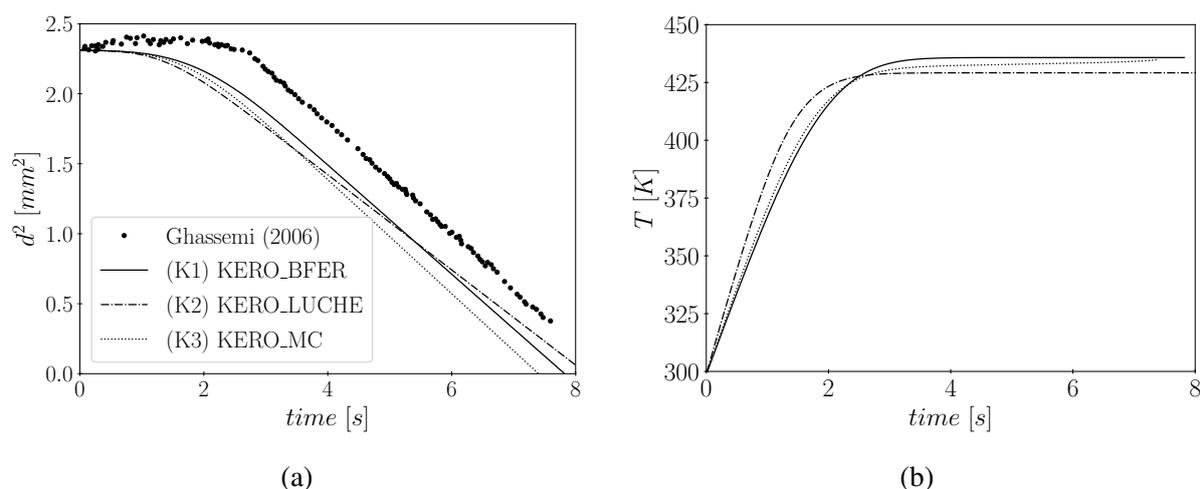


FIGURE 5.10 – Comparaison de trois modèles de composition liquide de la goutte du kérosène. (a) Courbes de régression de la surface de la goutte. (b) Température de la goutte.

Il ressort de cette figure que les deux gouttes, de compositions liquides (K1) et (K3), ont des comportements très proches. La régression de la surface de la goutte ainsi que la température suivent la même tendance. Les coefficients d'évaporation se stabilisent à des valeurs proches de celles données par *Ghassemi*, contrairement à la courbe de la goutte (K2) qui se détache avec une pente différente. Cela se traduit par un coefficient d'évaporation plus faible que les deux premiers (voir Tab 5.5 et Fig. 5.11a).

En détaillant les propriétés de l'évaporation (Fig. 5.12), cette similitude dans le comporte-

Cas test	$C_{evap} [mm^2/s]$
K1-KERO-BFER	0.3903
K2-KERO-LUCHE	0.3401
K3-KERO-MC	0.4080

TABLE 5.5 – Comparaison des coefficients d'évaporation des différents cas.

ment de l'évaporation des gouttes (K1) et (K3) est également confirmée, notamment sur les taux d'évaporation massiques qui présentent les mêmes valeurs maximales (Fig. 5.11b).

Par ailleurs, la température exprimée par les équations (Eqs. 4.52, 4.51) dépend, entre autres, du nombre de Spalding thermique  $B_t$  et de la chaleur spécifique de la vapeur du fuel  $C_{p,v}$ . Ces deux dernières propriétés suivent la même tendance exprimée par les courbes de température des gouttes (K1) et (K3) (Fig. 5.12a-b).

Le n-décane est le composant dominant dans la composition (K3) et ses propriétés sont très proches du composant modélisant le surrogate KERO. En comparant les propriétés de chaque composant le cas échéant, le nombre de Schmidt  $Sc_i$ , le nombre de transfert de masse  $B_{m,i}$  et le coefficient de diffusion des composants  $D_i$ , celles de n-décane sont très proches des propriétés du KERO (K1) (Figs. 5.12e-f, 5.13). D'où le comportement d'évaporation très proches des gouttes (K1) et (K3).

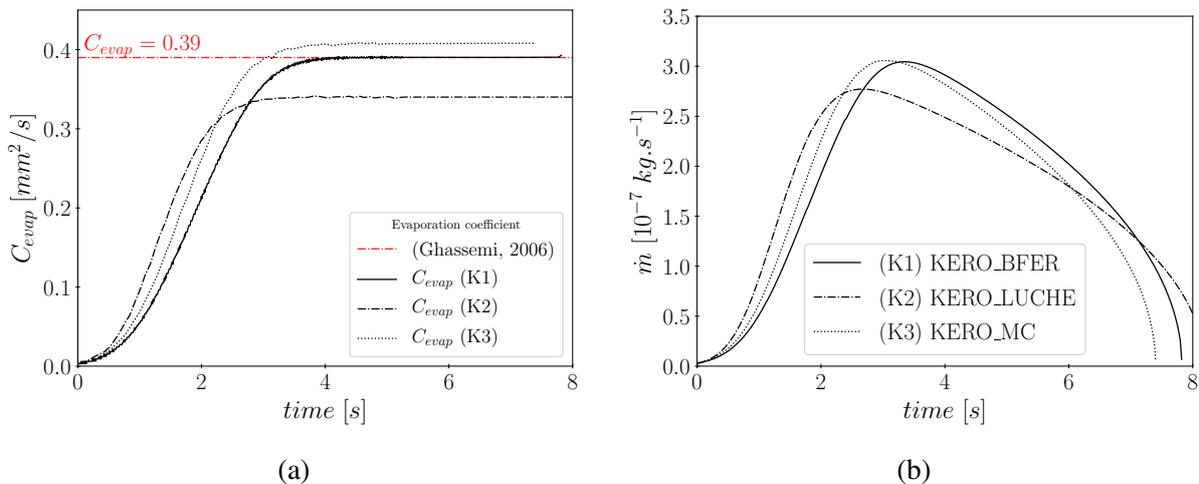


FIGURE 5.11 – Coefficient d'évaporation et taux d'évaporation massique de la goutte du kérosène pour différents modèles de composition liquide.

## Validation du modèle d'évaporation sur une goutte isolée

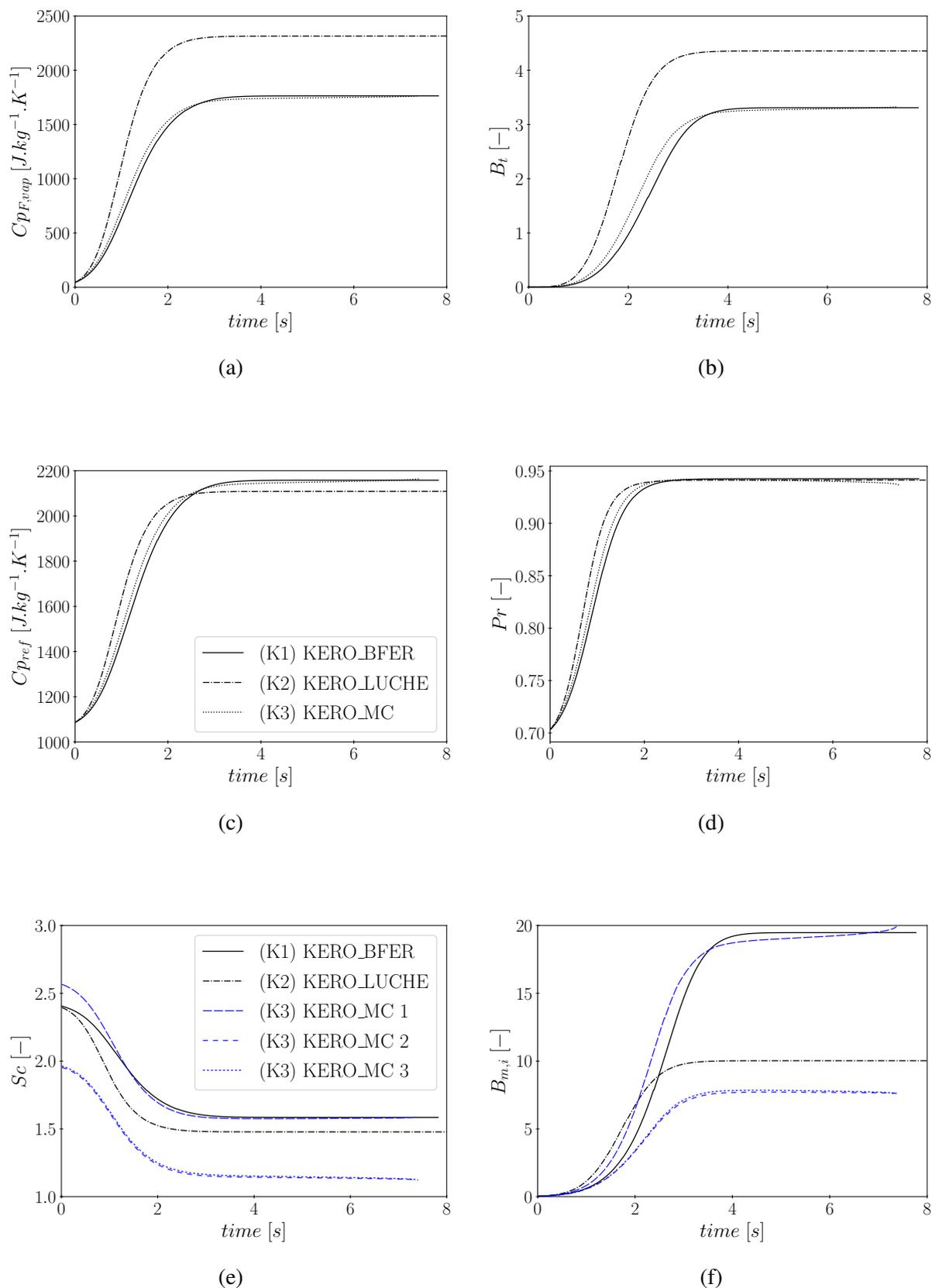


FIGURE 5.12 – Comparaison des propriétés de la goutte du kérosène pour différents modèles de composition liquide.

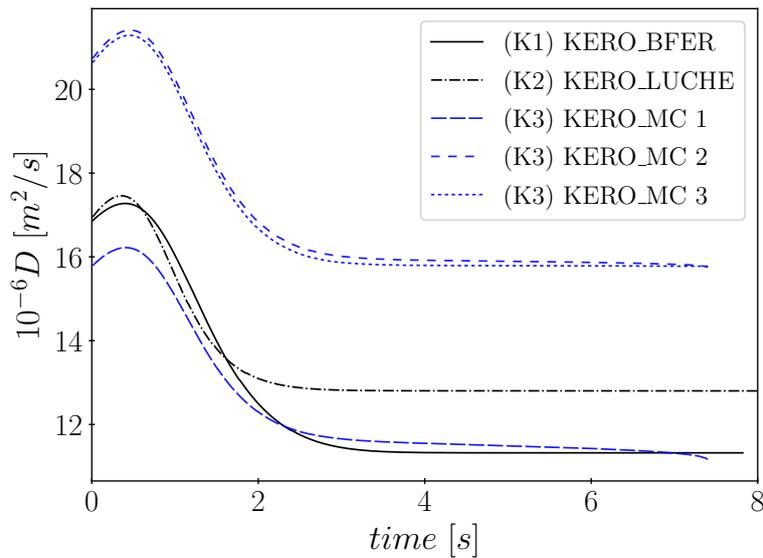


FIGURE 5.13 – Coefficient de diffusion de la goutte du kérosène pour différents modèles de composition liquide.

Il faut également noter la différence dans l'évaporation des gouttes de compositions (K2) et (K3). Les deux gouttes ont une composition à base de trois espèces (voir Tab 5.3), mais elles s'évaporent à des vitesses différentes. En effet, en comparant les diffusivités des espèces (Fig. 5.13), nous constatons que, dans le cas de la goutte (K3) constituée de trois composants, chacun a une diffusivité différente, tandis que la goutte (K2), avec trois espèces modélisées par un seul surrogate, s'évapore avec un coefficient de diffusion unique. L'hypothèse du taux d'évaporation identique pour les trois espèces et du même profil de fraction massique dans le gaz semble donc inadéquate au kérosène. Le couple (K1) et (K3) sont à privilégier.

## 5.3 Cas d'évaporation multi-composants pour une goutte statique

### 5.3.1 n-heptane/n-hexadécane

Une étude sur l'évaporation bi-composants d'un mélange (50%) de n-heptane/n-hexadécane pour différentes températures et pressions a été réalisée par *Ghassemi et al.* [81]. Ici on s'intéresse au cas d'une évaporation à pression atmosphérique. Une goutte de diamètre initial compris entre 1.1 mm et 1.3 mm est placée dans un milieu  $N_2$  gazeux à l'aide d'une fibre de quartz de diamètre  $d_f = 0.125$  mm.

Avant d'exposer le cas bi-composants, *Ghassemi* a réalisé une étude d'évaporation avec des fuels mono-composant purs dans différentes conditions de température et de pression. Nous reproduisons ici les deux cas, n-heptane pur et hexadécane pur à pression atmosphérique et une température de gaz environnant à  $T_g = 973 \text{ K}$ . Le résultat est illustré par la figure 5.14.

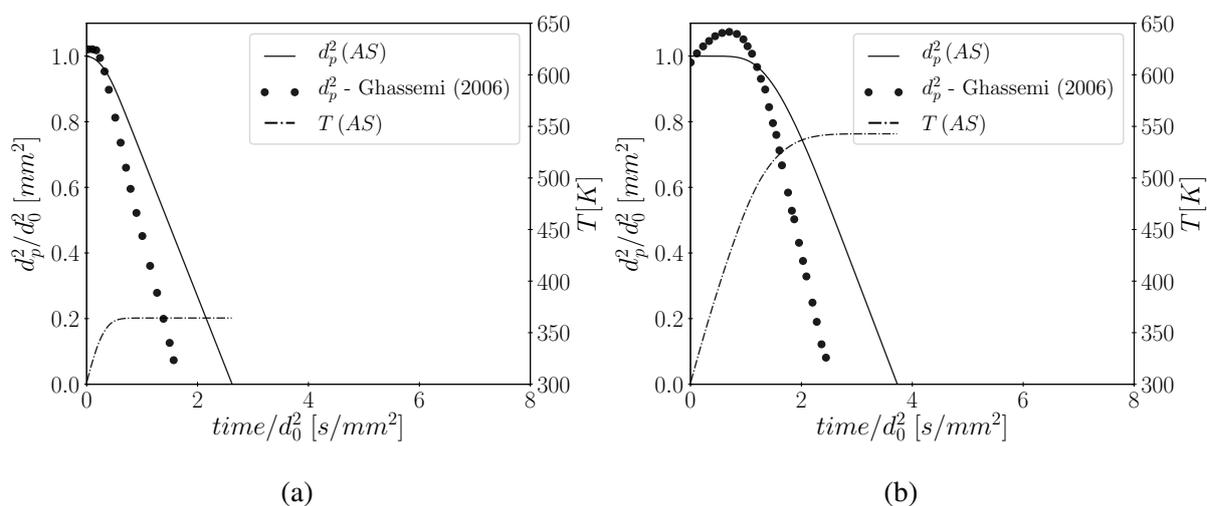


FIGURE 5.14 – Évaporation d'une goutte mono-composante à  $T_g = 973 \text{ K}$ . (a) n-heptane et de (b) hexadécane purs. [81]

Même si la taille de goutte est plus importante et que la température du milieu ambiant est très élevée, on retrouve la même tendance entre les résultats numériques et expérimentaux concernant le cas n-heptane pur comparé au cas mono-composant de *Nomura*. En effet un écart entre les deux résultats persiste du fait de l'ajout d'un flux de conduction par la fibre de quartz, ce qui accélère l'évaporation. Le même argument reste valable pour expliquer l'écart entre les résultats dans le cas hexadécane pur. Le modèle d'évaporation reproduit également le temps de préchauffage de la goutte de hexadécane pur mais pas la dilatation du diamètre de la goutte pour les mêmes raisons que celles avancées dans le cas du kérosène.

Néanmoins, l'évaporation de la goutte de hexadécane dans un milieu à basse température ( $T_g = 673 \text{ K}$ ) illustrée par la figure (Fig. 5.15), semble répondre mieux au hypothèses du modèle posées au début du chapitre 4. À cette température du gaz ambiant, le temps de chauffage est plus long et le phénomène d'expansion thermique du diamètre de la goutte n'est pas aussi significatif que lors d'une température du gaz à  $T_g = 973 \text{ K}$ . La température de la goutte peut être considérée homogène durant toute la période de l'évaporation.

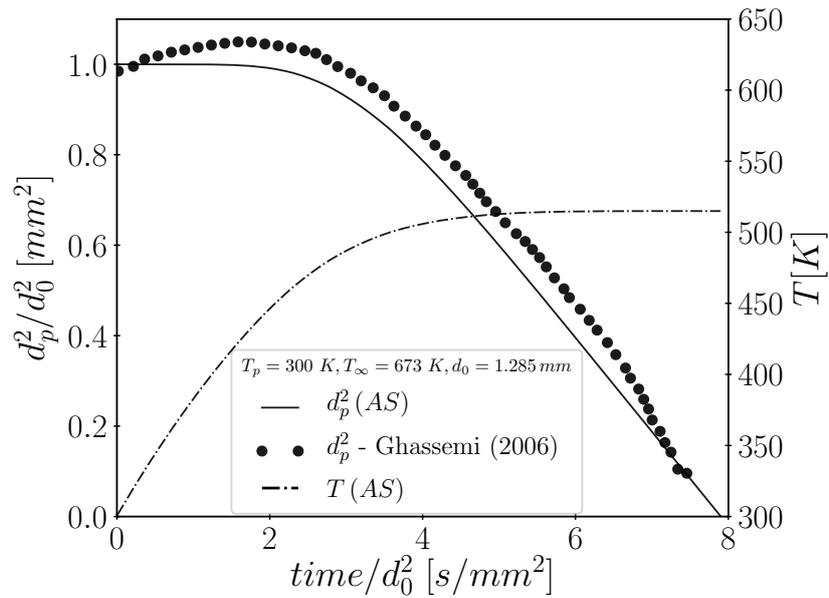


FIGURE 5.15 – Évolution du diamètre au carré et de la température de la goutte hexadécane à  $T_g = 673 K$ .

La figure (5.16) présente la régression de la surface de la goutte et l'évolution de la température au cours du temps pour le cas bi-composants n-heptane/hexadécane.

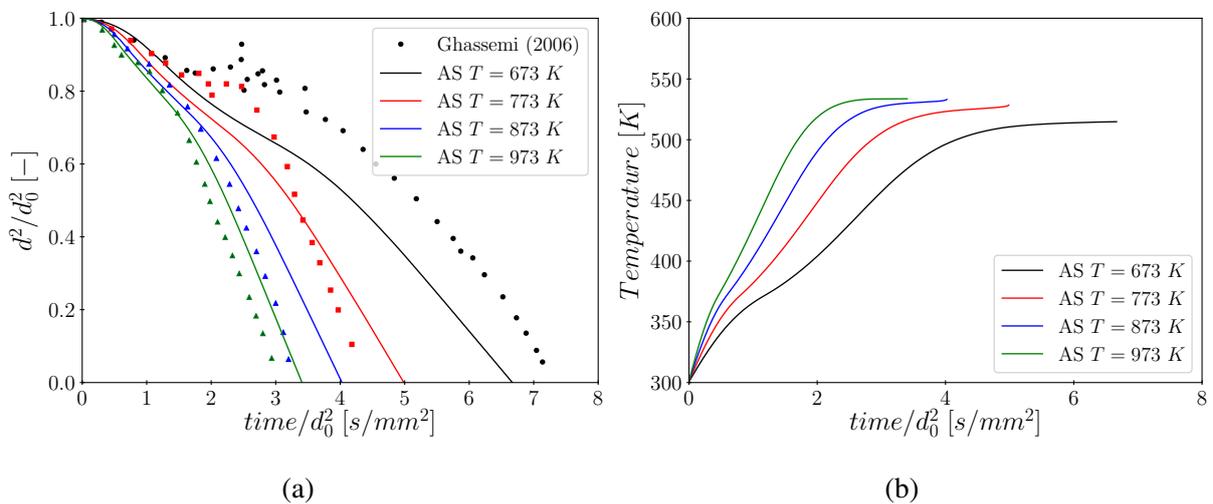


FIGURE 5.16 – Évaporation d'une goutte bi-composants n-heptane / hexadécane (50%) [81],  $d_0 = 1.2 mm$ ,  $T_d = 300K$  et  $T_g \in [673 - 973]$  (a) Évolution de la surface de goutte et (b) de la température.

L'évaporation d'une goutte bi-composants présentée sur la figure (5.16) se comporte différemment d'une goutte mono-composant. Elle expose deux pentes spécifiques à l'évaporation de

chaque composant (Fig. 5.16). L'hexadécane est un composé moins volatil que le n-heptane et il s'évapore donc plus lentement. Premièrement, l'évaporation du n-heptane prend place à basse température, suivie par l'évaporation de n-hexadécane. Quand la température augmente au sein de la goutte, le n-heptane atteint sa température d'ébullition, son taux d'évaporation (Fig. 5.18b) ainsi que sa fraction massique à la surface de la goutte (Fig. 5.18c) atteignent leur maximum, diminuant parallèlement sa fraction massique dans le mélange liquide de la goutte (Fig. 5.18d).

En même temps, la température de la goutte est inférieure à la température d'ébullition de n-hexadécane. De ce fait, la température de la goutte continue d'augmenter provoquant une évaporation rapide du n-heptane, qui se manifeste par une diminution rapide de taux d'évaporation massique de ce composant. La composition de la goutte se modifie au fur et à mesure que le n-heptane s'évapore rapidement (Fig. 5.18d).

La figure (Fig. 5.17) présente les coefficients d'évaporation et les taux d'évaporation massiques de la goutte bi-composants à différentes températures du gaz environnant. Ainsi, on note que le coefficient d'évaporation augmente en fonction de la température. Les courbes de taux d'évaporation présentent deux maximums. Le premier correspond à celui du composant le plus volatil, à savoir le n-heptane. Le second correspond au maximum de taux d'évaporation du deuxième composant, le hexadécane.

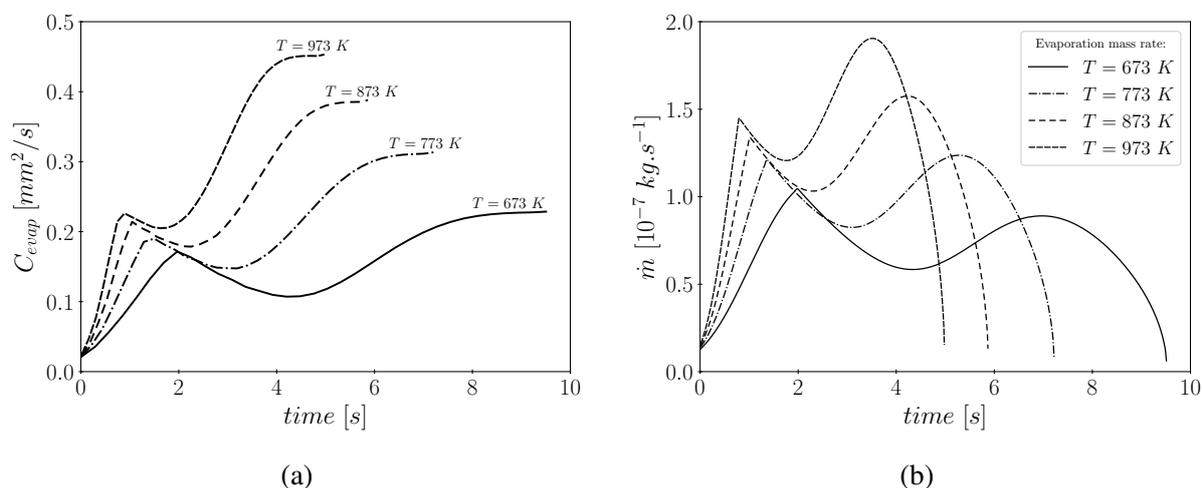


FIGURE 5.17 – Coefficients d'évaporation et taux d'évaporation massiques d'une goutte bi-composants (n-heptane/hexadécane) à différentes températures du gaz ambiant.

Pour vérifier la consistance des résultats numériques, nous comparons le coefficient d'évaporation de la goutte bi-composants avec celles des composants purs (Fig. 5.18a), le n-heptane et

le hexadécane. Le coefficient d'évaporation  $C_{evap}$  est calculé avec la relation (Eq. 5.1).

Les coefficients se stabilisent en fin d'évaporation à des valeurs comprises entre  $0.42 \text{ mm}^2/s$  et  $0.44 \text{ mm}^2/s$ . Il est intéressant de noter le comportement de l'évaporation de la goutte bi-composants n-heptane/n-hexadécane. Au début de l'évaporation et à basse température, le n-heptane de la goutte commence à s'évaporer. La pente de la goutte reste juxtaposée à celle de n-heptane pur. Une fois le maximum de taux d'évaporation massique de n-heptane est atteint, la fraction liquide de n-heptane dans la goutte diminue et c'est la fraction de n-hexadécane qui domine et fait tendre la pente de la goutte bi-composants vers celle de n-hexadécane pur.

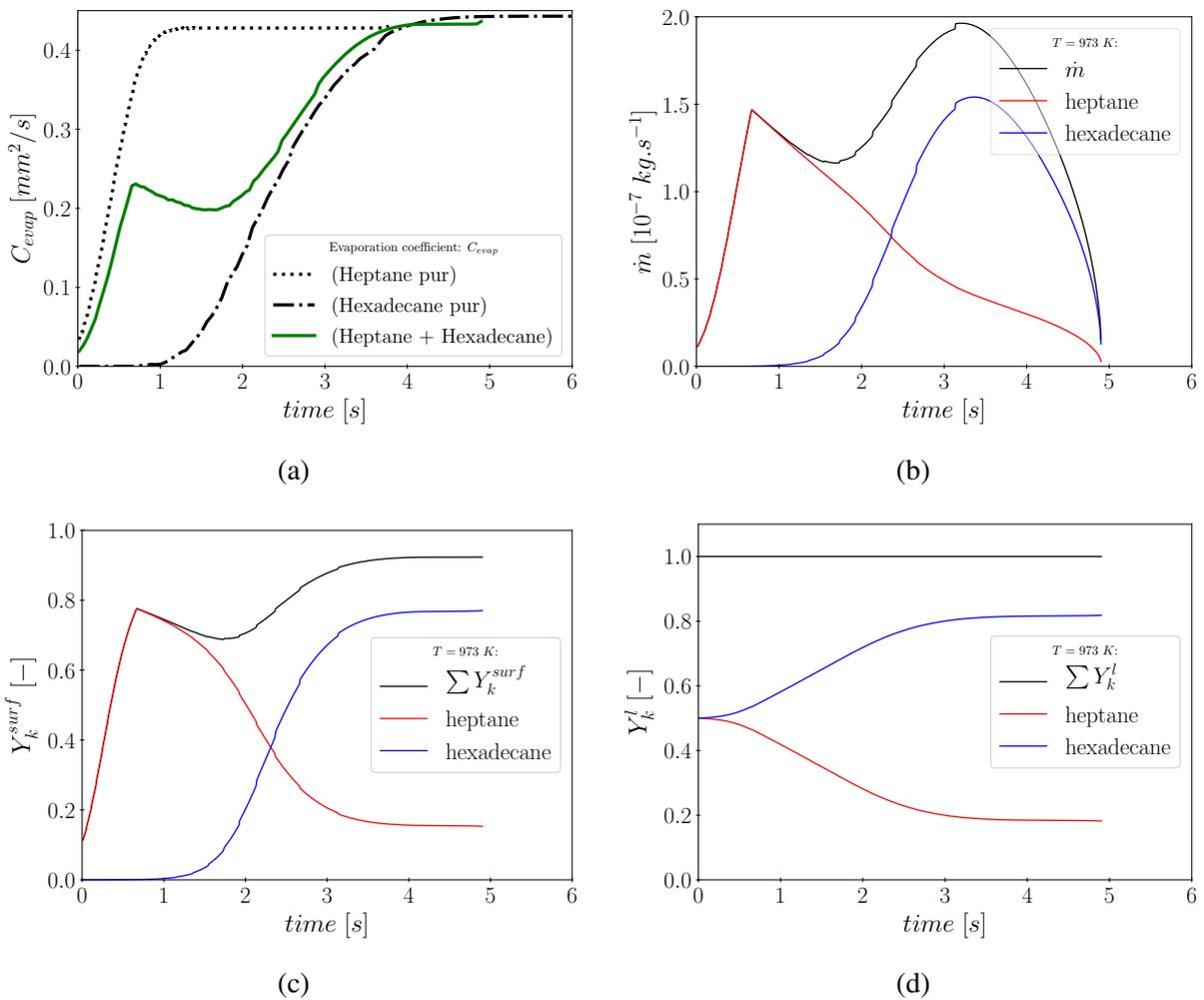


FIGURE 5.18 – Évaporation d'une goutte bi-composants n-heptane/hexadécane.  $d_0 = 1.2 \text{ mm}$ ,  $T_d^0 = 300 \text{ K}$ ,  $T_g = 973 \text{ K}$ .

Les propriétés issues des résultats numériques de la goutte bi-composants sont illustrées sur les figures ci-dessous. Elles sont présentées en fonction de la température du gaz ambiant et des

## Validation du modèle d'évaporation sur une goutte isolée

composants de la goutte le cas échéant.

L'allure des courbes saccadées, notamment celles du nombres de *Prandtl*, s'explique par le changement de palier de la température de référence  $T_{ref}$  définie par l'équation (4.12). En effet, le flux conductif,  $\dot{Q}_l$ , servant à calculer la température de la goutte, fait intervenir la capacité thermique  $C_{p,i}$  des composants (Eq. 4.51). Cette dernière est tabulée par un pas de 15 K pour l'hexadécane et un pas de 7 K pour le n-heptane et constante par morceaux sur cette plage de température.

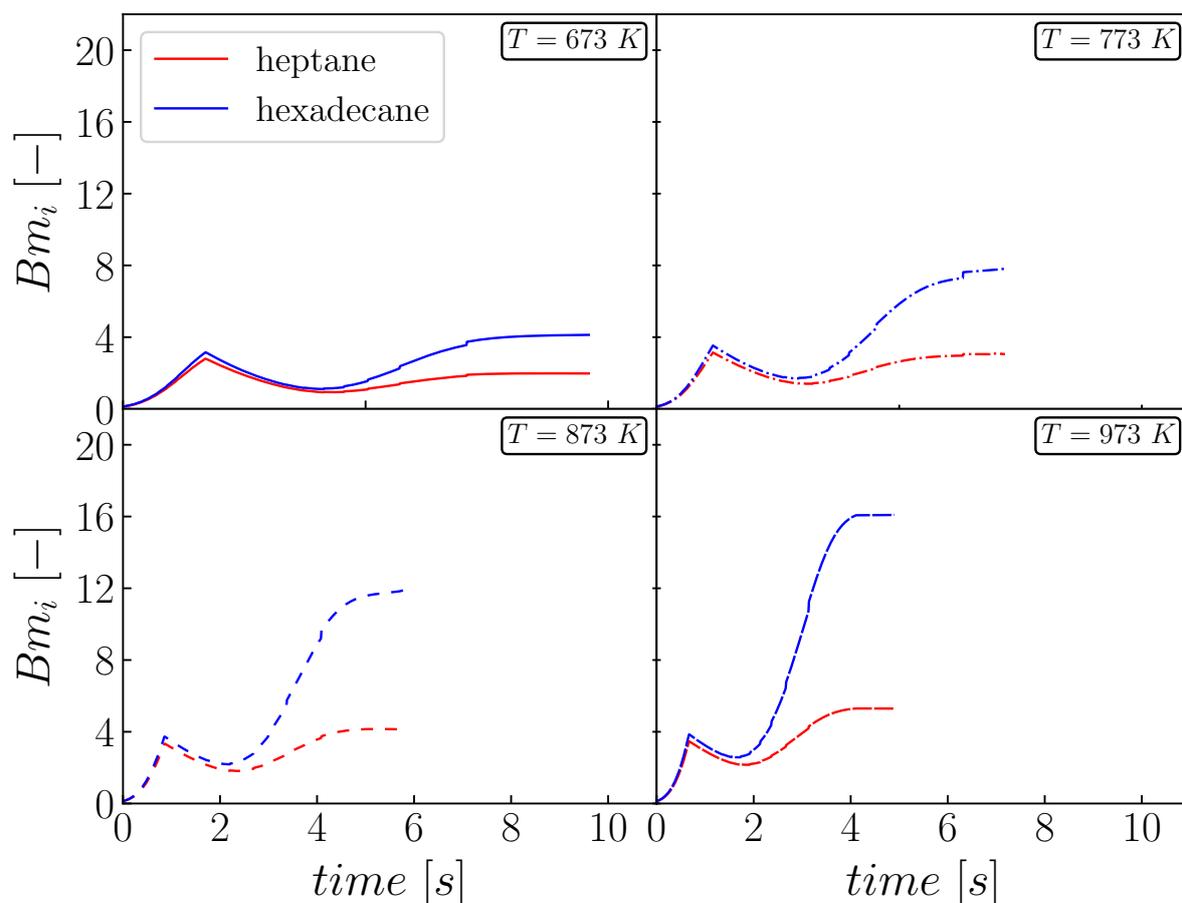


FIGURE 5.19 – Nombres de *Spalding* massiques  $Bm_i$  pour les deux composants de la goutte.

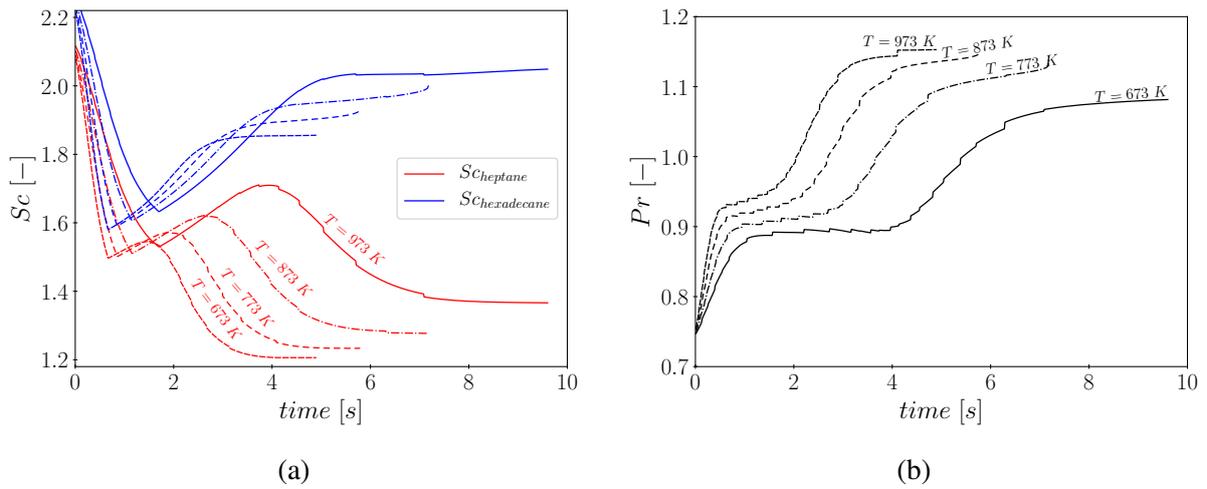


FIGURE 5.20 – Nombre de Schmidt  $Sc$  pour chaque composant et nombre de Prandtl  $Pr$  selon la température ambiante.

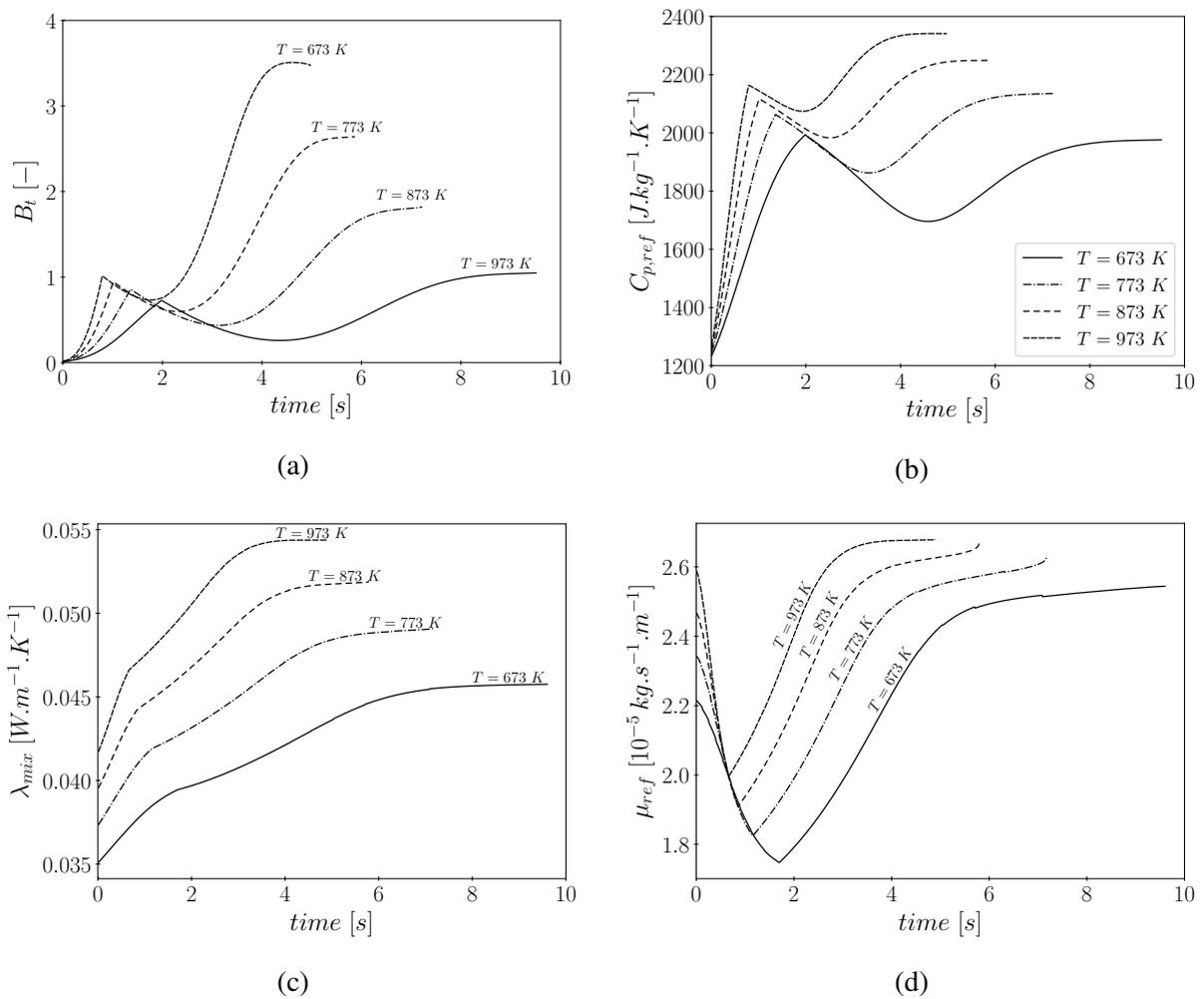


FIGURE 5.21 – Propriétés du mélange autour de la goutte à l'état de référence.

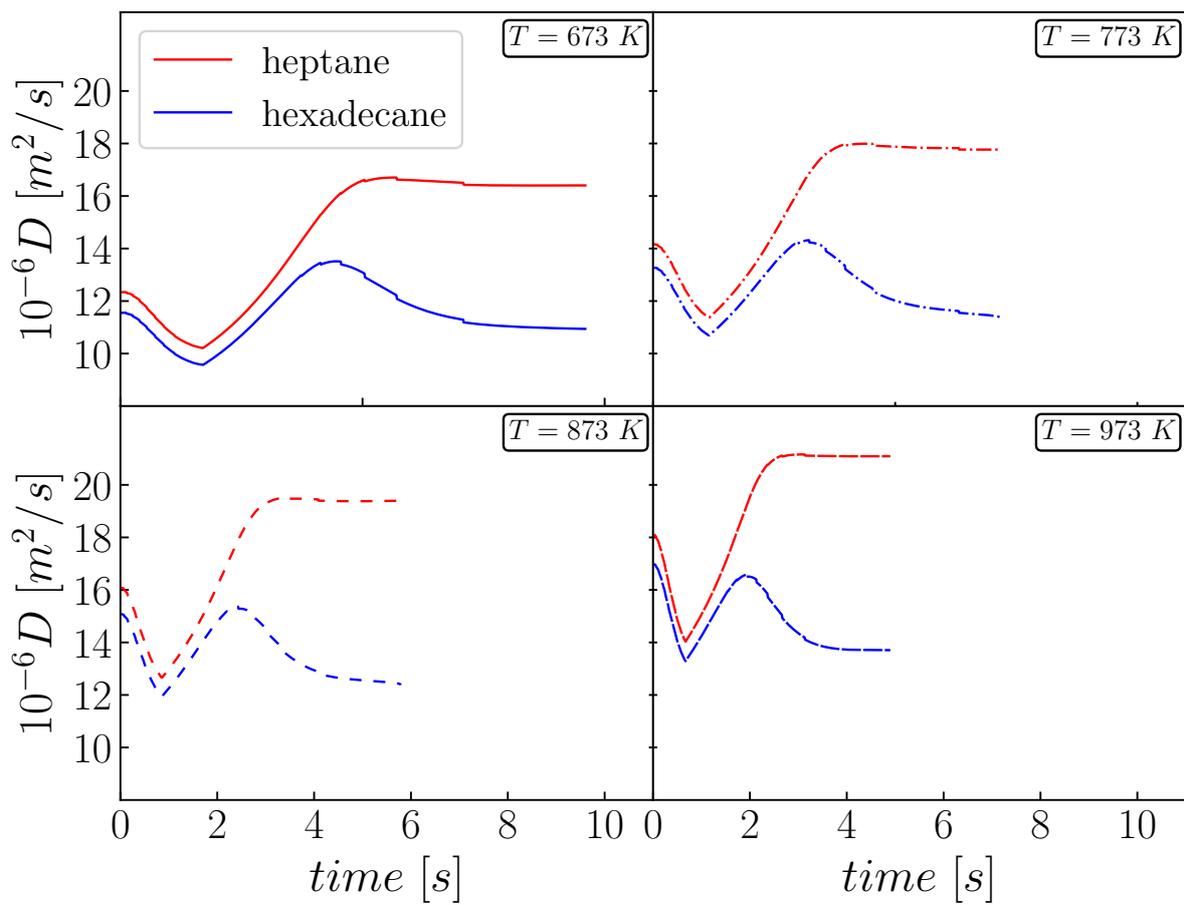


FIGURE 5.22 – Coefficient de diffusion des deux composants de la goutte,  $D_i$ , calculé à l'état de référence.

## 5.4 Évaporation d'une goutte isolée dans un écoulement d'air

Cette section traite de l'évaporation d'une goutte isolée placée dans un écoulement d'air chaud afin de se rapprocher au mieux des processus industriels. Un tel cas d'évaporation met en exergue les différences qu'il pourrait y avoir entre les deux modèles *Spalding* et *Abramzon-Sirignano*.

*Daïf et al.* ont étudié l'évaporation d'une goutte en convection forcée [47]. Ils se sont intéressés à trois cas de figure d'une goutte composée, de n-heptane pur, de n-décane pur et d'un mélange des deux composants avec différentes concentrations volumiques. Nous reprenons ici le cas bi-composants n-heptane / n-décane et nous utilisons les données fournies par l'expérience de *Daïf* [47] pour valider les simulations d'une goutte bi-composants en évaporation sous convection forcée.

La goutte est suspendue à l'extrémité d'une fibre de verre placée perpendiculairement à l'écoulement d'air chaud. La fibre de verre a un diamètre de  $200 \mu m$  et elle se termine par une extrémité arrondie d'un diamètre  $d_{fe} = 400 \mu m$ . L'évaporation se déroule en deux étapes. D'abord, la goutte est placée à l'extrémité de la fibre de verre à la température ambiante sans écoulement d'air. La première phase correspond donc à l'évaporation de la goutte en convection naturelle (NC), dont les conditions initiales, notamment le diamètre, la température et la composition liquide sont bien connues. Puis un système d'ouverture permet de faire entrer un débit d'air chaud pour déclencher la deuxième phase d'évaporation en convection forcée (FC) dont le diamètre initial est enregistré par le système d'acquisition de données. Dans le cas d'une goutte bi-composants, différentes concentrations initiales ont été étudiées. La raison pour laquelle cette configuration d'évaporation en deux étapes est utilisée est de permettre le placement d'une deuxième goutte pendant la phase d'évaporation en convection naturelle avant d'activer le débit d'air chaud en convection forcée. L'interaction entre les gouttes et l'impact de l'évaporation de la deuxième goutte sur la goutte en aval de l'écoulement d'air chaud sont ainsi étudiés expérimentalement. Dans nos simulations, nous reproduisons l'évaporation d'une goutte isolée sans prendre en considération l'interaction entre les gouttes.

Numériquement, on injecte une goutte lagrangienne dans un cube suffisamment grand pour éviter les effets de bords. Puis on déclenche l'évaporation en convection naturelle à  $t^{NC} = 0 s$  jusqu'à un temps  $t^{FC}$ , correspondant au début de la phase d'évaporation en convection forcée,

donné par l'expérience de *Daif et al.*. Le diamètre initial de la goutte, la température et la composition de la goutte sont rapportés pour chaque cas sur les figures correspondantes.

### 5.4.1 Cas d'évaporation d'une goutte mono-composant en convection forcée

Avant d'exposer les résultats d'une goutte bi-composants, la figure (5.23) montre deux exemples de deux gouttes, l'une composée de n-heptane pur (a) et l'autre composée de n-décane pur (b). La comparaison avec les résultats de l'expérience de *Daif* de l'évolution temporelle du diamètre des deux gouttes est présenté, ainsi que la température de la goutte de n-décane. Les conditions initiales des deux calculs sont présentées sur la figure.

Les résultats numériques pour la goutte n-heptane est en bon accord avec l'expérience de *Daif*. Un écart entre les deux diamètres numérique et expérimental est constaté pour le n-décane. Cela peut s'expliquer par l'apport d'un flux de chaleur par la fibre de verre comme vu précédemment pour les cas de l'évaporation d'une goutte statique. La différence du diamètre est plus visible sur le cas n-décane car ce dernier est un fuel moins volatil que le n-heptane, ce qui augmente le temps d'accumulation de l'erreur.

La différence entre les deux modèles numériques se vérifie sur la température de la goutte avec un écart d'environ 10 K sur le n-heptane.

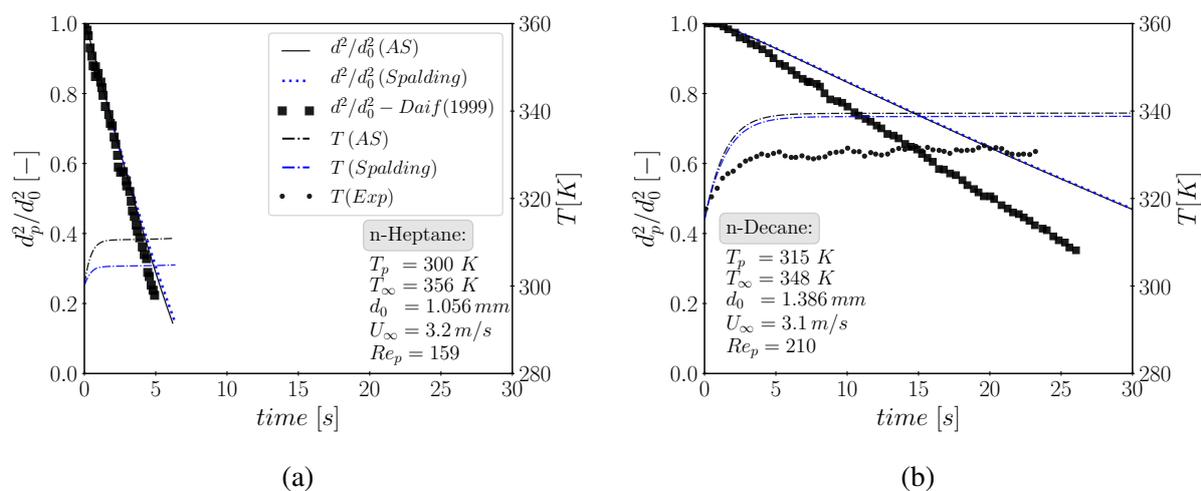


FIGURE 5.23 – Évaporation d'une goutte en convection forcée pour a) n-heptane b) n-décane. Évolution temporelle du diamètre au carré adimensionné et la température de la goutte.

### 5.4.2 Cas d'évaporation d'une goutte bi-composants : n-heptane/n-décane

La figure (5.24) présente l'évaporation d'une goutte composée d'un mélange de n-heptane à 75% et de n-décane à 25% (concentrations volumiques). L'évaporation s'effectue en convection naturelle pendant 22 s, puis elle passe en convection forcée. Les conditions initiales sont rapportées sur la figure.

La figure montre que les deux modèles d'évaporation s'accordent avec l'expérience notamment pendant la première phase d'évaporation en convection naturelle. L'écart entre les deux modèles numériques est dû à la prise en compte de la flottabilité. Cela génère un mouvement du gaz autour de la goutte, qui se manifeste par de faibles valeurs de vitesse relative entre le gaz et la goutte. Lors de la phase d'évaporation en convection forcée, le modèle d'évaporation (AS) s'accorde parfaitement avec le diamètre donné par l'expérience jusqu'à un temps d'évaporation  $t \simeq 30$  s. À partir de cet instant la courbe du diamètre (AS) se détache de celle de l'expérience. Cette différence est explorée avec les deux cas suivants en variant le pourcentages de composition liquide.

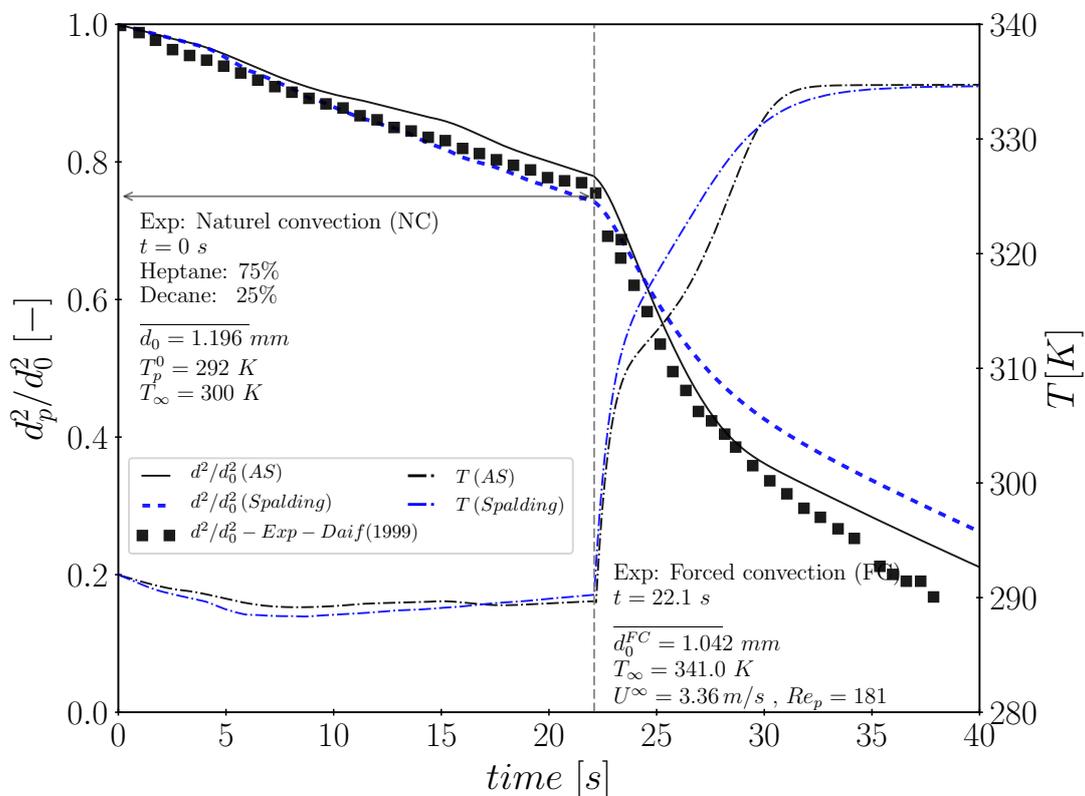


FIGURE 5.24 – Évaporation d'une goutte bi-composants n-heptane / n-décane (75% - 25%). Évolution temporelle du diamètre et de la température.

## Validation du modèle d'évaporation sur une goutte isolée

La différence entre les deux modèles d'évaporation, *Spalding* et *Abramzon-Sirignano* s'accroît tout au long de la phase d'évaporation en convection forcée. Cela vient confirmer que le modèle d'*Abramzon-Sirignano* prend bien en considération les effets convectifs en corrigeant les coefficients de transfert de masse et de chaleur à la surface de la goutte.

La figure (5.25) présente un autre cas d'évaporation avec une concentration volumique du mélange n-heptane / n-décane à (50% – 50%) et une augmentation de la température de l'air à  $T_g = 390 \text{ K}$  pendant la phase d'évaporation en convection forcée. La durée de la première phase de l'évaporation en convection naturelle quant à elle est divisée par deux (11 s).

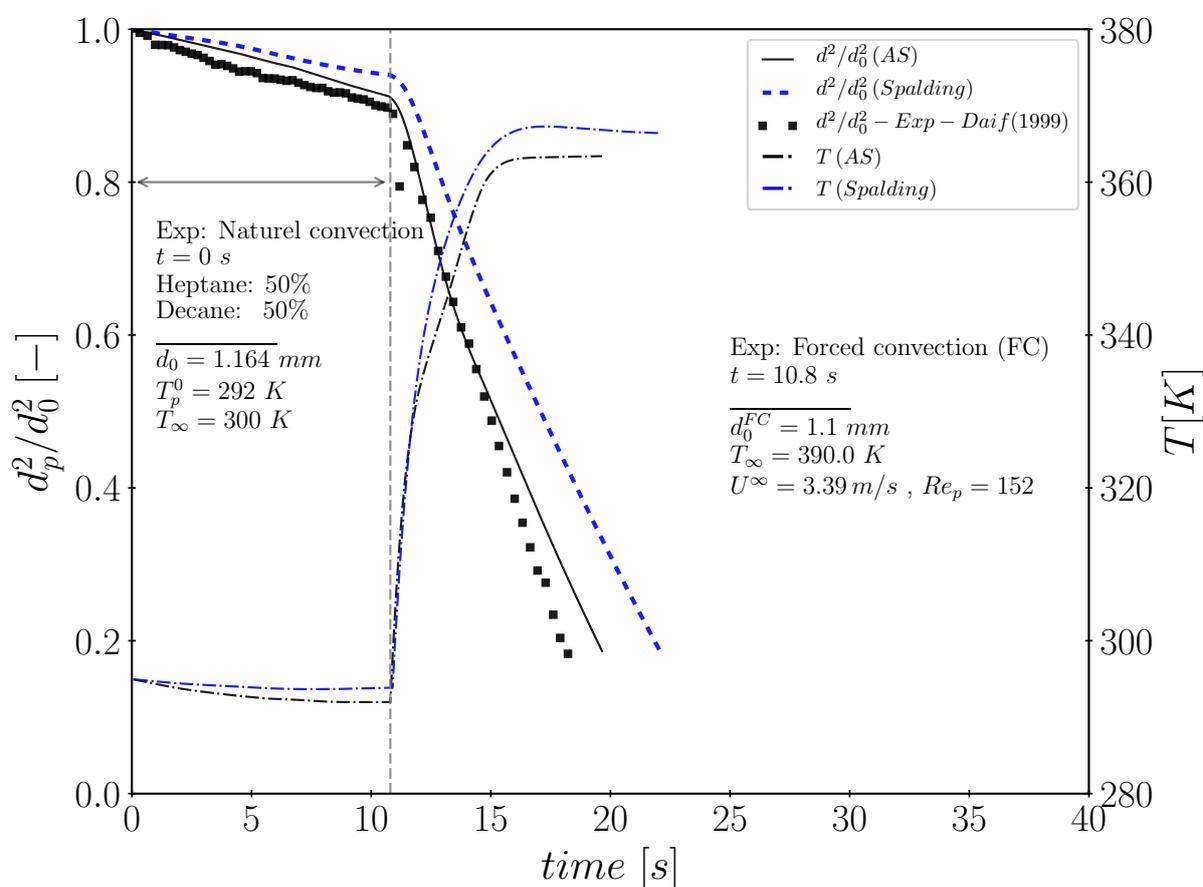


FIGURE 5.25 – Évaporation d'une goutte bi-composants n-heptane / n-décane (50% - 50%). Évolution temporelle du diamètre et de la température.

À une température de l'air plus élevée  $T_g = 390 \text{ K}$ , la différence entre le modèle d'*Abramzon-Sirignano* et l'expérience est réduite. L'écart entre les deux modèles numériques persiste lors de la phase d'évaporation en convection forcée.

La figure (Fig. 5.26) illustre ces différences entre les deux modèles d'évaporation sur certaines propriétés de l'évaporation de la goutte n-heptane/n-décane à (50% - 50%). Globalement, les propriétés données par le modèle de *Spalding* sont sur-estimées par rapport à celles données par le modèle d'*Abramzon-Sirignano*, notamment en phase de convection forcée où la différence entre les deux modèles est exacerbée.

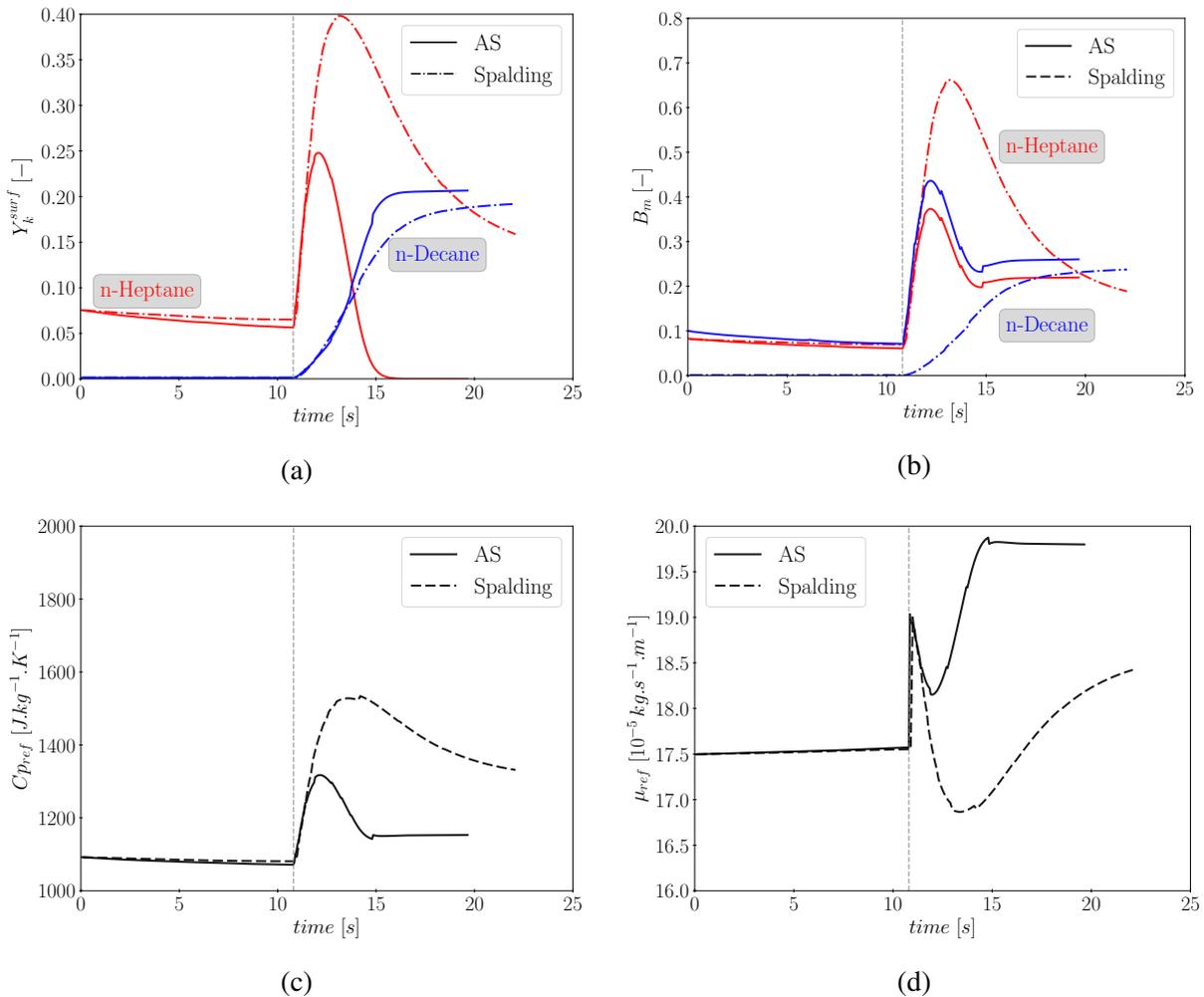


FIGURE 5.26 – Quelques propriétés de l'évaporation de la goutte n-heptane/n-décane (50% - 50%). Comparaison des deux modèles d'évaporation.

Afin de confirmer l'écart entre les deux modèles d'évaporation, un dernier cas d'évaporation d'une goutte isolée du mélange n-heptane / n-décane à (25% - 75%) est présentée sur la figure (5.27). L'évaporation se déroule à convection naturelle pendant 12 s puis elle passe en convection forcée. Les conditions initiales de chaque phase sont renseignées sur la figure.

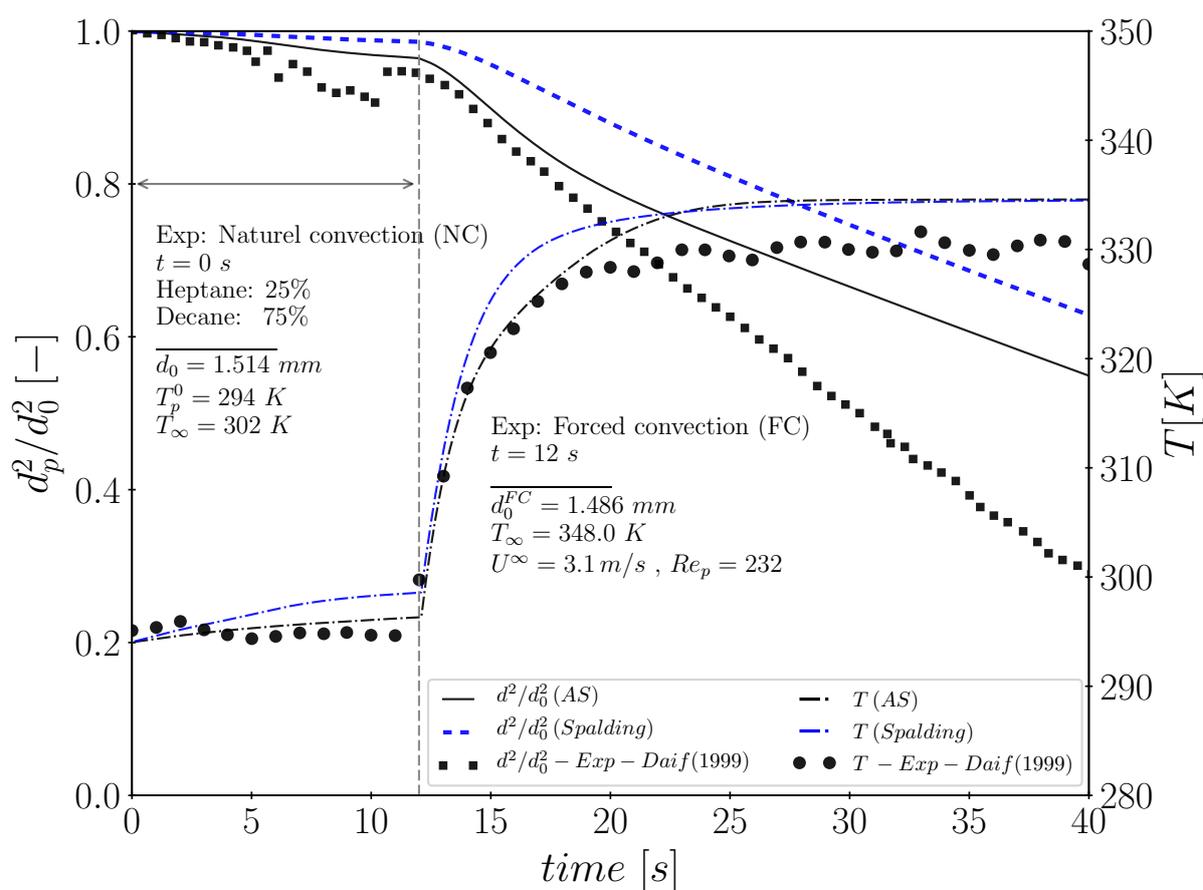


FIGURE 5.27 – Évaporation d'une goutte bi-composants n-heptane / n-décane (25% - 75%). Évolution temporelle du diamètre et de la température.

La température donnée par la simulation s'accorde avec celle donnée par l'expérience de *Daïf et al.* notamment la température issue du modèle AS. Cette dernière s'accorde avec la courbe expérimentale de température lors de la phase d'évaporation en convection naturelle ainsi que lors de la phase transitoire de convection naturelle à la convection forcée.

La courbe du diamètre ( $d^2/d_0^2$  - AS) de la goutte se détache de la courbe expérimentale plus tôt sur la figure (5.25) avec une concentration volumique du n-heptane à 50% par rapport à la figure (5.24) à 75% de n-heptane. Ce comportement de la courbe du diamètre se vérifie encore une fois à une concentration volumique de n-heptane plus basse à 25% (Fig. 5.27).

Le détachement de la courbe ( $d^2/d_0^2$  - AS) de l'expérience peut s'expliquer par le fait que, le n-heptane qui compose la goutte est un combustible très volatil par rapport au n-décane. L'effet de la fibre de verre sur le temps d'évaporation de la goutte bi-composants ne se manifeste pas

tant que la fraction du n-heptane dans le mélange liquide reste supérieure à celle de n-décane. Dès que la fraction du n-heptane tend vers zéro dans la goutte et que le taux d'évaporation massique de n-décane devient supérieur, la courbe du diamètre au carré commence à s'éloigner de la courbe expérimentale comme constaté à la figure (5.23b) avec l'évaporation d'une goutte n-décane pur.

Notons, que outre l'effet de la fibre de verre sur l'évaporation, la fraction du n-heptane en fin d'évaporation joue un rôle dans la différence entre le diamètre issu de la simulation et celui donné par l'expérience. En effet, numériquement, l'évaporation du n-heptane s'accélère lors de la phase d'évaporation en convection forcée, jusqu'à ce que son taux d'évaporation massique s'annule (Fig. 5.28a). La goutte initialement bi-composants, se recompose en une goutte mono-composant (Fig. 5.28b). Le taux d'évaporation pendant le reste de cette phase sera celui du n-décane. Or, expérimentalement, une fraction de n-heptane reste piégée au cœur de la goutte par le n-décane dont la fraction massique est supérieure à la surface. Si la température est très élevée, le n-heptane atteint sa température d'ébullition et s'échappe de la goutte sous forme de micro-explosions. Ce dernier phénomène a été mis en évidence par *Ghassemi et al.* [81] dans son étude d'une goutte bi-composants n-heptane/n-hexadécane et *Daïf et al.* [48] sur l'étude d'une goutte bi-composants éthanol/gazole.

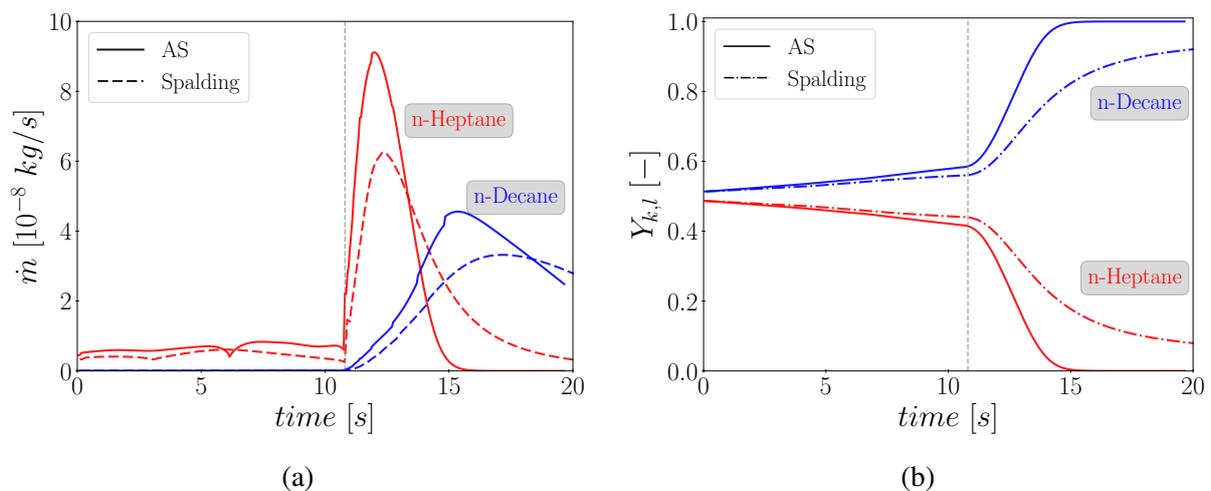


FIGURE 5.28 – Taux d'évaporation massique et fractions massiques liquide de la goutte de n-heptane / n-décane à 50% - 50% .

## 5.5 Effet de la flottabilité sur l'évaporation de la goutte en convection naturelle

Lors de la phase d'évaporation en convection naturelle, les deux modèles d'évaporation, *Spalding* et *AS* ont montré une légère différence sur le diamètre et la température. Or, cette différence est attendue uniquement lorsque la goutte est soumise à une différence de vitesse avec le gaz, autrement dit, si elle s'évapore en convection forcée.

Dans cette section nous nous intéressons à l'effet de la flottabilité dans le gaz sur l'évaporation de la goutte isolée en convection naturelle. Nous reprendrons le cas d'évaporation, en phase de convection naturelle uniquement, d'une goutte n-heptane/n-décane à 75%-25% de fraction volumique, traité dans la section précédente (Cf. 5.4.2 - Fig. 5.24). Ce cas présente la phase d'évaporation en convection naturelle la plus longue des trois cas (22 s). Le modèle d'évaporation utilisé est celui d'*Abramzon-Sirignano* avec ou sans la prise en compte de la gravité  $g = -9.81 \text{ m/s}^2$  dans le gaz ambiant. Pour réaliser ce cas, nous injectons une goutte de diamètre  $d_p = 1.196 \text{ mm}$  dans un cube de 30 cm de côté. Ce dernier est maillé de façon à obtenir 25 mailles de chaque côté et cela dans le but de mieux capter le mouvement du gaz dû à la gravité. La goutte se trouve ainsi placée dans une cellule avec  $\Delta x \approx 10d_p$ .

En convection naturelle, lorsque la goutte s'évapore à gravité zéro, aucune vitesse relative entre la goutte et le gaz environnant n'est enregistrée (Fig. 5.30). Le nombre de *Reynolds* particulaire correspondant reste nul. Contrairement à une goutte en évaporation dans un environnement gazeux sous une gravité  $g = -9.81 \text{ m/s}^2$ , un champ de vitesse du gaz se crée autour de la goutte. Même si cette vitesse résultante de la force de gravité est faible, le nombre de *Reynolds* particulaire n'est pas nul et il subit des variations (voir Fig. 5.31) dues aux cellules convectives qui se forment autour de la goutte comme illustré sur la figure (5.29).

Le nombre de *Reynolds* de la goutte  $Re_p$  entre dans la définition des nombres adimensionnels comme le nombre de *Sherwood* et de *Nusselt* (Eq. 4.26) et le coefficient de traînée  $C_D$ , impactant ainsi la thermodynamique et l'aérodynamique de la goutte.

Les nombres  $Sh^*$  et  $Nu^*$  sont égaux à 2.0 quand le calcul est réalisé à gravité zéro. Mais leurs valeurs évoluent avec celle de  $Re_p$  lors de l'évaporation à gravité normale (Fig. 5.32). Ainsi le nombre de *Spalding* massique est à son tour impacté par ces variations (Fig. 5.33). La somme de toutes ces variations nous conduit à l'explication de la différence, constatée lors de la phase d'évaporation en convection naturelle rencontrée dans la section précédente, entre le diamètre calculé par le modèle d'évaporation *AS* et celui donnée par le modèle de *Spalding*.

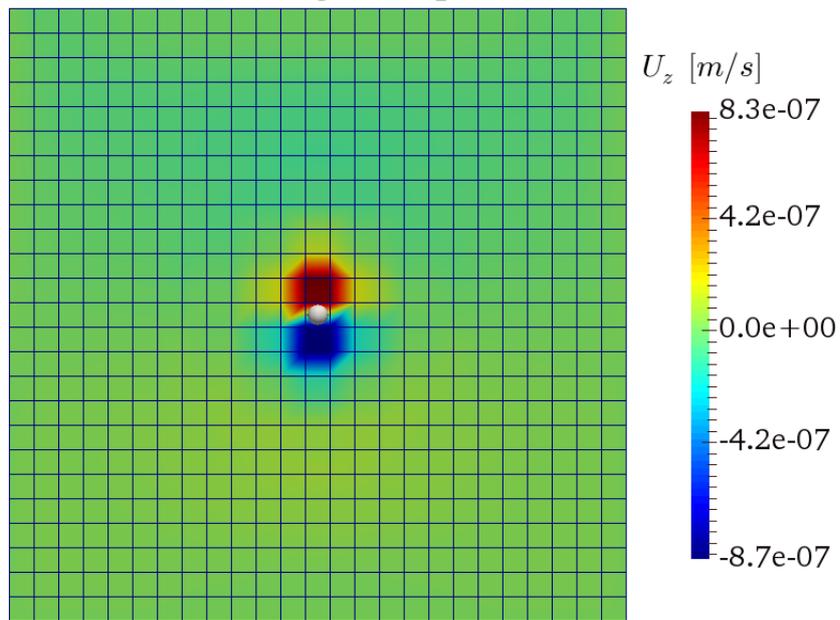


FIGURE 5.29 – Évaporation d'une goutte de n-heptane statique dans l'air au repos. Sans la gravité sur le gaz, la vitesse relative autour de la goutte reste quasi-nulle. Le diamètre de la goutte (sphère de couleur blanche) est amplifié pour visibilité.

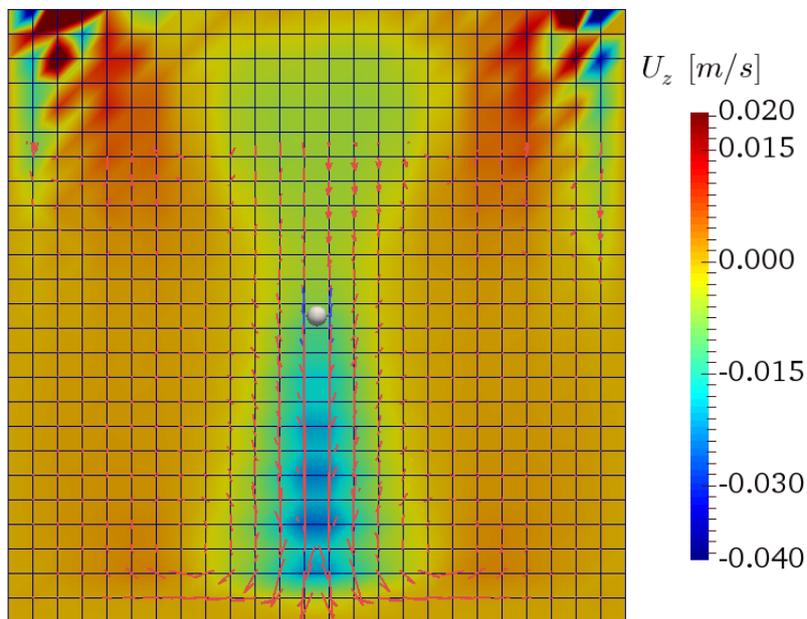


FIGURE 5.30 – Évaporation d'une goutte de n-heptane statique dans l'air au repos. Avec l'activation de la gravité sur le gaz, un mouvement d'air descendant se crée et des cellules convectives se forment autour de la goutte.

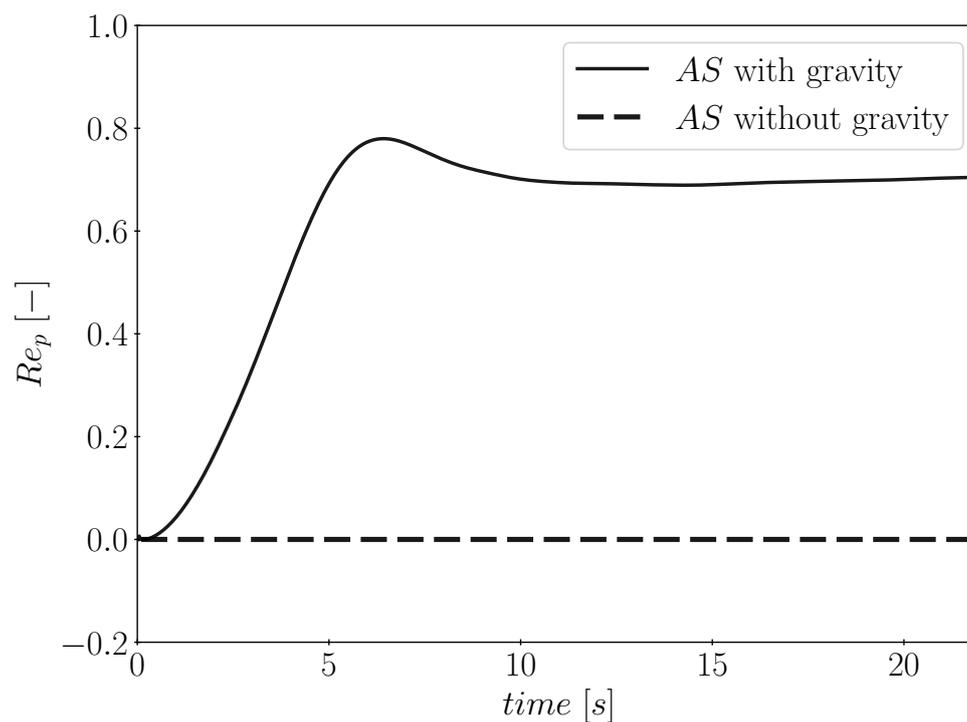


FIGURE 5.31 – Variation du nombre de Reynolds particulaire sous l'effet de la gravité lors de l'évaporation d'une goutte de n-heptane / n-décane (75% - 25%) calculée avec le modèle AS.

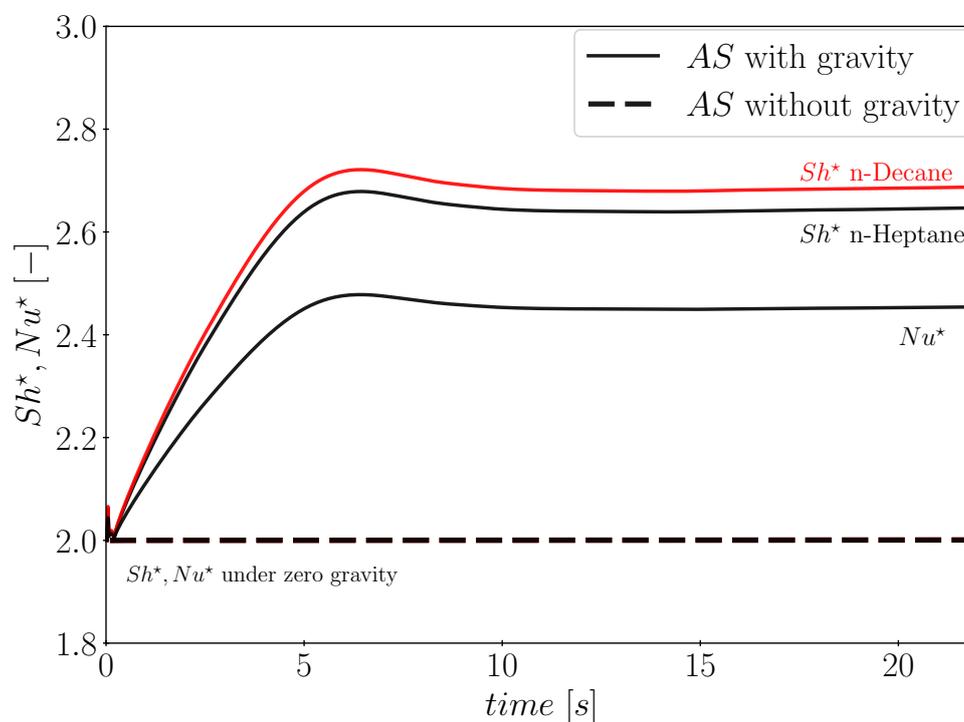


FIGURE 5.32 – Variation des nombres de Nusselt et de Sherwood avec ou sans la gravité.

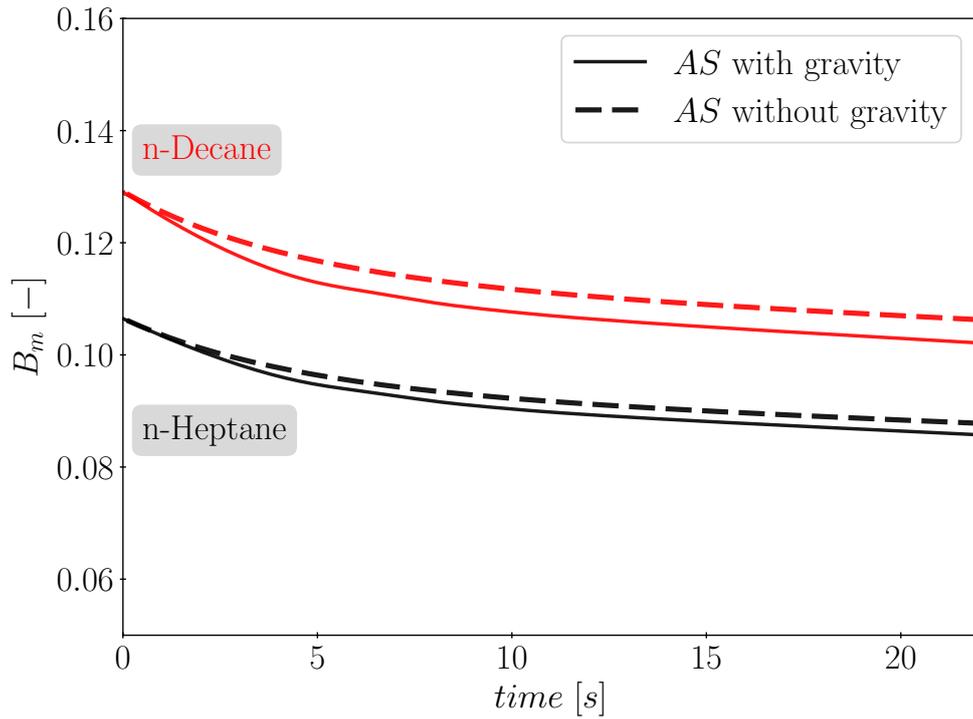


FIGURE 5.33 – Variation du nombre de *Spalding* massique,  $B_m$ , lors d'une évaporation avec ou sans gravité.

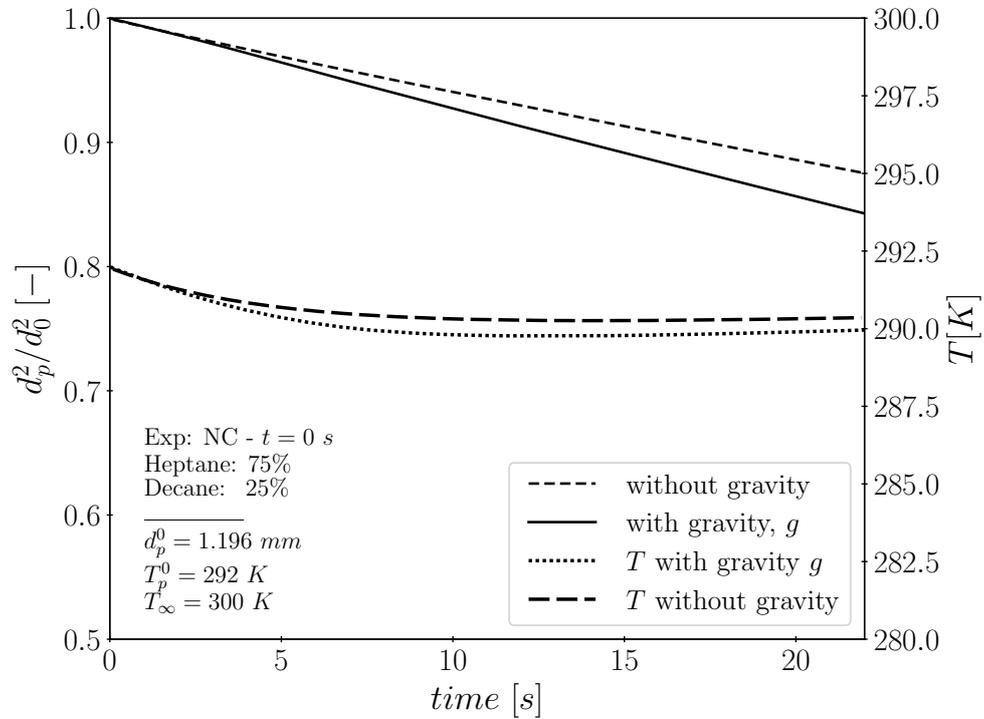


FIGURE 5.34 – Effet de la gravité sur l'évaporation en convection naturelle d'une goutte de n-heptane / n-décane (75% - 25%). Évolution temporelle du diamètre et de la température.

La figure (Fig. 5.34) illustre les résultats de l'évaporation de la goutte n-heptane/n-décane à 75%-25% de fraction volumique. Elle présente les différences sur le diamètre et la température du modèle d'évaporation AS avec ou sans gravité. Même si la différence sur la température est faible, l'écart généré par l'effet de la flottabilité sur le diamètre est assez significatif, de plus que l'évaporation est approximativement à 85% du diamètre initial. En fin d'évaporation cet écart sera plus important.

Outre les différences mises en évidence dans cette section, la gravité pose d'autres problématiques liées à l'étude de l'évaporation. En utilisant une fibre comme support d'accrochage, la goutte se trouve déformée à cause de la force de gravité, perdant ainsi sa sphéricité. Cette dernière constitue une hypothèse importante sur laquelle les modèles d'évaporation sont développés et validés. Afin de s'affranchir de cette contrainte, des études expérimentales d'évaporation sont menées en microgravité à bord des avions équipés spécialement pour ce genre d'études.

## 5.6 Conclusions

Le modèle d'évaporation implémenté dans le cadre de cette thèse a fait l'objet de validations dans ce chapitre. D'abord, un cas de goutte mono-composant est validé sur les données de *Chauveau* et *Nomura*. Les propriétés thermophysiques du combustible liquide jouent un rôle très important dans la détermination du temps d'évaporation et la température de la goutte. La fibre de quartz servant de dispositif de fixation de la goutte contribue avec un flux conductif, non modélisé dans notre cas, alors qu'elle contribue à l'accélération de l'évaporation via un taux d'évaporation très élevé par rapport à la simulation.

Ensuite, le modèle d'évaporation est validé sur une goutte de kérosène. La composition de la goutte est modélisée par trois modèles différents : un surrogate mono-espèce, un surrogate multi-espèces et un combustible multi-composants. La comparaison de ces trois modèles met en évidence l'importance de l'évaporation différentielle qu'il faut prendre en compte lorsque l'on a plusieurs composants. Un surrogate mono-espèce bien calibré permet de reproduire le taux d'évaporation.

Le modèle est également validé sur un cas bi-composants en comparant aux résultats de l'expérience de *Ghassemi*. Le modèle AS reproduit d'une manière satisfaisante le temps d'évaporation. Dans un but de s'assurer de la cohérence des résultats numériques, il a également été

montré que le modèle d'évaporation reproduit le taux d'évaporation  $C_{evap}$  selon la composition de la goutte pour se rapprocher du coefficient d'évaporation du composant pur dominant dans le liquide. Les propriétés d'évaporation issues de l'étude numérique sont exposées à la fin du cas pour une vue détaillée du processus de l'évaporation de la goutte bi-composants.

Afin de mettre en évidence la différence entre les deux modèles d'évaporation utilisés, à savoir le modèle de *Spalding* et le modèle d'*Abramzon-Sirignano*, une étude d'évaporation d'une goutte mono-composant puis bi-composants en convection forcée est réalisée. Ainsi, il a été démontré que les effets convectifs sont pris en compte par le modèle d'évaporation AS, en corrigeant les coefficients de transfert de masse et de chaleur à la surface de la goutte.

Enfin, un calcul d'évaporation d'une goutte statique en convection naturelle avec ou sans gravité, a été réalisé en fin du chapitre. La prise en compte de la flottabilité dans les calculs d'évaporation crée un champ de vitesse autour de la goutte. Ce dernier modifie le nombre de *Reynolds* particulaire. Cela a pour conséquence de modifier l'aérodynamique et la thermodynamique de la goutte via le coefficient de traînée et des différentes propriétés de l'évaporation dont les définitions font intervenir le nombre de *Reynolds* de la goutte.

Au terme des résultats exposés dans ce chapitre, le modèle d'évaporation *Abramzon-Sirignano* implémenté dans le cadre des travaux de cette thèse, a été validé sur un ensemble de données expérimentales incluant des cas de goutte mono-composant, bi-composants et de fuel complexe s'évaporant en convection naturelle ou en convection forcée.

# SIMULATION D'UNE FLAMME DE SPRAY TURBULENTE

---

## Sommaire

---

<b>6.1</b>	<b>Description du dispositif expérimental . . . . .</b>	<b>174</b>
6.1.1	Le brûleur KIAI . . . . .	174
6.1.2	Diagnostics expérimentaux . . . . .	176
<b>6.2</b>	<b>Comparatif des études précédentes sur le brûleur KIAI . . . . .</b>	<b>176</b>
6.2.1	Géométrie et maillage . . . . .	178
6.2.2	Résultats comparatifs . . . . .	178
6.2.3	Objectif de cette étude . . . . .	180
<b>6.3</b>	<b>Description de la configuration numérique . . . . .</b>	<b>180</b>
6.3.1	Géométrie et maillage . . . . .	180
6.3.2	Conditions opératoires . . . . .	181
6.3.3	Chimie analytique ARC pour la combustion n-Heptane/air . . . . .	182
<b>6.4</b>	<b>Analyse des résultats de l'étude de la flamme spray diphasique, n-heptane/air</b>	<b>183</b>
6.4.1	Simulation en conditions non réactives . . . . .	183
6.4.2	Analyse et validation en conditions réactives . . . . .	184
6.4.3	Interaction flamme/gouttelette . . . . .	198
<b>6.5</b>	<b>Performances . . . . .</b>	<b>201</b>
<b>6.6</b>	<b>Conclusions . . . . .</b>	<b>202</b>

---

Ce chapitre présente l'étude numérique d'une flamme de spray turbulente n-heptane/air, qui a été étudiée expérimentalement au laboratoire CORIA au moyen de diagnostics haute fidélité afin d'évaluer la structure de la flamme et de fournir des données quantitatives telles que la température et la distribution de la taille des gouttelettes. L'objectif de ce chapitre est d'effectuer la simulation de ce brûleur avec une chimie analytique réduite afin de démontrer la capacité de la méthode à récupérer la structure de flamme appropriée avec un fuel liquide pur. Ceci est une étape obligatoire avant de cibler des flammes de spray de fuels multi-composants. Deux cas différents de cette configuration académique, appelée le brûleur KIAI, sont simulés. Tout d'abord, le cas isotherme, avec flux d'air et injection de n-heptane à température et pression ambiantes, et en second lieu, le cas réactif. La comparaison avec les données expérimentales [225] et avec les simulations effectuées dans un autre groupe [205] montre que les simulations actuelles reproduisent avec précision le flux gazeux et les propriétés de la phase dispersée dans les deux cas.

## 6.1 Description du dispositif expérimental

### 6.1.1 Le brûleur KIAI

Le brûleur est composé d'un injecteur de combustible liquide et d'un système d'écoulement co-courant annulaire sans swirl (figure 6.1). Dans cette configuration sans swirler du brûleur, le système d'injection est composé d'un tourbillonneur d'air à angle nulle et d'un injecteur de carburant situé au centre du brûleur.

Les figures (6.1) et (6.2) montrent différentes vues de la géométrie du brûleur KIAI. Celui-ci est constitué des parties suivantes [198, 224, 225] :

- **Un plenum**, situé dans la partie inférieure du système d'injection. Un lit de billes de verre et une grille ont été utilisés pour atténuer les perturbations turbulentes résiduelles dans le but d'obtenir un co-courant d'air laminaire.
- **Un système d'injection de combustible liquide**, composé d'un atomiseur à pression de type simplex. Il génère un spray sous forme d'un cône creux avec un angle d'ouverture de 80°.
- **Un tourbillonneur (Swirler)**, divisé en 18 canaux dont l'angle d'inclinaison est variable afin de contrôler la topologie de l'écoulement. Durant ce travail de thèse, c'est la configuration à inclinaison nulle qui est utilisée afin d'avoir un écoulement non tourbillonnaire.

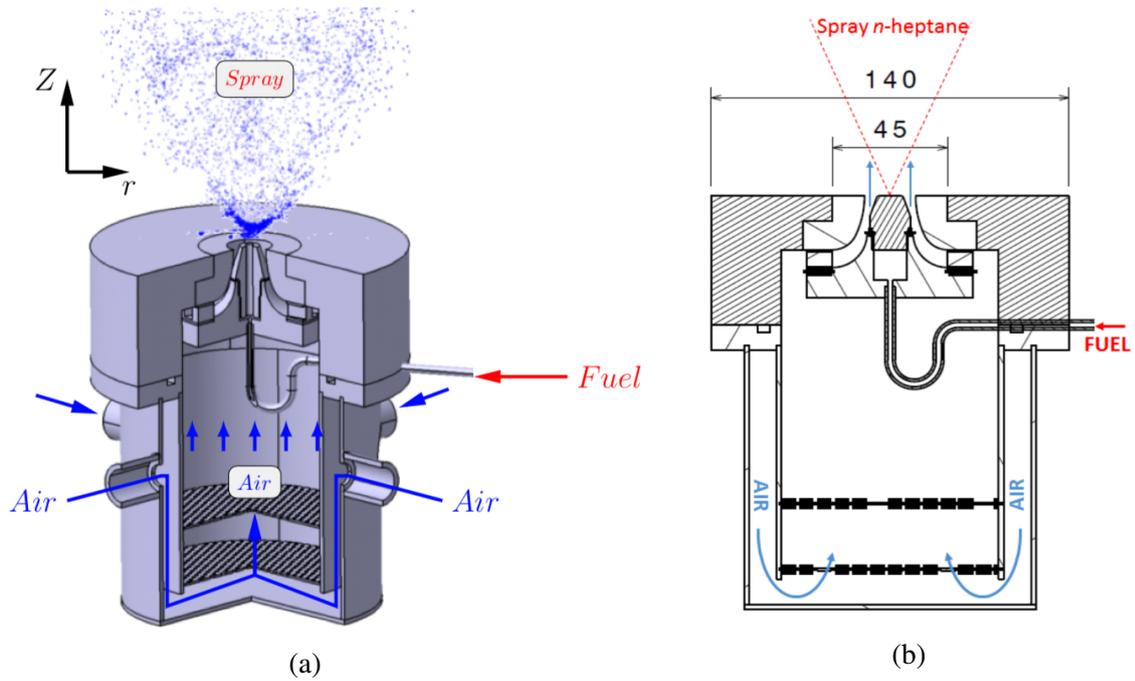


FIGURE 6.1 – Géométrie du système d'injection du brûleur KIAI [223].

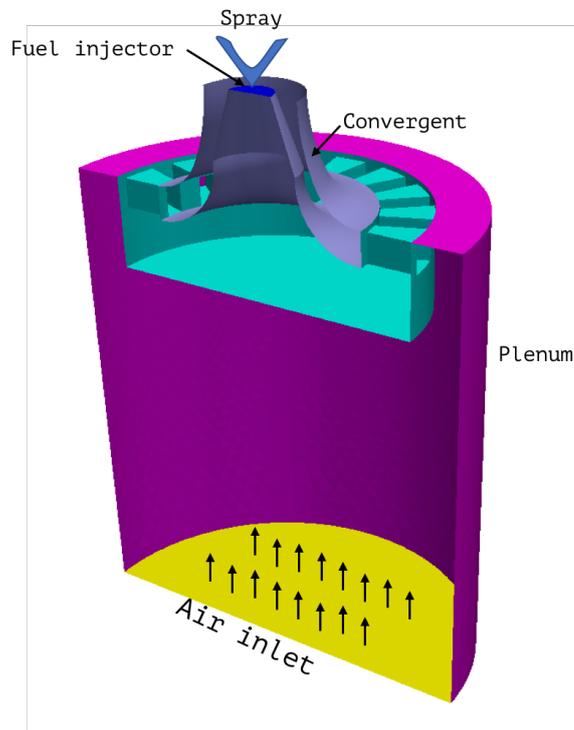


FIGURE 6.2 – Géométrie de la partie d'injection (air + fuel) du brûleur KIAI. Le tourbillonneur est divisé en 18 canaux avec un angle d'inclinaison nulle pour avoir un écoulement non tourbillonnaire.

## 6.1.2 Diagnostics expérimentaux

Plusieurs techniques de mesure sont mises en place afin de récolter des données expérimentales pertinentes à la fois sur la phase gazeuse et sur la phase dispersée.

La caractérisation de la taille et de la vitesse des gouttelettes est réalisée par *Phase Doppler Anemometry* (PDA) avec une capacité de détection allant jusqu'à un diamètre de goutte de  $139\ \mu\text{m}$ . En raison de la structure du spray et de la répartition de la densité des particules, les mesures ne sont pas possibles en dessous de  $Z = 10\ \text{mm}$  avec  $Z$  la distance axiale au point d'injection. La sphéricité des gouttelettes est validée avec l'ombroscopie (Shadowgraphy) et elle montre qu'il n'y a pas de ligaments au dessus de  $Z = 3\ \text{mm}$ . Outre la caractérisation du spray, la vitesse de la phase porteuse est également mesurée en ensemençant le co-courant d'air avec des gouttelettes d'huile d'olive de diamètre de  $2.5\ \mu\text{m}$  [225].

La structure de flamme est étudiée par imagerie OH-PLIF (*fluorescence OH planaire induite par laser*). La thermométrie arc-en-ciel globale C-GRT (*Continuous Global Rainbow Refractometry Technique*) est utilisée pour les mesures de la température locale moyenne, complétée par I-GRT (*Instantaneous Global Rainbow Refractometry Technique*) pour la mesure de la température instantanée. Cette technique basée sur l'hypothèse de l'homogénéité de l'indice de réfraction des gouttes. Elle est utilisée pour la mesure de la température des gouttes dans des écoulements réactifs [124, 125, 193]. Toutefois, plus d'études sont nécessaires pour valider cette technique dans différentes conditions.

## 6.2 Comparatif des études précédentes sur le brûleur KIAI

La flamme diphasique du brûleur dans sa version non confinée, présentée précédemment, a fait l'objet d'une étude comparative lors d'un atelier de travail<sup>1</sup> à Naples le 17 septembre 2017. L'atelier a regroupé plusieurs laboratoires : le CORIA pour les données expérimentales, le CERFACS, EM2C, ICL et TUDelft pour l'étude numérique comparative. Le tableau (6.1) résume quelques différences des modèles et méthodes choisis par les différentes équipes de recherche.

---

1. 6<sup>th</sup> Workshop on Turbulent Combustion of Spray - Naples, Italy September 17<sup>th</sup> 2017

Équipe	CERFACS [205]	EM2C [31]	ICL [78]	TU Delft
<b>Maillage</b>	Non structuré, 53M d'éléments avec une taille min de cellule à 0.1 mm près du point de l'injection		Structuré, 5M en multi-blocs	Structuré, 0.4M - cylindre 400x300 mm
<b>Phase liquide</b>				
Approche Lagrangien two-way				
<b>Évapoartion</b>	Abramzon-Sirignano	Ranz-Marshall	Abramzon-Sirignano	Ranz-Marshall modifié
<b>Schéma cinétique</b>	ARC [205] 24 espèces transportées, 32 QSS et 217 réactions	Tabulé : depuis POLIMI [185], 106 espèces, 1738 réactions	Liu et al 2004 [129] : 22 espèces, 18 réactions	Lu et al 2006 [131] : 188 espèces, 939 réactions
<b>Interaction :</b>	Non : maillage considéré	FTAC-LES avec prise en compte	PDF transportée en utilisant	FGM : flamelette prémélangées
<b>Cinétique-Turbulence</b>	suffisamment raffiné	des effets de la diffusion différentielle	Eulrian Stochastic field	stationnaires, et non stationnaires

TABLE 6.1 – Tableau résumant quelques éléments de l'étude numérique comparative de la flamme diphasique du brûleur KIAI.

## 6.2.1 Géométrie et maillage

Lors de cet atelier, les différentes équipes ont présenté différents maillages basés sur la géométrie initiale fournie par l'équipe expérimentale du laboratoire CORIA. Les maillages sont de type structuré (ICL et TUDelft) et non structuré (CERFACS et EM2C). Ce dernier est constitué de 53 millions d'éléments tétraédriques. La figure (6.3) montre la distribution de taille des mailles sur la région de flamme. Elle est calculée avec la racine cubique du volume de contrôle  $\Delta x = \sqrt[3]{V_C}$ . Une taille caractéristique des plus petites cellules est de  $0.2 \text{ mm}$  près de la zone d'injection [205]. Dans la région de la flamme, on trouve des cellules atteignant la taille de  $450 \mu\text{m}$ .

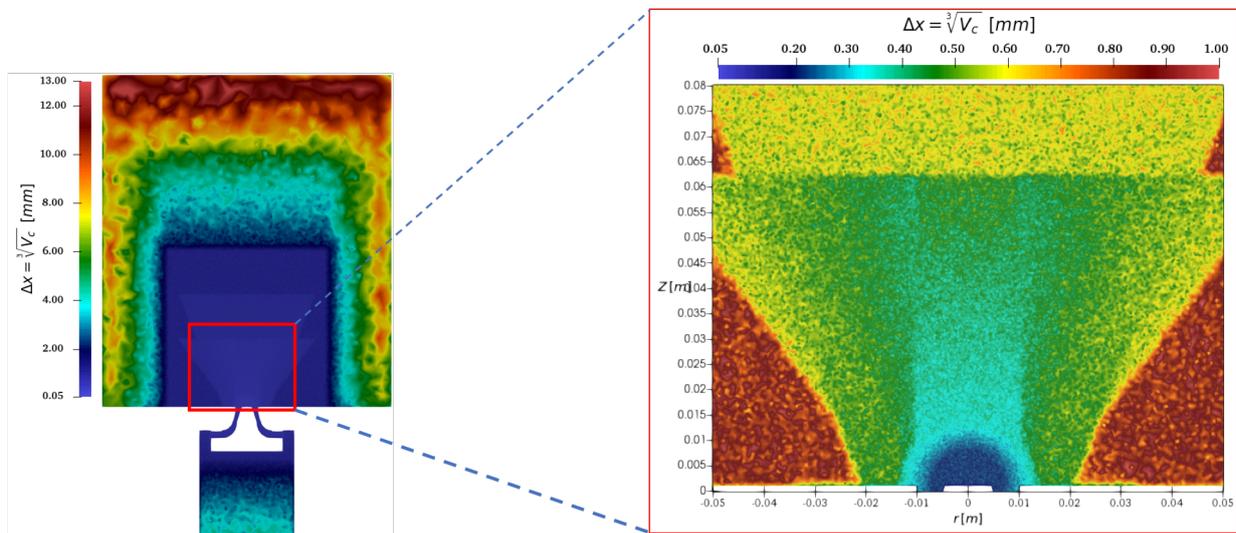


FIGURE 6.3 – Maillage de la géométrie KIAI - CERFACS [204].

## 6.2.2 Résultats comparatifs

Cette section présente quelques résultats de comparaison entre les différentes études menées par les différentes équipes.

La figure (6.4) montre une comparaison des profils de fraction massique de  $OH$  avec les coordonnées  $r$  et  $z$  respectivement en abscisses et en ordonnées. Les différentes équipes arrivent à la hauteur de lift-off attendue et donnée par les résultats expérimentaux ( $20 \text{ mm} < L_{OH} < 25 \text{ mm}$ ). Ensuite, la figure (6.5) expose une comparaison des résultats numériques avec les résultats expérimentaux, à  $Z = 20 \text{ mm}$  du plan de l'injection, des profils de vitesse de la phase gazeuse ( Fig. 6.5a) et de diamètre moyen  $d_{10}$  de la phase liquide ( Fig. 6.5b) pour les différentes équipes.

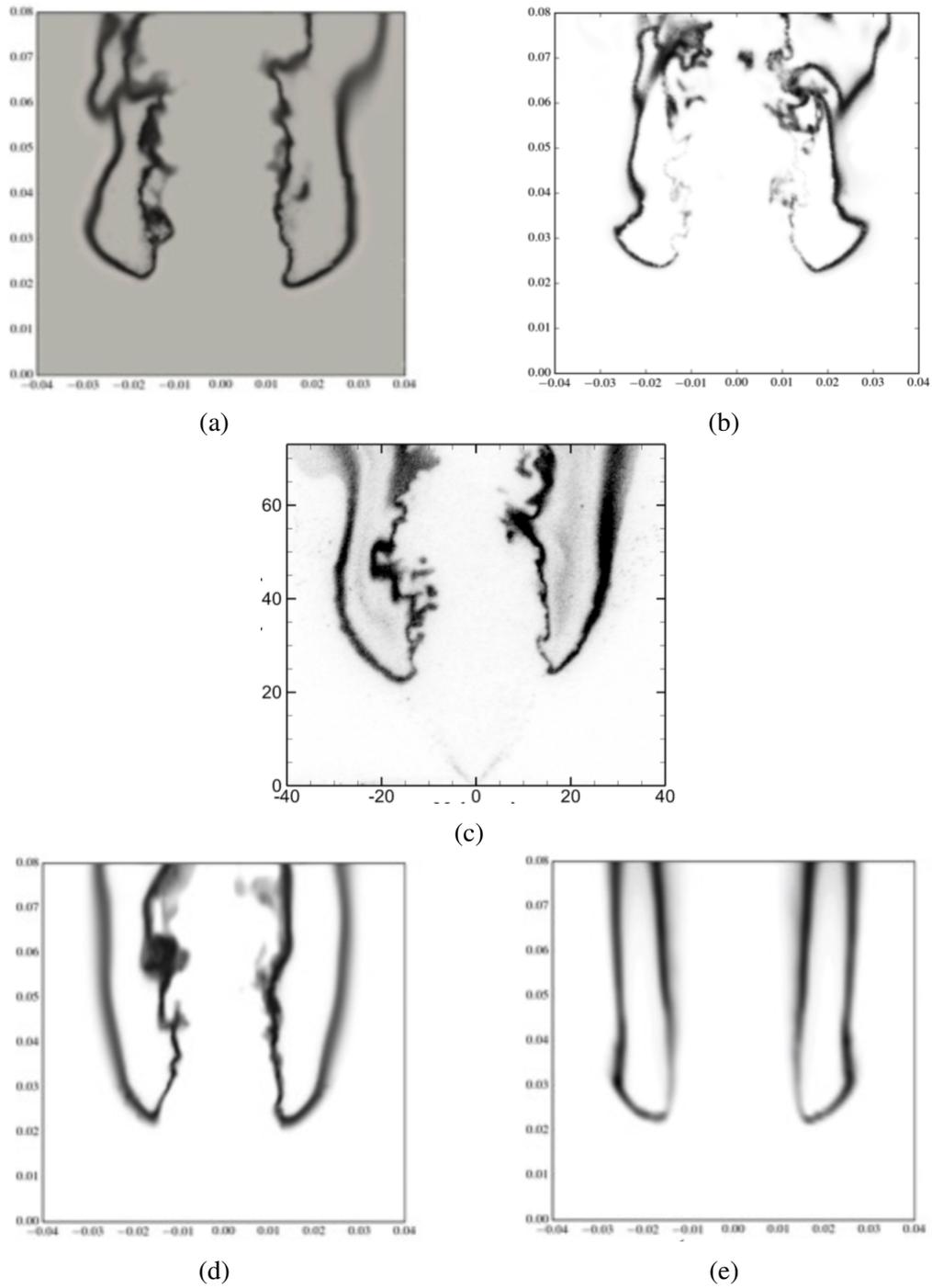


FIGURE 6.4 – Comparaison des profils de fractions massiques de OH et du champ expérimental issu du diagnostic OH-PLIF. (a) CERFACS (b) EM2C (c) EXP-CORIA (d) ICL (e) TUDelft

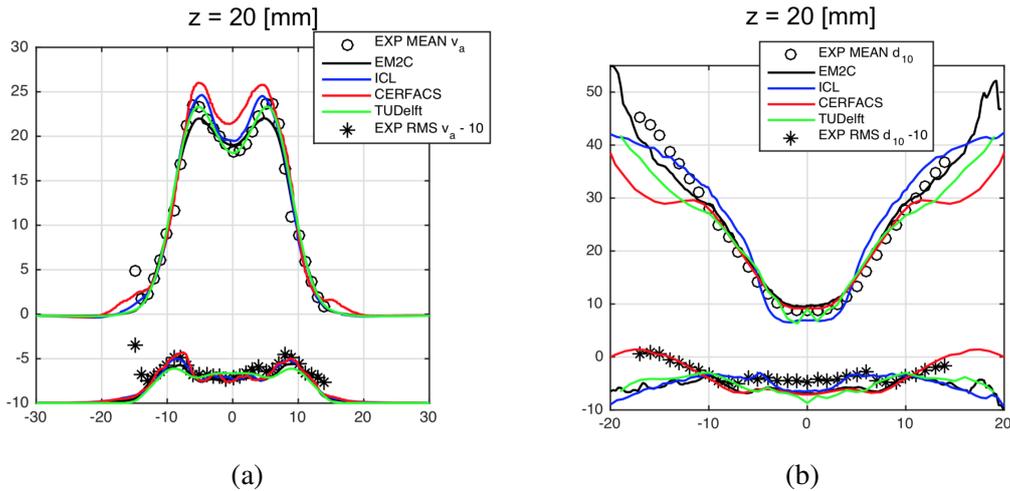


FIGURE 6.5 – Quelques résultats obtenus par les différentes équipes exposés lors de TCS6. À  $Z = 20 \text{ mm}$  : (a) Profils de vitesse axiale de la phase gazeuse. (b) Diamètre moyen  $d_{10}$  des particules de la phase liquide.

### 6.2.3 Objectif de cette étude

Avant d'aller vers la simulation des flammes de spray de fuels multi-composants, nous avons procédé, ici, à une étude LES de flamme de spray turbulente n-heptane/air avec une chimie analytique réduite en utilisant les mêmes méthodes numériques des simulations réalisées précédemment. L'objectif est de démontrer la capacité de la LES à reproduire la structure de flamme avec un fuel liquide pur et les autres caractéristiques liées à ce type de flamme à savoir : la hauteur de stabilisation de la flamme, les vitesses des phases gazeuse et liquide, le diamètre des gouttes et la température de la phase liquide.

## 6.3 Description de la configuration numérique

### 6.3.1 Géométrie et maillage

Le spray est injecté dans un grand volume cylindrique représentant l'atmosphère (Fig. 6.6) ( $\varnothing = 500 \text{ mm}$ ,  $H = 572 \text{ mm}$ ) où la combustion se produit. Ce volume a été choisi suffisamment grand pour éviter toute re-circulation intempestive. Le Swirler, le plenum et le convergent sont traités avec une loi de paroi qui reproduit la sous-couche visqueuse, la zone logarithmique et la zone intermédiaire de la couche limite. Un premier maillage  $M0$  est généré à partir de la géométrie du brûleur KIAI avec 64M cellules et une taille de cellule minimale de  $\Delta_x = 300 \mu\text{m}$ . Ce maillage initial est cependant trop grossier pour représenter précisément la structure de la

flamme et ainsi un nouveau maillage  $M1$  contenant 520M cellules (Fig. 6.6) a été généré à partir de  $M0$  en effectuant un raffinement de maillage homogène : chaque tétraèdre a été divisé en 8 sous-tétraèdres, basé sur un algorithme de tessellation non dégénérative [191].

La taille de cellule minimale du maillage  $M1$  est  $\Delta_x = 150 \mu m$  et est située dans la zone cylindrique centrale qui représente la région de la flamme (Fig. 6.6).

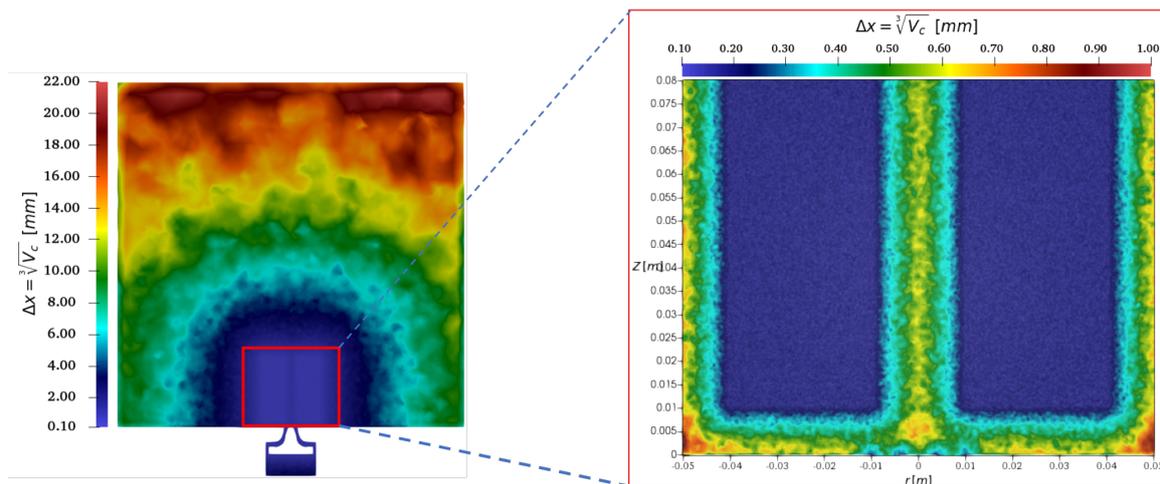


FIGURE 6.6 – Maillage raffiné  $M1$  avec 520M d'élément. Taille des cellules.

### 6.3.2 Conditions opératoires

La figure (6.7) montre un gros plan du système d'injection. Les gouttelettes sont supposées être entièrement atomisées, avec une taille dans l'intervalle  $1 - 70 \mu m$  et donc l'approche de point force est pleinement valide dans le cas présent. Une loi de *Rosin-Rammler* a été utilisée pour représenter la distribution de la taille des gouttelettes. Les valeurs numériques pour les paramètres de cette distribution ( $SMD = 32 \mu m$  et  $q = 2.3$ ) ont été choisies pour ajuster les mesures à  $10 mm$  à la sortie du brûleur. Le cône creux de l'injection est obtenu en utilisant le modèle LISA (Liquid Injection for Swirl Atomizers) [92]. Il est essentiellement basé sur des données géométriques et vise à reproduire correctement l'angle du spray.

Toute la configuration fonctionne dans des conditions atmosphériques ( $T = 298 \pm 2 K$  et  $P = 1 atm$ ), et les débits massiques sont de  $6 g/s$  pour l'air et de  $0.28 g/s$  pour le n-heptane pour une richesse globale  $\phi = 0.71$ .

L'évaporation est modélisée par le modèle d'*Abramzon-Sirignano* présenté au chapitre 4 et validé au chapitre 5. La phase liquide est modélisée par le modèle de diffusion infinie, l'équilibre

est pris à l'état de référence calculée par la règle d'*Hubbard* [95] entre la surface de la goutte et le champ de gaz au loin. Les nombres de *Schmidt* et de *Prandtl* sont calculés dynamiquement pour chaque goutte au cours de la simulation.

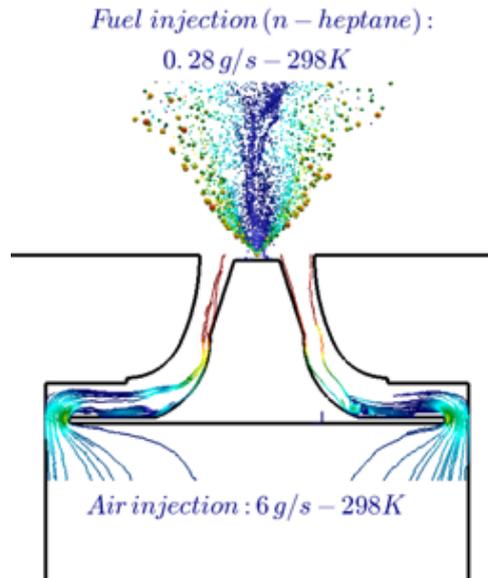


FIGURE 6.7 – Schéma de l'injection de l'air (lignes de courant) et de fuel (gouttelette).

### 6.3.3 Chimie analytique ARC pour la combustion n-Heptane/air

Lors de ce travail, la combustion n-heptane/air est décrite par le mécanisme cinétique réduit présenté dans [205]. Il est construit à partir d'un schéma n-heptane/air détaillé [102] utilisant l'outil de réduction automatique YARC développé par *P. Pepiot-Desjardins* [99, 169]. Le schéma réduit final contient 56 espèces transportées complétées par 32 espèces QSS (Quasi-Steady State) et 217 réactions[204].

Pour valider ce choix, diverses flammes pré-mélangées 1D non étirées ont été calculées sur une large gamme de fractions de mélange dans les mêmes conditions expérimentales que la flamme de spray. La figure (6.8) montre une comparaison de la vitesse de la flamme laminaire avec les données expérimentales obtenues par *Kumar et al.* [115] et les résultats numériques obtenus en utilisant le mécanisme détaillé de *Jerzembeck et al.* [102]. Il montre un bon accord dans la fourchette  $\phi = 0.6 - 1.0$ .

En ce qui concerne l'interaction flamme/turbulence, le maillage qui sera utilisé dans les simulations est suffisamment raffiné pour que la plupart des échelles importantes soient résolues et qu'aucune modélisation supplémentaire n'ait été introduite.

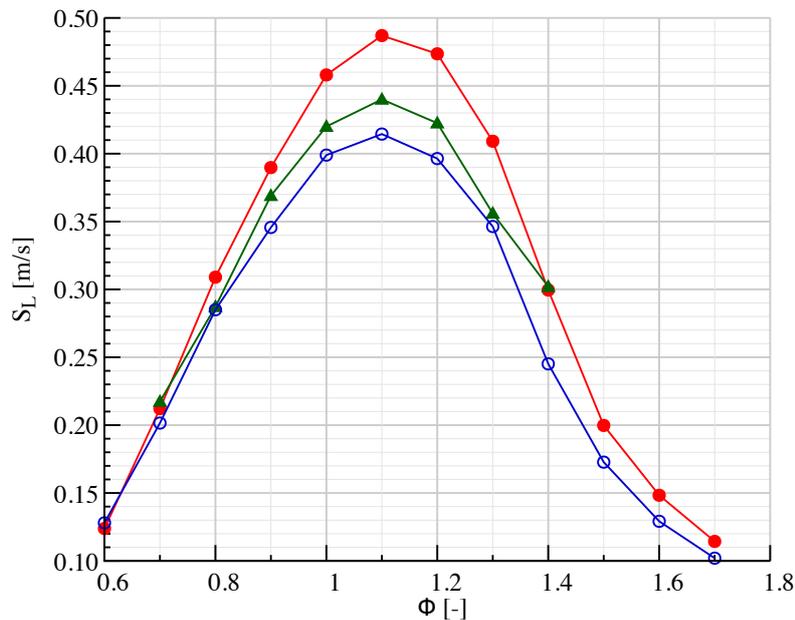


FIGURE 6.8 – Vitesse de la flamme laminaire prémélangée  $S_L$  du mélange n-heptane/air pour différentes valeurs de richesse  $\phi$  - ARC ( $\bullet$ ), EXP ( $\blacktriangle$ ), Jerzembek ( $\circ$ )

## 6.4 Analyse des résultats de l'étude de la flamme spray diphasique, n-heptane/air

### 6.4.1 Simulation en conditions non réactives

Tout d'abord, un cas non réactif illustré à la figure (6.9) a été réalisé. Dans ce cas, les gouttelettes de n-heptane s'évaporent au fur et à mesure qu'elles sont transportées dans le domaine, mais le processus d'évaporation est très lent puisque la température de l'air est de  $298\text{ K}$ . L'air ambiant est refroidi et la température des gouttelettes diminue donc de près de  $20\text{ K}$ . Le cône creux formé par le jet est clairement visible dans la figure (6.9). L'injecteur de liquide n-heptane placé dans un courant d'air permettent souvent d'obtenir une distribution spatiale des gouttelettes de carburant. D'une part, les plus petites gouttelettes sont rapidement entraînées par le flux d'air après l'injection et restent près de l'axe d'injection. Ensuite, elles sont rapidement refroidies en raison de leur faible rapport surface/volume. D'autre part, les plus grosses gouttelettes se concentrent sur le côté extérieur du jet car elles ont une trajectoire balistique due à leur nombre de *Stokes* élevé. Dans cette région, la vitesse de glissement entre les gouttelettes et

l'air stagnant est assez élevée : cela améliore le transfert de chaleur et ainsi, même les grosses gouttelettes subissent une baisse de température importante.

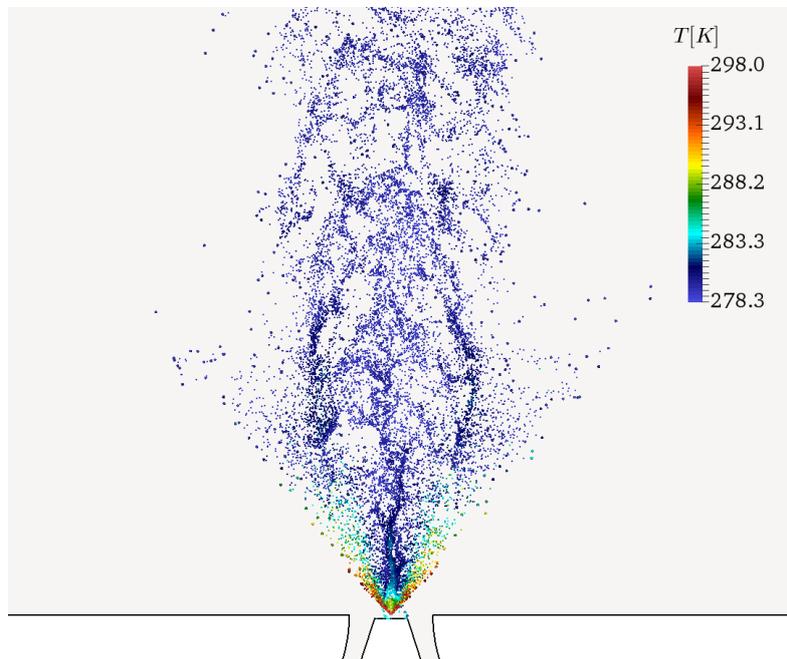


FIGURE 6.9 – Distribution spatiale des gouttelettes de n-heptane, colorée par leur température dans le cas non réactif.

## 6.4.2 Analyse et validation en conditions réactives

Le cas non réactif précédemment présenté en section (cf. 6.4.1) est utilisé comme condition initiale pour le cas réactif, où la combustion est déclenchée en ajoutant un noyau d'allumage au mélange (n-heptane/air), qui consiste en un terme source dans l'équation d'enthalpie sensible situé dans le spray. La simulation est ensuite moyennée sur le temps avec cinq temps de passage, calculé comme  $\tau = L/U_b \approx 0.4 \text{ ms}$  avec  $L$ , une longueur caractéristique pour la zone d'intérêt (fenêtre de diagnostic 80 mm x 80 mm),  $U_b$  est la vitesse d'écoulement dans la zone centrale du jet :  $U_b = 21 \text{ m/s}$ . Les résultats sont enregistrés le long de quatre lignes à hauteur  $z = 10, 20, 30$  et  $40 \text{ mm}$  du plan d'injection (Fig. 6.10).

### 6.4.2.1 Structure de la flamme et hauteur de stabilisation

La figure (6.11) montre une visualisation de la structure de la flamme dans un plan vertical. L'image de gauche montre un champ instantané de la fraction de masse OH obtenue à partir de la simulation, tandis que l'image de droite montre un champ expérimental OH-PLIF instantané.

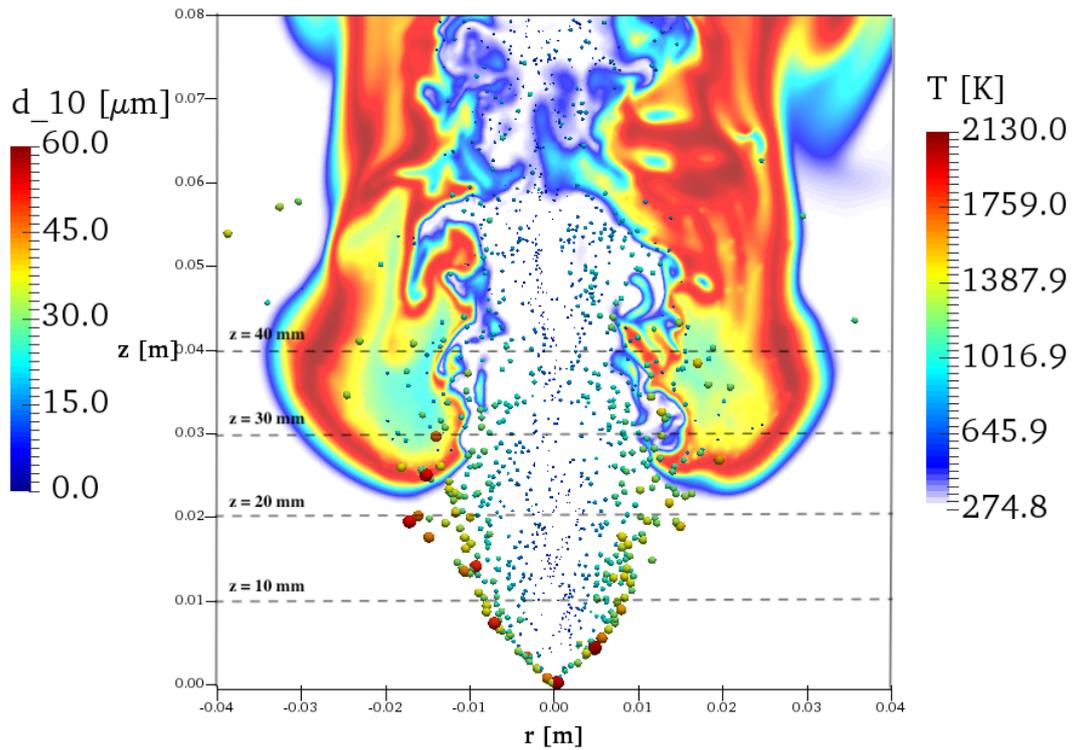


FIGURE 6.10 – Diamètre moyen des gouttelettes et température de la phase gazeuse du cas réactif. Plans de comparaison des résultats numériques et expérimentaux.

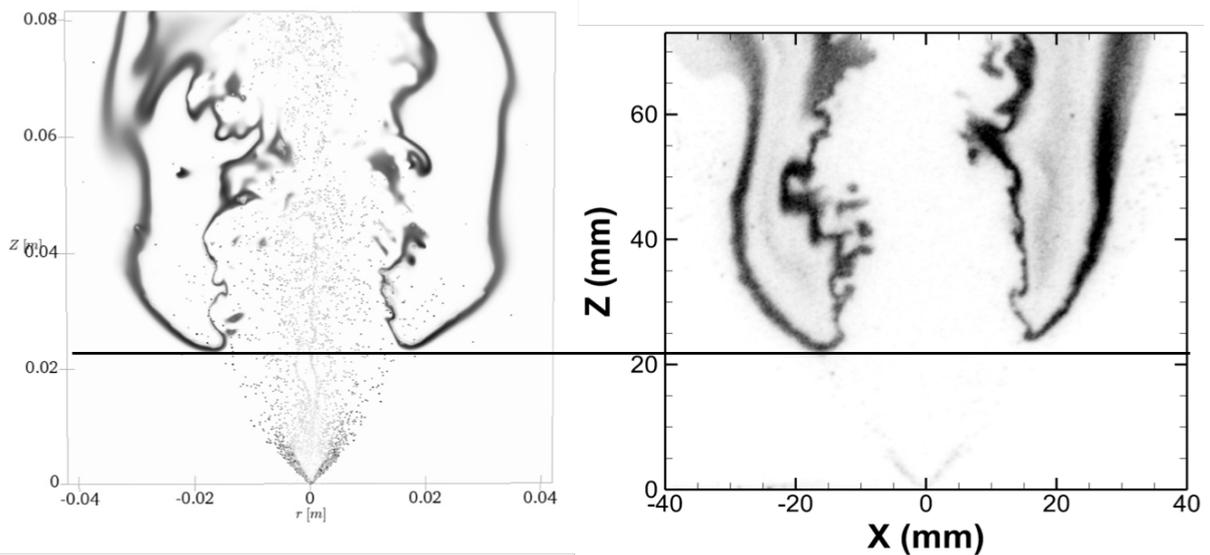


FIGURE 6.11 – Structure de flamme. à gauche : simulation - fraction massique de OH. À droite : champs OH-PLIF

La forme globale de la flamme est très bien reproduite par la LES : la branche interne (très turbulente) et la branche externe (presque laminaire) sont correctement prédites. De plus, l'analyse de l'indice de flamme (Fig. 6.13) montre que la branche interne présente des régimes partiellement prémélangés alors que la branche externe a une structure de flamme de diffusion classique. Les simulations numériques et les expériences produisent une flamme stable avec une hauteur de lift-off de  $\sim 23 \text{ mm}$  à partir du point d'injection.

Pour une analyse détaillée de la structure de la flamme, un graphe de dispersion (scatter plot) de la température en fonction de la fraction du mélange, coloré par l'indice de flamme  $FI$ , est présenté sur la figure (6.12). L'indice de flamme est défini par l'expression (Eq. 2.101). Trois ensembles de valeurs d'indice de flamme ont été choisis afin de représenter les trois régimes de combustion caractérisant ce type de flamme. La température maximale est enregistrée principalement autour des conditions stœchiométriques ( $Z_{st} = 0.062$ ). Le régime de flamme prémélangée se produit à des conditions de faibles température et de fraction de mélange. Ces trois régimes de combustion sont présentés sur la figure (6.13) ainsi que l'iso-contour de la ligne stœchiométrique.

### 6.4.2.2 La phase gazeuse

La figure (6.14) montre les champs donnés par la simulation des vitesses axiale (première colonne de gauche) et radiale (colonne de droite) des valeurs instantanées, moyennes et RMS. La comparaison avec les données expérimentales des valeurs moyennes et RMS des vitesses axiale et radiale le long de la coordonnée radiale est présentée sur les figures (6.15 et 6.16). Un très bon accord entre la simulation et les données expérimentales est obtenu. Le jet central est bien capté et les différents pics des profils RMS dus aux couches de cisaillement sont bien reproduits.

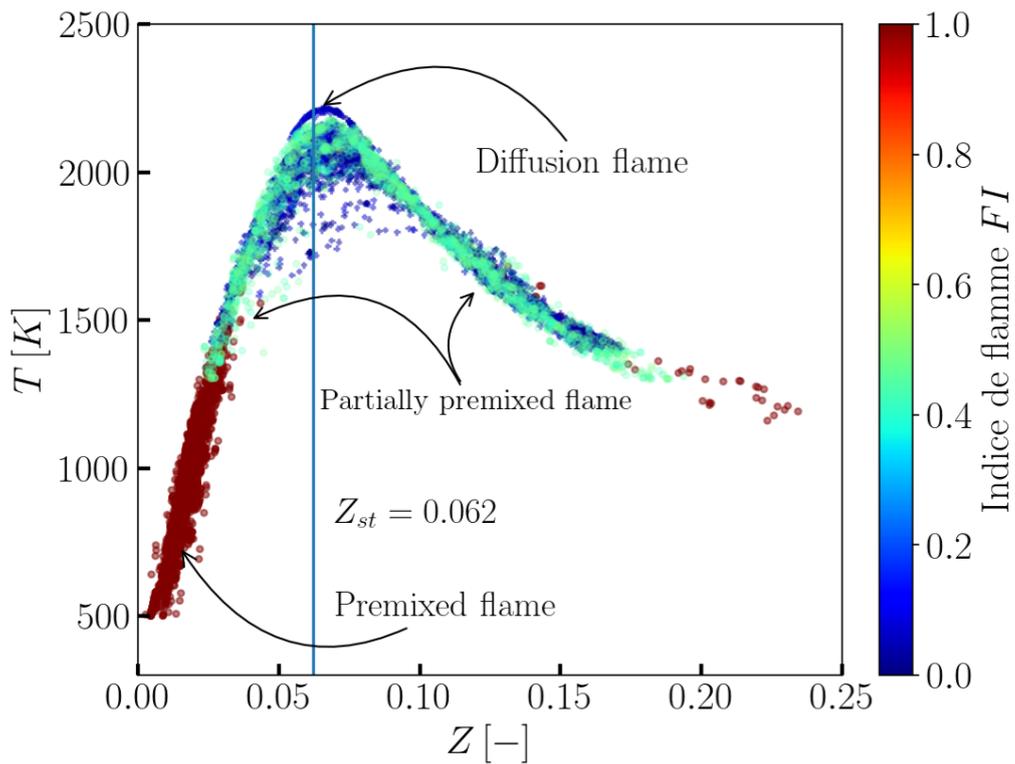


FIGURE 6.12 – Scatter plot de la température en fonction de la fraction du mélange  $Z$ , coloré par l'indice de flamme  $FI$ .

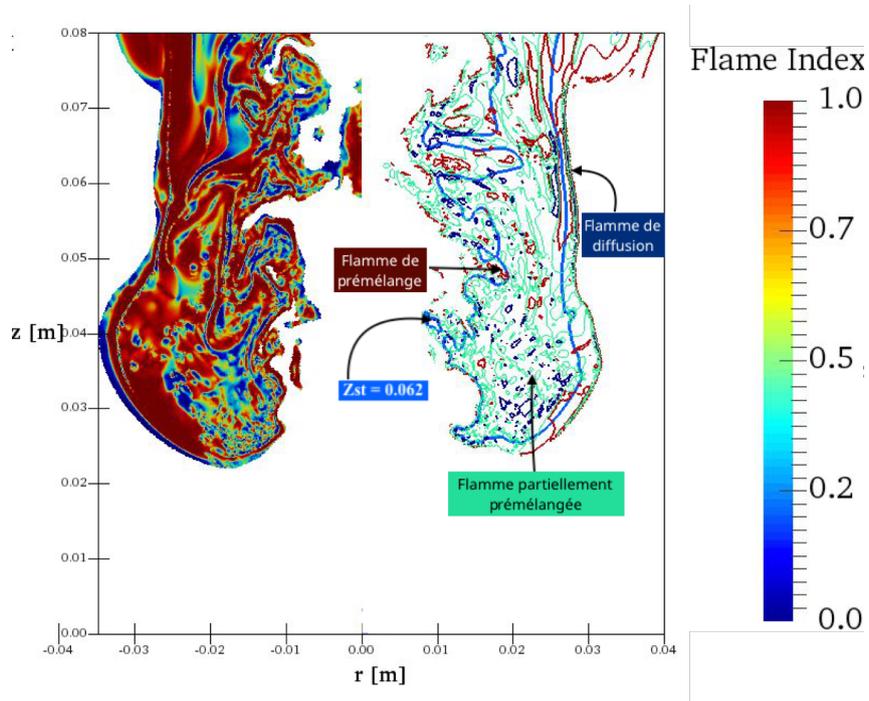


FIGURE 6.13 – Indice de flamme (à gauche) et iso-contours de l'indice de flamme (à droite) des trois principaux régimes de combustion autour de l'iso-contour de la fraction de mélange à la stœchiométrie  $Z_{st} = 0.062$  (ligne bleue).

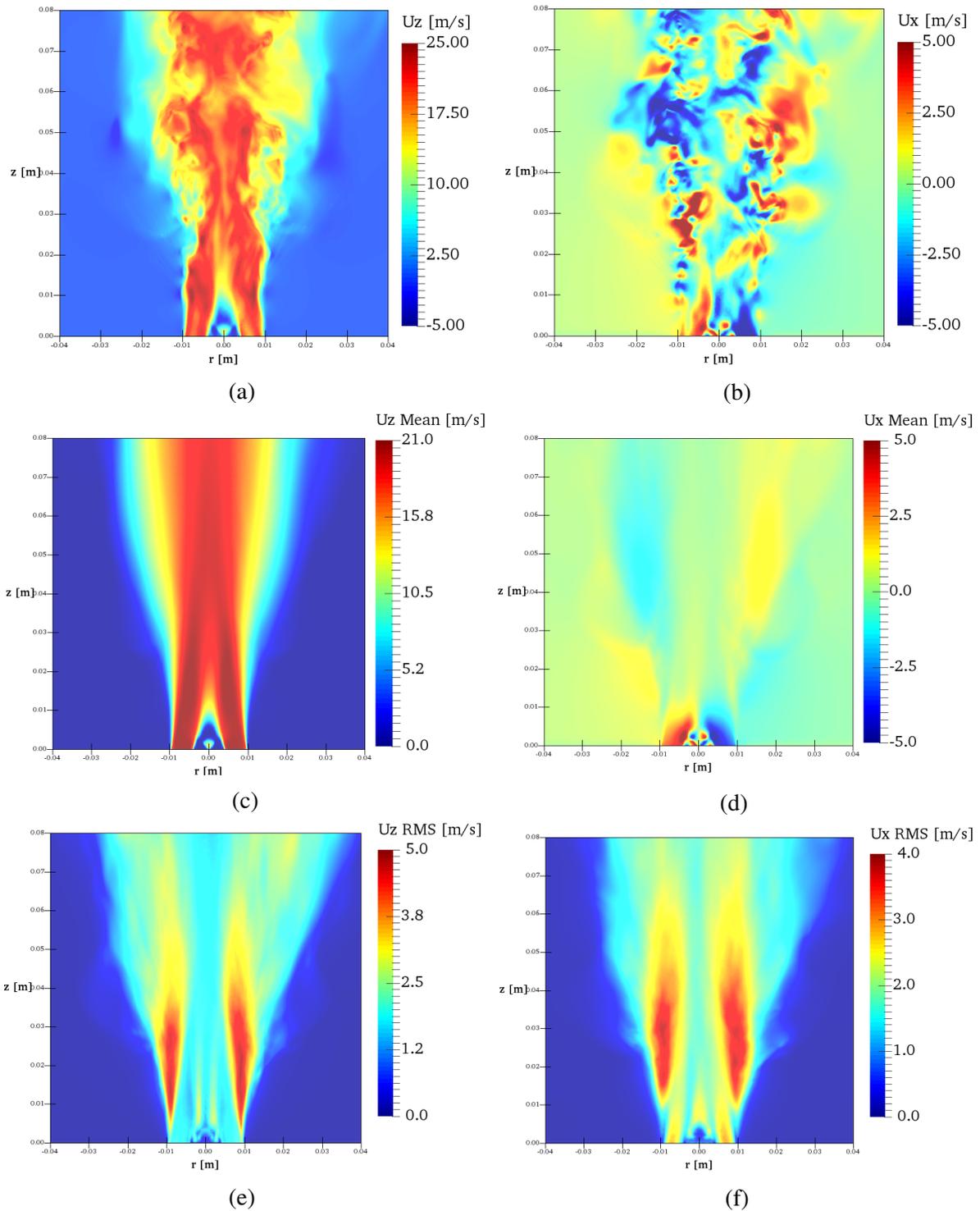


FIGURE 6.14 – Champs de vitesse de la phase gazeuse : première colonne champ de vitesse axiale, deuxième colonne champ de vitesse radiale. (a, b) champs instantanés (c, d) champs moyens (e, f) champs des valeurs RMS.

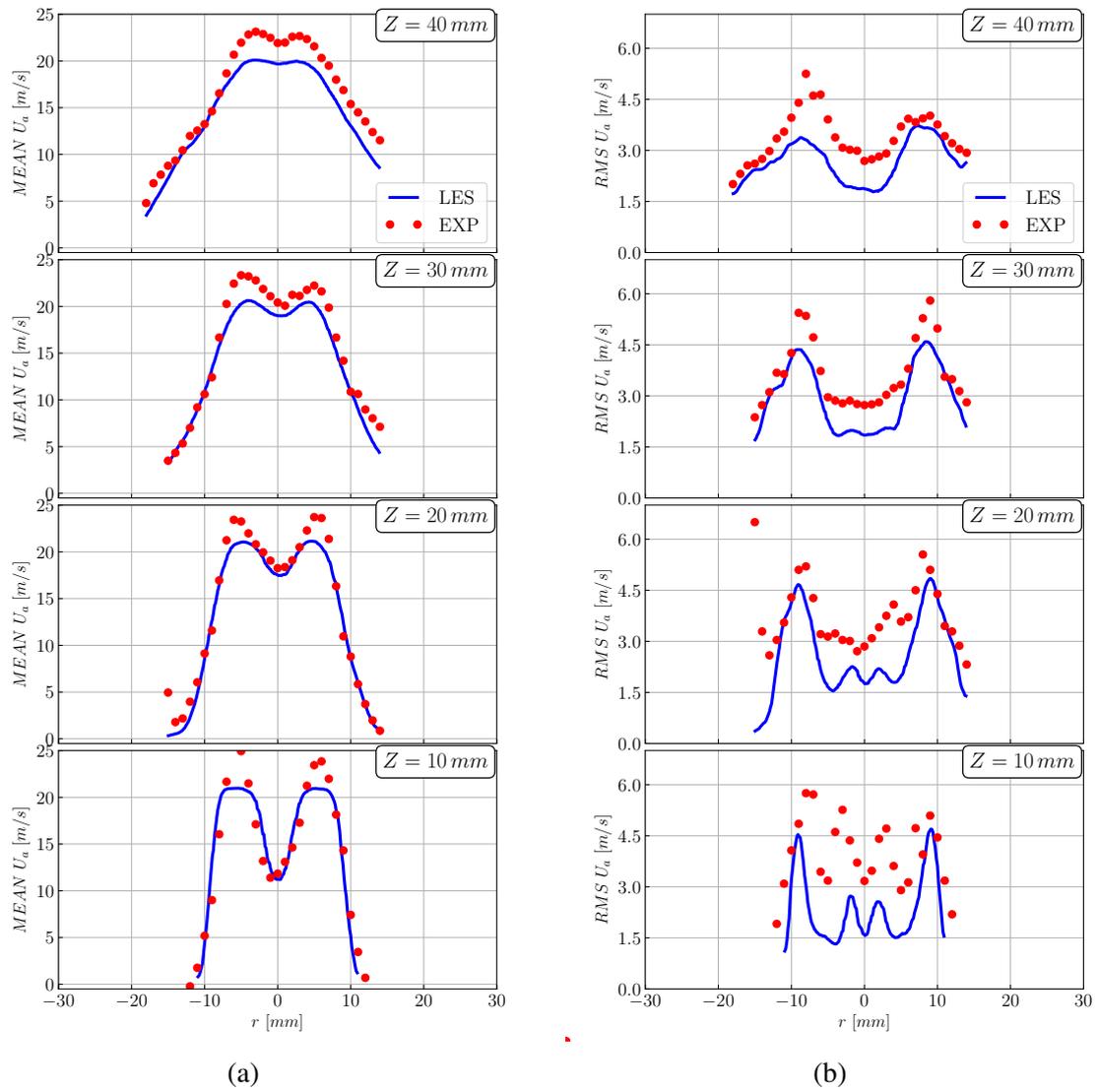


FIGURE 6.15 – Vitesse axiale de la phase gazeuse : (a) valeurs moyennes axiales (b) Valeurs RMS axiales.

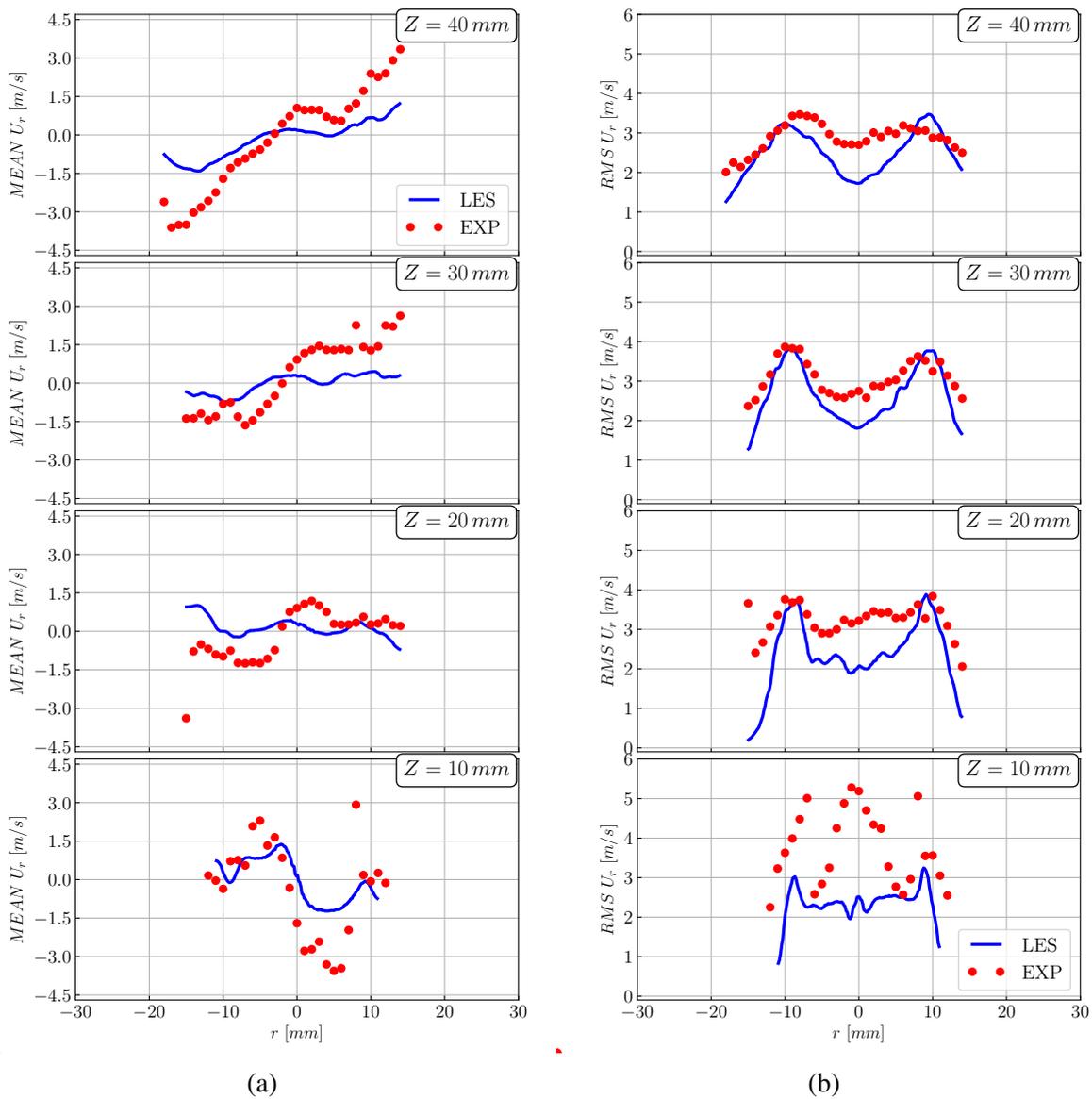


FIGURE 6.16 – Vitesse radiale de la phase gazeuse : (a) Valeurs moyennes radiales (b) Valeurs RMS radiales

Les pics RMS sont bien captés à  $Z = 30\text{ mm}$  et  $Z = 40\text{ mm}$ , contrairement aux positions axiales  $Z = 10\text{ mm}$  et  $Z = 20\text{ mm}$ . Ces différences peuvent s'expliquer par un manque de fluctuations de vitesse dans le plénum, ce qui augmenterait le RMS aux premières positions axiales. Dans les simulations, l'air au repos est injecté dans le plénum. Une autre explication possible pourrait être un manque de résolution de maillage au niveau des parois de l'injecteur, ce qui pourrait avoir un impact sur l'épaisseur de la couche de cisaillement à la sortie de l'injecteur. Cependant, le maillage est déjà très fin dans ces zones.

## 6.4.2.3 La phase liquide

La figure (6.17) montre le diamètre moyen des gouttelettes  $d_{10}$  et ses RMS aux mêmes positions axiales. La distribution radiale de la taille des gouttelettes est remarquablement bien reproduite par la LES. Les grosses gouttelettes sont présentes dans la zone externe du spray, tandis que les plus petites sont entraînées par le courant d'air dans la zone centrale du jet. Les variations qui sont présentes sur le côté extérieur du spray sont dues au petit nombre de grosses gouttelettes capturées dans cette région et qui ne sont pas incluses lors de l'accumulation des statistiques.

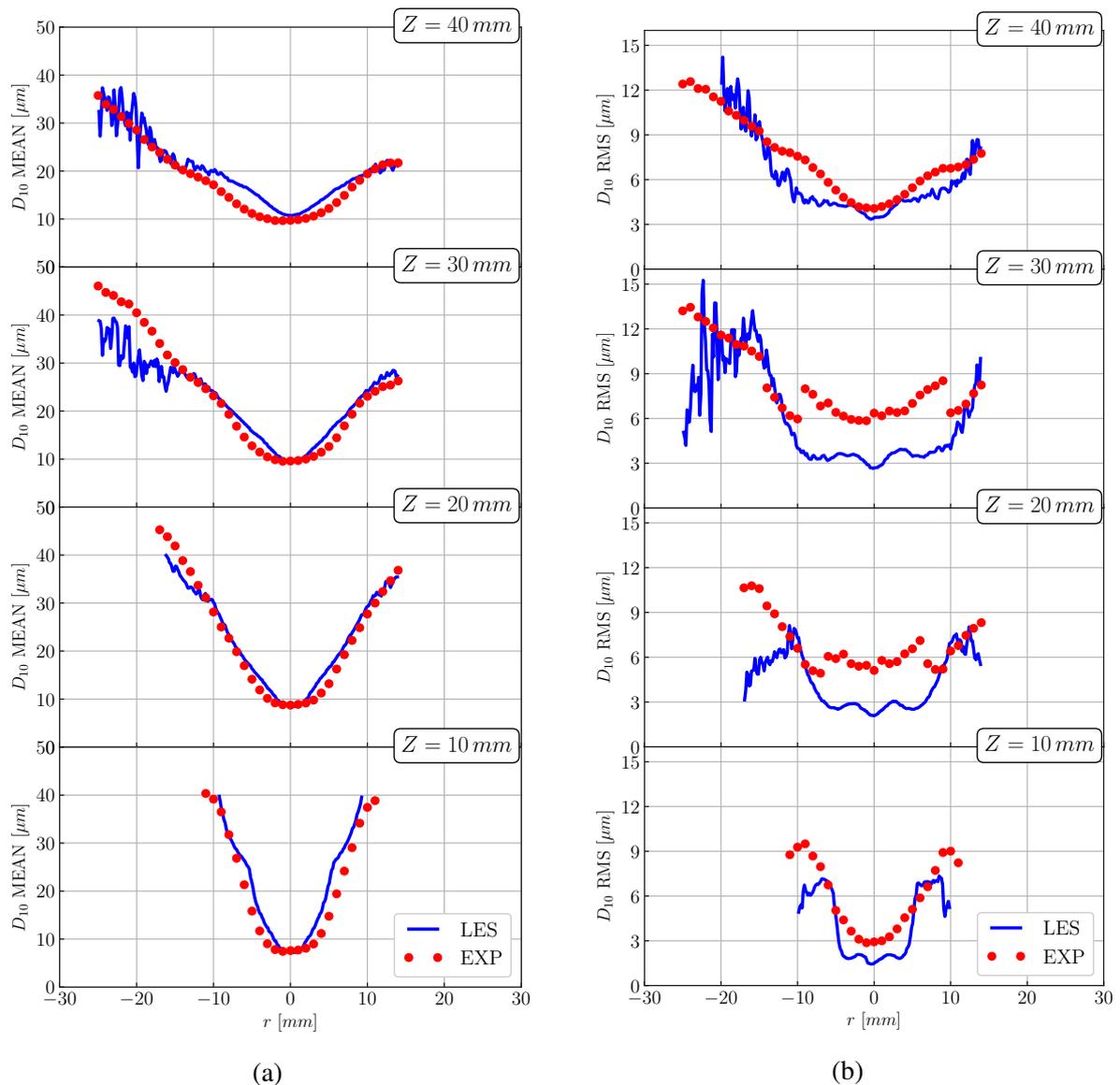


FIGURE 6.17 – Diamètre de la phase liquide : (a) diamètre moyen  $d_{10}$  (b) RMS du diamètre  $d_{10}$ .

La figure (6.18) montre une comparaison des données LES et des données mesurées pour la vitesse de la phase dispersée à plusieurs positions axiales. Les vitesses moyennes axiale et radiale (Figs. 6.18a et 6.19a) sont en accord avec les mesures expérimentales. La première position axiale à  $Z = 10 \text{ mm}$  montre que le modèle d'injection n'est pas parfait et manque d'intermittence par rapport aux données expérimentales. Les fortes fluctuations des vitesses RMS dans la région extérieure sont de nouveau dues à un manque de convergence statistique et au petit nombre de petites gouttelettes.

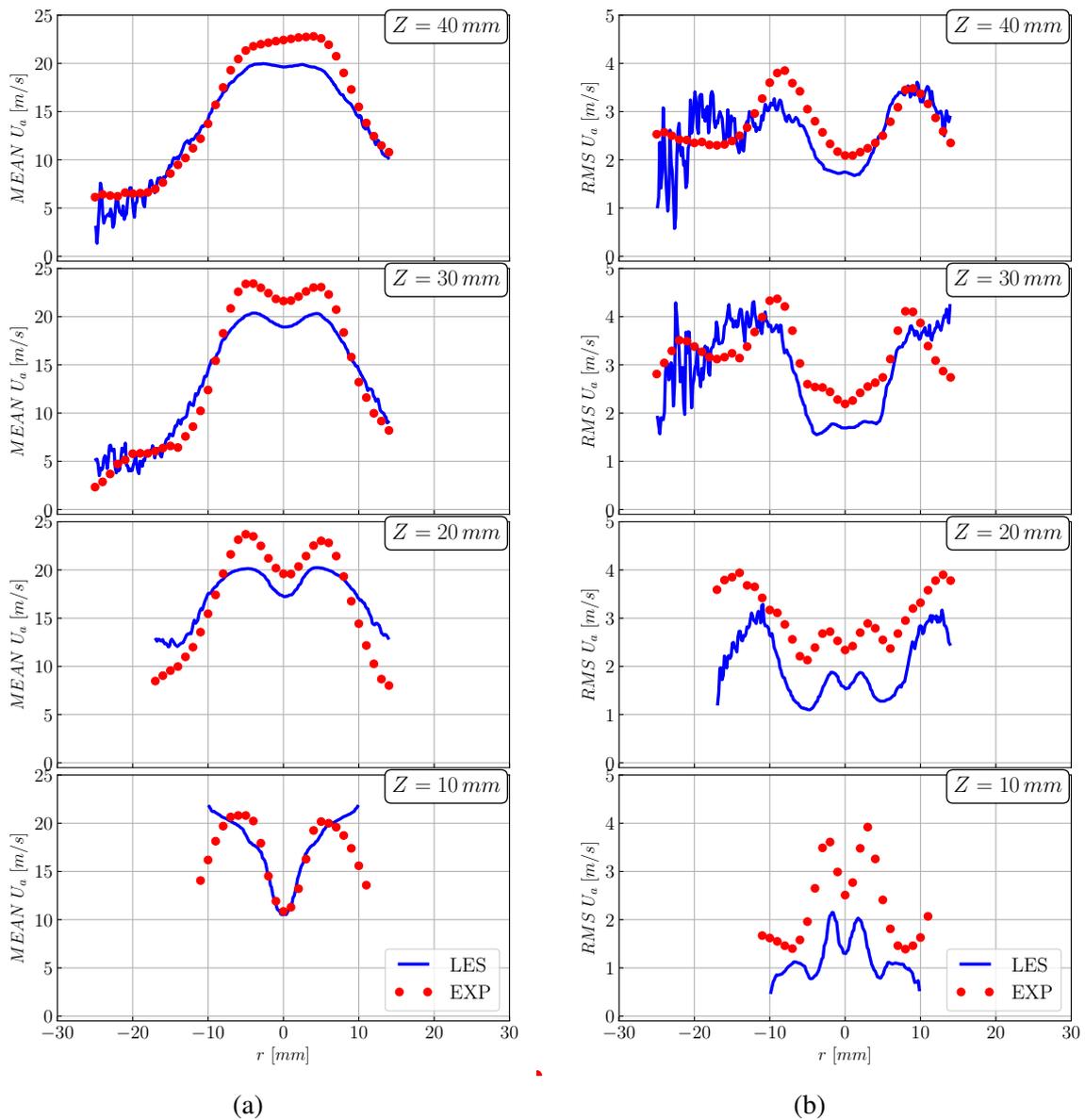


FIGURE 6.18 – Vitesse axiale de la phase liquide : (a) Valeurs moyennes (b) Valeurs RMS.

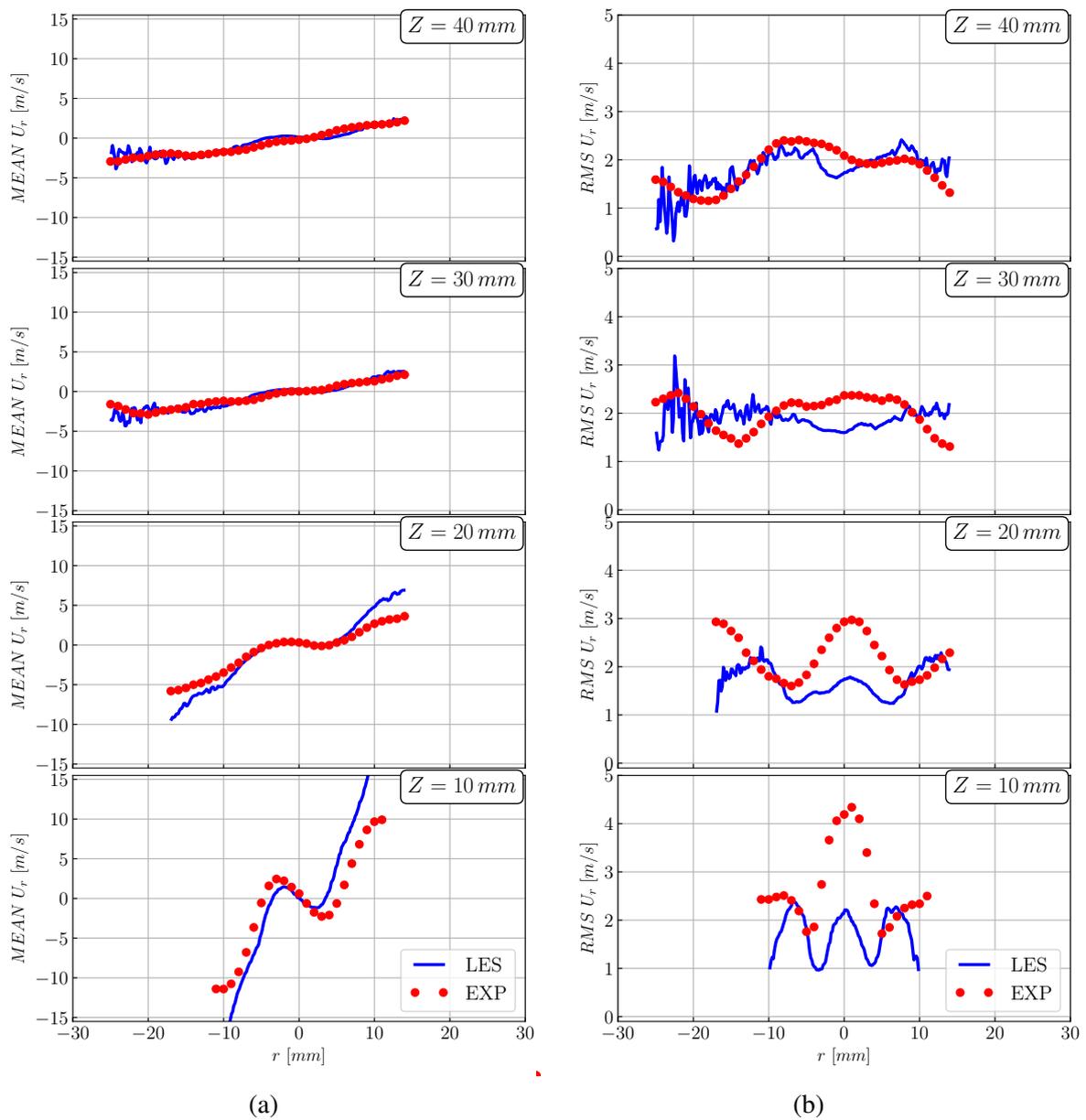


FIGURE 6.19 – Vitesse radiale de la phase liquide : (a) Valeurs moyennes (b) Valeurs RMS.

Dans les figures (6.20,6.21), la vitesse du liquide conditionnée par le diamètre des gouttelettes est analysée. Quatre différentes classes de diamètre sont considérées : 0 – 10, 10 – 20, 20 – 20, 20 – 30 et 30 – 40  $\mu m$ . Les vitesses moyennes axiale et radiale sont globalement bien reproduites. L'écart principal concerne la vitesse maximale des petites gouttelettes ( $< 20 \mu m$ ) pour les trois positions axiales supérieures. Cette différence peut provenir d'une surestimation de l'étalement du jet.

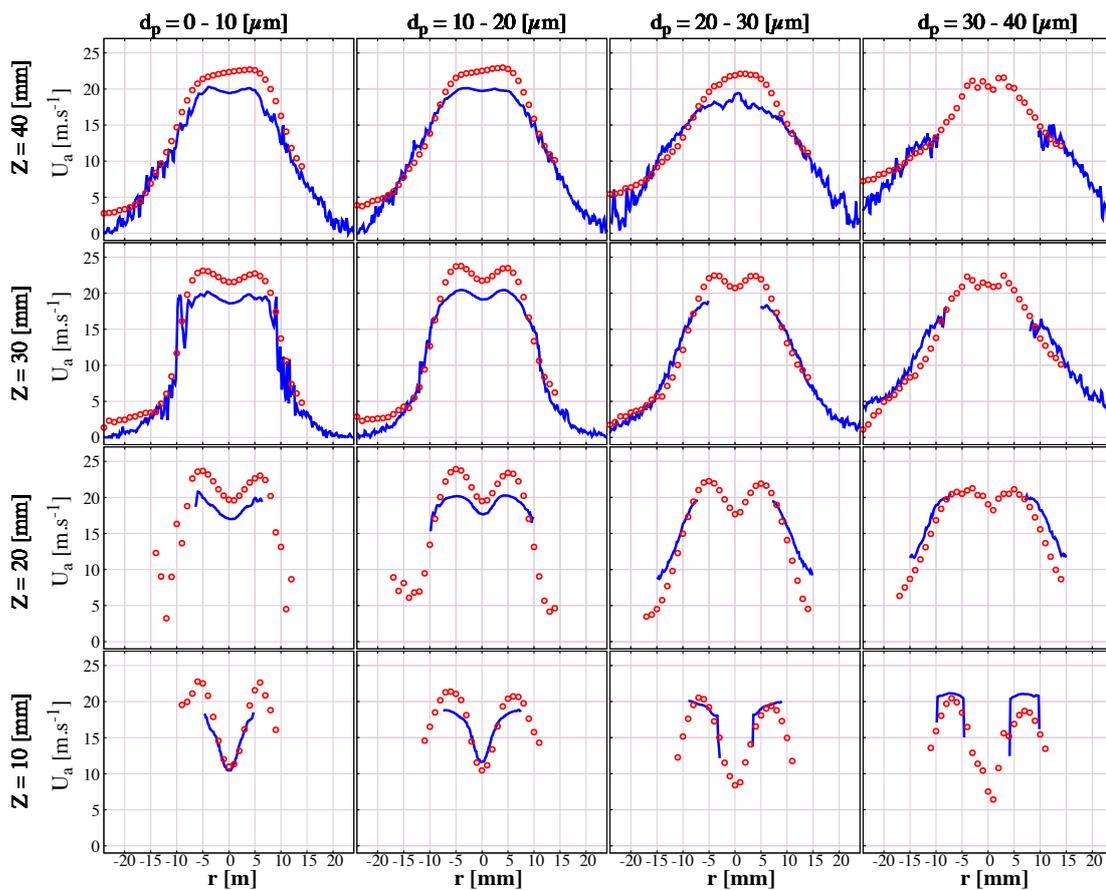


FIGURE 6.20 – Vitesse moyenne axiale en fonction des classes du diamètre. LES (—), EXP (○)

La figure (6.20) ci-dessus confirme la distribution des gouttelettes de la phase dispersée selon leur taille. En effet, comme expliqué précédemment, les petites gouttelettes sont entraînées par le jet d'air et restent près de l'axe de l'injection. Les grosses gouttelettes, quant à elles, sont réparties sur le côté extérieur du jet et elles ne contribuent pas à l'accumulation des statistiques de la zone centrale. Cela ressort de la figure par le fait que, à  $Z = 10$  et  $20$  mm, seulement la vitesse des petites gouttes qui est reproduite dans les classes du diamètre  $[0 - 10] \mu m$  et  $[10 - 20] \mu m$ . Sur les mêmes plans et pour les classes des grosses gouttelettes ( $[20 - 30] \mu m$  et  $[30 - 40] \mu m$ ) uniquement la vitesse aux extrémités du jet qui sont captées.

La même conclusion s'applique sur la vitesse radiale par classes de diamètre des gouttes. Dans la zone centrale du jet, la vitesse des petites gouttelettes est parfaitement reproduite contrairement à la zone extérieure du spray où des fortes fluctuations apparaissent faute de contribution des grosses gouttelettes à l'accumulation des statistiques.

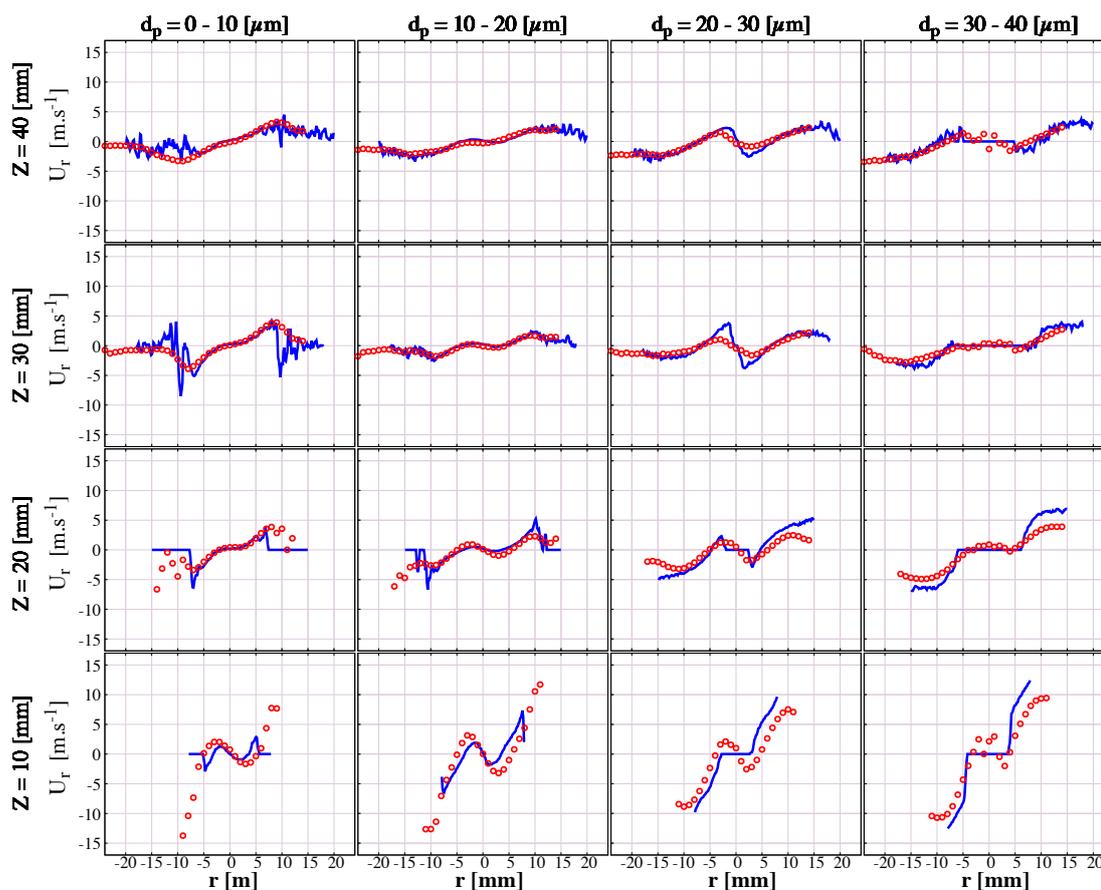


FIGURE 6.21 – Vitesse moyenne radiale en fonction des classes du diamètre. LES (—), EXP (○)

La température de la phase liquide est présentée sur la figure (6.22). Expérimentalement, cette température est mesurée avec la technique Arc-en-ciel globale (GRT pour Global Rainbow Refractometry) évoquée *supra*. Elle est donnée selon une loi de  $d^{7/3}$  [193]. Numériquement elle est calculée par la relation suivante :

$$\langle T_d \rangle = \frac{\langle \omega_i T \cdot d^{7/3} \rangle}{\langle \omega_i d^{7/3} \rangle} \quad (6.1)$$

De cette formule il ressort que la température des gouttes est proportionnelle à leurs diamètre. Plus il est important, plus sa contribution à la température moyenne pondérée l'est également. De ce fait, la zone centrale est chargée de gouttelettes de petite taille, entraînées par le flux d'air et qui s'évaporent lentement en refroidissant la gaz environnant (Fig. 6.23). La figure (6.24) présente le taux d'évaporation massique en fonction de classes du diamètre des gouttelettes sur les quatre plans. Ce taux d'évaporation massique est très important dans l'axe central où le flux

d'air est chargé de gouttelettes de petite taille. La pondération de la température moyenne par le poids de ces gouttelettes contribue à diminuer la température dans cette zone. Ce constat est consolidé par la simulation numérique. Mais expérimentalement, la température dans la zone centrale est supérieure à la température d'équilibre d'une goutte de n-heptane s'évaporant dans un milieu ambiant ( $T_g = 300\text{ K}$ ). La technique de mesure de la température, GRT, reste une technique complexe et nécessite d'autres études de validation.

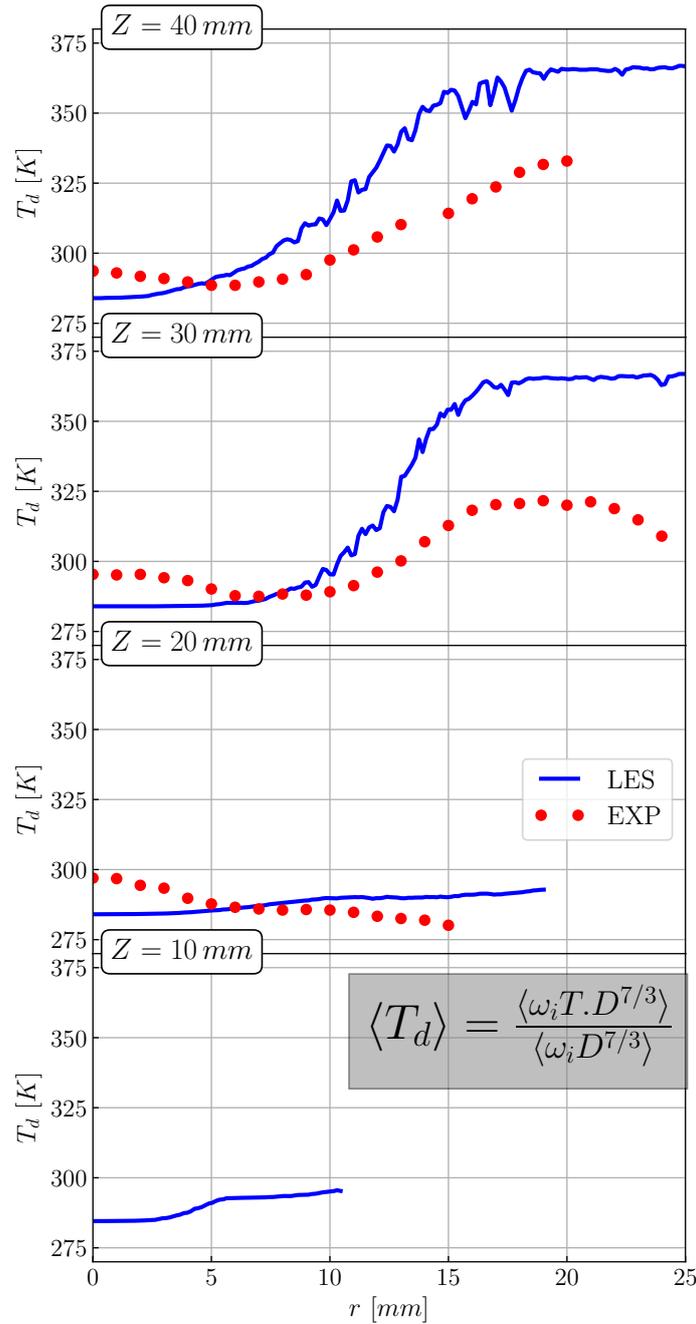


FIGURE 6.22 – Température moyenne de la phase liquide pondérée par le diamètre des gouttes.

## Simulation d'une flamme de spray turbulente

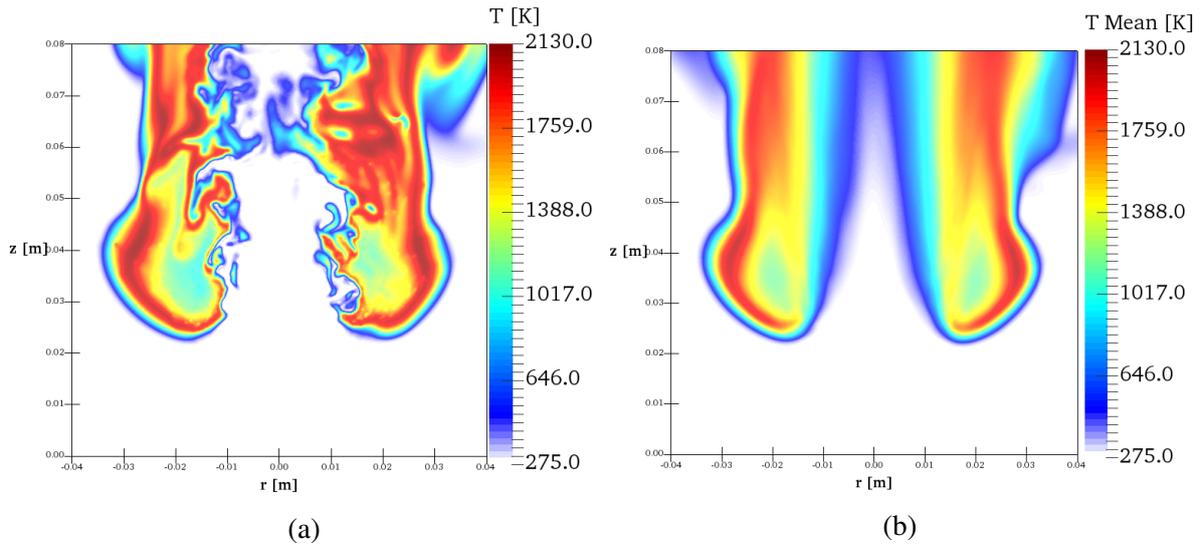


FIGURE 6.23 – Champ instantané (a) et champ moyen (b) de la température de la phase gazeuse.

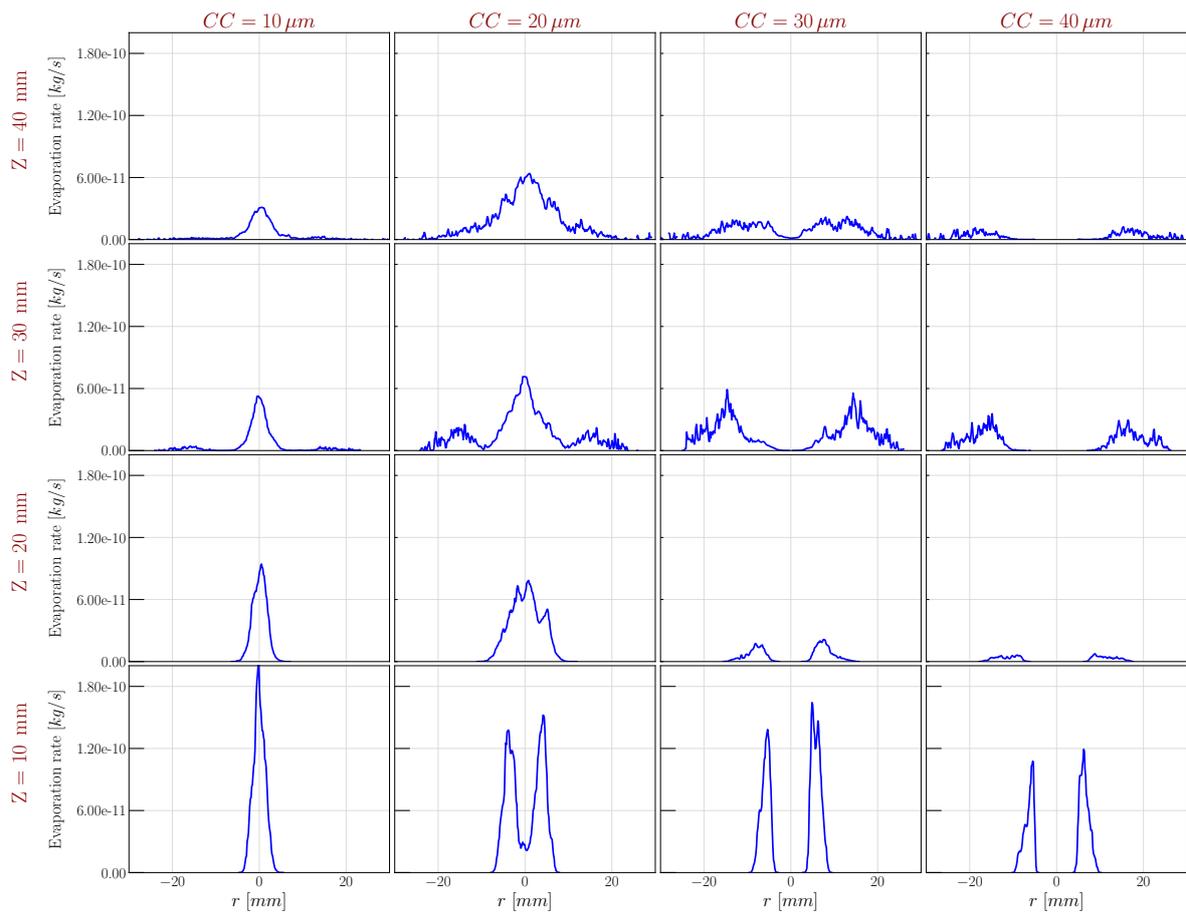


FIGURE 6.24 – Taux d'évaporation massique en fonction des classes du diamètre.

### 6.4.3 Interaction flamme/gouttelette

Les résultats expérimentaux ont mis en évidence un phénomène d'extinction locale à la base de la flamme. Cette extinction locale est causée par les grosses gouttelettes ( $d_{10} > 30 \mu m$ ) qui se déplacent vers la partie externe du jet en traversant la base de la flamme, atteignant ainsi la zone chaude [223]. La figure (6.25) illustre ce phénomène d'extinction locale à la base de la flamme. La goutte présentée par le cercle jaune pénètre dans le front de flamme.

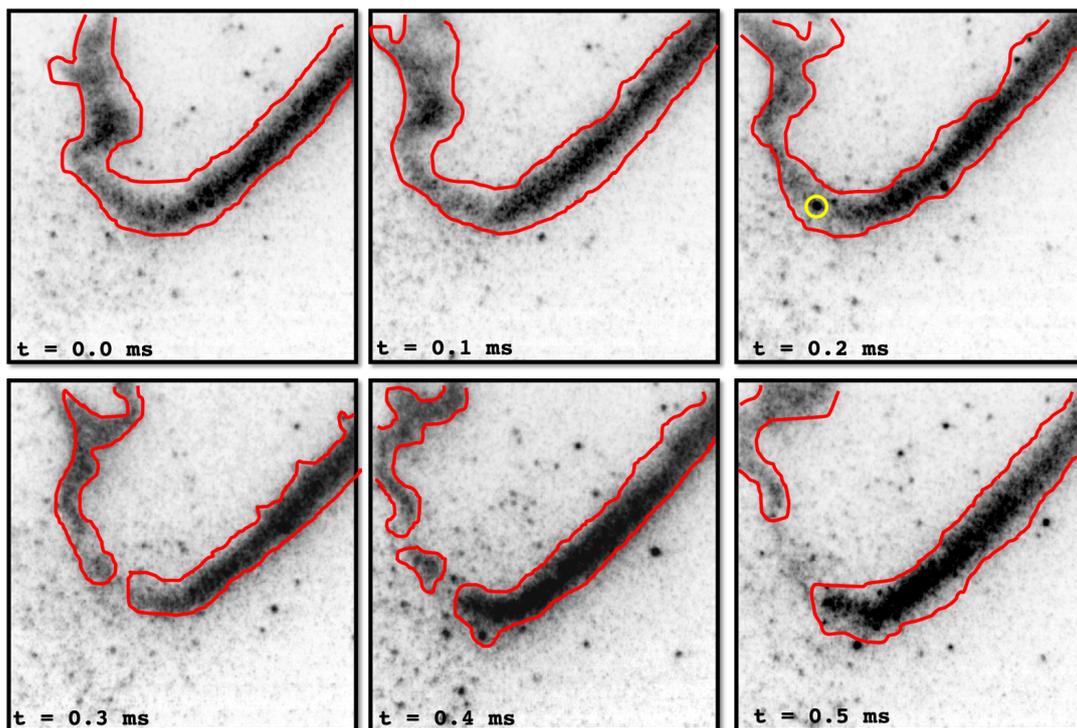


FIGURE 6.25 – Extinction locale à la base de la flamme due à l'interaction flamme/gouttelette [223]. La goutte présentée par le cercle jaune traverse le front de flamme à  $t = 0.2 \text{ ms}$ , à  $0.3 \text{ ms}$  un trou se crée dans le front de flamme et correspond à une extinction locale.

Le phénomène d'extinction locale est reproduit par la simulation numérique. La figure (6.26) montre plusieurs extinctions locales, sur des temps différents, causées par le passage des gouttes par la base de la flamme. Plusieurs facteurs peuvent contribuer à l'extinction locale de la flamme. L'échange d'énergie entre les gouttelettes et le front de flamme vient perturber le taux de réaction [154]. La température des gouttelettes est inférieure à celle du gaz environnant, elles agissent comme un puits de température aux réactions chimiques induisant l'extinction locale du front de flamme par refroidissement [223]. De plus, quand les grosses gouttelettes traversent le

## Simulation d'une flamme de spray turbulente

front de flamme, elles se retrouvent au milieu des gaz brûlés avec une température supérieure à celle des gouttelettes, la température de ces dernière augmente, induisant un taux d'évaporation important et une fraction massique élevée du fuel autour de la gouttelette (6.27a). Cela augmenterait la richesse locale qui peut dépasser les limites d'inflammabilité (6.27b). Étant donné que la branche interne de la flamme est soumise à une forte turbulence, les fréquences de l'extinction locale sont amplifiées.

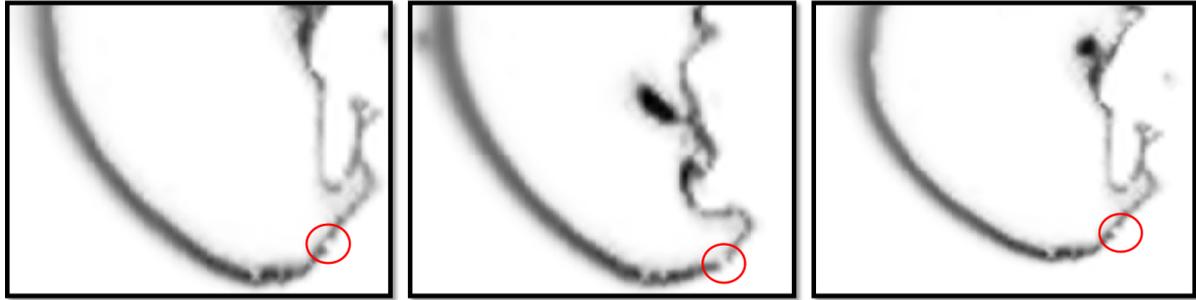


FIGURE 6.26 – Extinction locale à la base de la flamme due à l'interaction flamme/gouttelette reproduit par la simulation sur des temps différents.

En résumé, l'évaporation des gouttelettes, leur température inférieure, la richesse locale autour de celles-ci et la turbulence de cette zone de flamme expliquent l'extinction locale de la flamme.

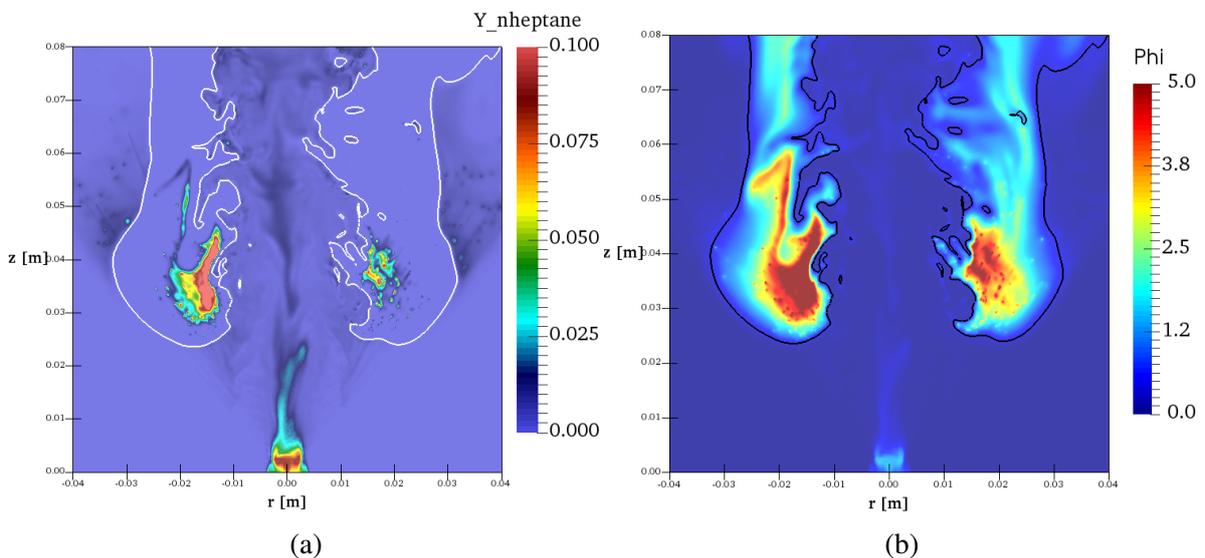


FIGURE 6.27 – Champ instantané du carburant n-heptane (a) et de la richesse du mélange (b) avec l'iso-contour du dégagement de chaleur

Comme expliqué précédemment, lors de l'injection les petites gouttelettes se concentrent dans la zone centrale du jet et les grosses gouttelettes sont distribuées à la périphérie du spray grâce à leur vitesse balistique acquise. Ces dernières réussissent à passer la base de la flamme et arrivent sur la branche extérieure provoquant ainsi des perturbations. La figure (6.28) illustre ces perturbations par un champ OH-PLIF issu de l'expérience.

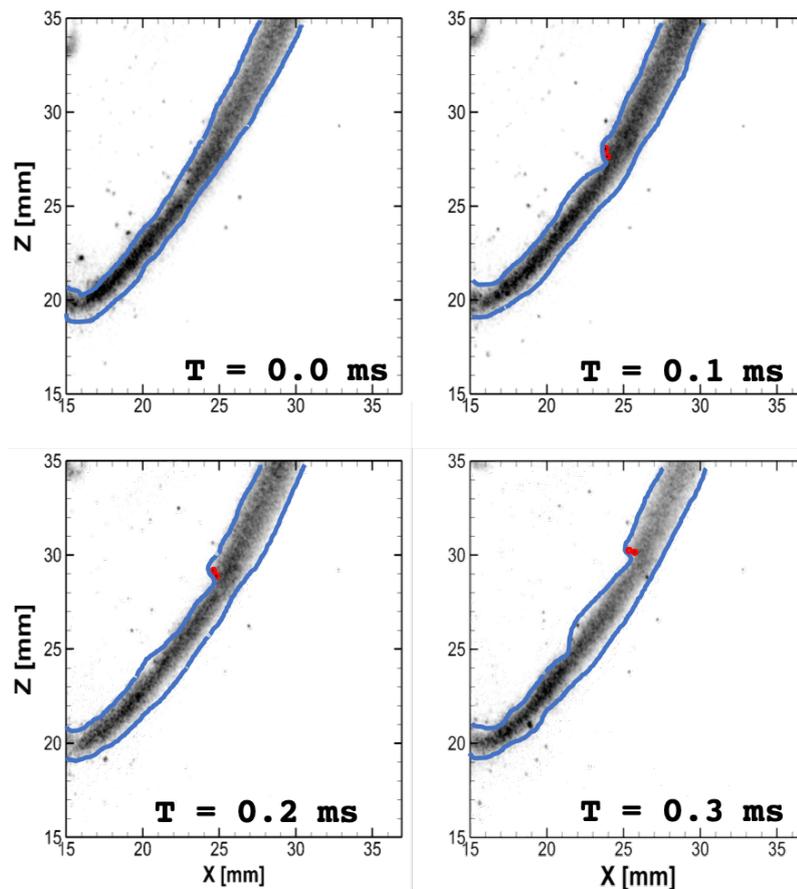


FIGURE 6.28 – Champ OH-PLIF des perturbations de la branche extérieure de la flamme due à l'interaction flamme/gouttelettes (Expérience [223]).

Grâce à un maillage suffisamment fin, les perturbations de la branche extérieure par les gouttelettes est reproduit par la simulation numérique comme présenté sur la figure (6.29). Cette dernière montre une évolution de la perturbation de la zone de réaction de la branche extérieure due au passage des gouttelettes. La branche externe de la flamme est soumise à une turbulence à faible intensité, les gouttelettes traversent le front de flamme sans causer d'extinction locale.

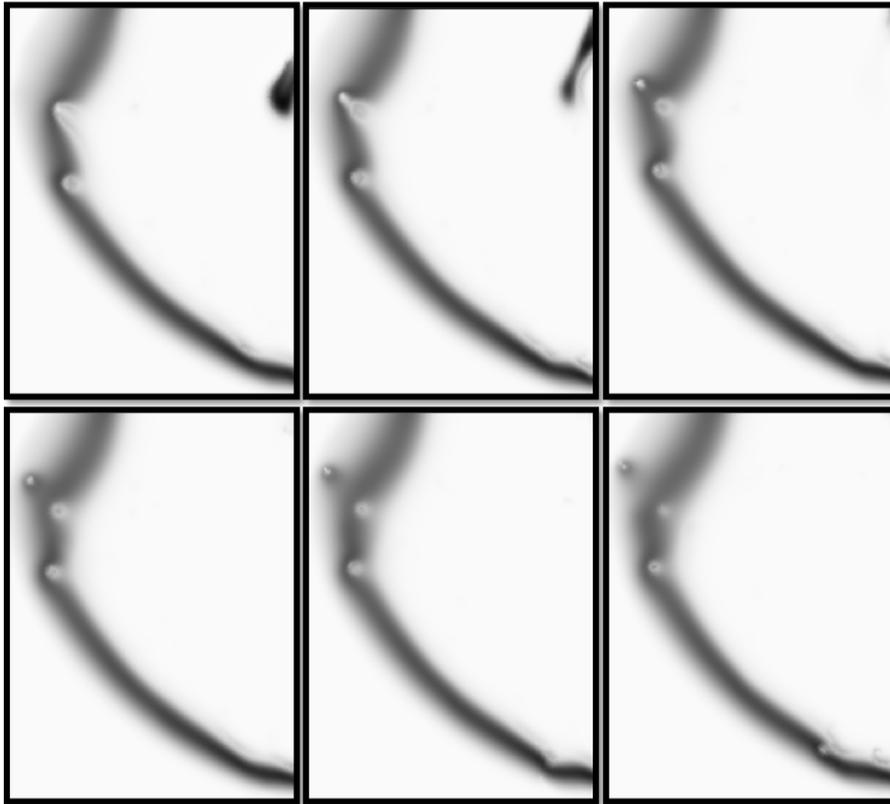


FIGURE 6.29 – Évolution de la perturbation de la branche extérieure de la flamme à cause de l'interaction flamme/gouttelettes. Résultat issu de la simulation numérique.

## 6.5 Performances

Afin d'évaluer les performances d'un calcul numérique, nous utilisons le coût réduit du calcul RCT, qui est le temps réel passé par un processeur dans le programme multiplié par le nombre de processeurs puis divisé sur le nombre total d'itérations et le nombre de volumes de contrôle dans le maillage :

$$RCT = 10^6 \times \frac{t_C \times n_c}{n_{it} \times n_{CV}} \quad (6.2)$$

Il s'agit du temps de simulation effectif moyen pour chaque volume de contrôle du maillage. Il est donné en  $\mu s$ .

Les performances du code YALES2 sur le cas KIAI réactif sont rapportées dans la table (6.2). Avec le maillage à 520M éléments, la charge par processeur est estimée à 30'000 éléments/processeur. Le coût des particules représente 31 % du coût de calcul total pour  $\approx 160'000$  particules à chaque instant sur l'ensemble du domaine. L'injection représente moins de 1 % de ce pourcentage, le reste est occupé par l'avancement des particules. L'étape de la correction de

la pression prend 19 % du coût total du calcul. L'opération sur les scalaires se fait à un coût élevé par rapport aux particules. Elle inclut l'avancement des scalaires et le calcul des termes sources.

<b>Maillage : 520M</b>	
<b>KIAI : cas réactif</b>	
<b>Nombre de processeurs</b>	16384
<b>Nombre de particules</b>	159072
<b>Pas de temps</b>	$1.5 \times 10^{-6} \text{ s}$
<b>Coût de calcul réduit</b>	3040 $\mu\text{s}$
- Particules	31 %
- Scalaires	45 %
- Communications	14 %
- Équation de Poisson	19 %

TABLE 6.2 – Performances du code de calcul sur le maillage 520M pour le cas réactif.

## 6.6 Conclusions

Une simulation à grande échelle de la flamme de spray dans le brûleur KIAI avec un schéma cinétique semi-détaillé a été réalisée et comparée aux données expérimentales. Ces comparaisons montrent la capacité de la LES, avec un schéma analytique et le modèle d'évaporation d'*Abramzon-Sirignano*, à reproduire avec une grande fidélité la forme de la flamme, les profils de vitesse des gaz et des liquides et la distribution des gouttelettes. L'analyse de la distribution spatiale de la taille des gouttelettes a montré que l'entraînement du flux gazeux sépare les gouttelettes : les plus petites sont situées principalement au niveau de l'axe du brûleur car elles agissent comme traceurs dès l'injection. Les plus grosses gouttelettes se trouvent de préférence du côté extérieur du spray en raison de leur inertie. Grâce à la bonne prédiction de la taille des gouttelettes, de la vitesse et des taux d'évaporation, la structure de la flamme est parfaitement reproduite par les simulations actuelles. Moyennant d'un maillage suffisamment fin, la simulation numérique est capable de capter les extinctions locales provoquées par l'évaporation des gouttelettes dans la base de flamme à forte turbulence. Les perturbations dans la branche externe de la flamme sont également captées. Elles sont dues au passage des grosses gouttelettes qui ont survécus à l'évaporation totale lors de leur passage par la base de la flamme. Ces gouttelettes perturbent le front de flamme de la zone extérieure sans causées d'extinctions locales.

# CONCLUSION ET PERSPECTIVES

---

## Sommaire

---

7.1 Conclusions . . . . .	203
7.2 Perspectives . . . . .	207

---

## 7.1 Conclusions

Le contexte énergétique de ces dernière décennies a vu naître plusieurs problématiques liées à l'utilisation des combustibles d'origines fossiles. C'est, d'une part, un enjeu économique à travers la dépendance des pays industriels aux producteurs du pétrole et de gaz naturel. Les prix de ces derniers dans le marché mondial subissent des fluctuations au sein d'un contexte géopolitiques instable. D'autre part, l'enjeu est environnemental via les gaz à effet de serre relâchés dans l'atmosphère par l'activité anthropique et le changement climatique qui en résulte. Plusieurs initiatives émergent afin de trouver des solutions renouvelables et durables. C'est ainsi, dans un cadre de recherche académique puis de test, que les carburants d'origines fossiles se voient substitués par des carburants alternatifs ou biocarburants de deuxième et de troisième génération. Ces derniers sont produits à base de biomasse, de déchets ménagers ou issus de la sylviculture ou à base de micro-organismes ou d'algues. Ils promettent un impact sur l'environnement bien inférieur par rapport à celui généré par les carburants conventionnels. Plusieurs questions se posent quant à l'utilisation de ces nouveaux carburants, notamment leur impact sur les performances moteur et sur les chambres de combustion. Il paraît nécessaire d'étudier les nouveaux carburants pour une meilleure compréhension de leur impact environnemental et technique. Les travaux menés dans cette thèse s'inscrivent dans un objectif à long terme qui mène vers la modélisation et simulation des flammes de spray multi-composants.

Pour atteindre les objectifs fixés, cette thèse s'est répartie sur trois volets principaux. Dans

un premier temps, nous avons commencé par l'étude d'une flamme monophasique en utilisant la configuration de flamme sphérique en expansion (SEF). Ainsi, les méthodes numériques d'intégration spatiales et temporelles, implémentées dans le code de calcul utilisé dans la suite de la thèse, ont été validées sur un calcul DNS avec une chimie détaillée de plusieurs combustibles conventionnels, le méthane et l'iso-octane en l'occurrence. Un modèle de vitesse moyenne de consommation de la flamme est dérivé parallèlement à cette étude. Avec l'apparition et l'utilisation future des biocarburants, le recours à cette propriété de la flamme est primordial pour valider les schémas cinétiques desdits carburants. Les résultats obtenus avec ce modèle, montrent qu'il peut servir à évaluer l'expression analytique de la vitesse de consommation avec n'importe quelle espèce utilisée, réactifs ou produits. Mais, de petites différences sont observées en fonction de l'espèce considérée. Néanmoins, la différence diminue avec l'avancement du front de flamme et est du même ordre de grandeur que l'incertitude inhérente aux mesures expérimentales. De plus, dans le cas confiné, si l'on considère l'espèce déficiente, le modèle aboutit à une relation avec le terme de droite (RHS) défini uniquement par des paramètres cinématiques et le terme de gauche (LHS) défini uniquement par des paramètres cinétiques et ils sont identiques. Le terme de compression  $\frac{1}{\rho_u} \frac{d\rho_u}{dt}$  qui apparaît dans le LHS est mesuré à l'aide d'une nouvelle méthode expérimentale développée dans les travaux de *Lefebvre et al.* [122, 221] et il est accessible numériquement. Ainsi, l'expression analytique de la vitesse de consommation résultante est un très bon candidat pour une estimation expérimentale précise car la détermination des caractéristiques de l'état thermodynamique et cinétique,  $\rho_b$  et  $Y_b$ , des gaz brûlés n'est pas nécessaire.

L'outil numérique est ainsi validé sur une flamme monophasique à l'aide de schémas cinétiques détaillés. Or, l'un des défis introduit par l'étude des combustibles conventionnels et renforcé par l'avènement des biocarburants est l'aspect multi-composants. La composition complexe des combustibles conventionnels, le sera davantage en introduisant des mélanges comportant des biocarburants afin d'obtenir des carburants alternatifs qui se substituent aux fuels d'origine fossile. Elle doit être prise en compte lors des phases de développement d'une nouvelle chambre de combustion afin de mieux comprendre les processus multi-physiques qui s'y produisent. Des fuels dits surrogates ont été introduits par la communauté scientifique afin de simplifier les études expérimentales et numériques en relation avec les combustibles de composition complexe.

Avant d'aller vers des simulations de flammes diphasiques qui tiennent compte de la com-

plexité de la composition des carburants actuels et futurs, nous nous sommes intéressés à l'évaporation multi-composants. C'est ainsi que le modèle d'évaporation d'*Abramzon-Sirignano* est implémenté dans le solveur YALES2 utilisé pour réaliser les simulations numériques lors de cette thèse. Une amélioration est apportée à la modélisation de la composition de la phase liquide en prenant en compte différentes configurations de la goutte et la diffusivité des composants dans chaque cas. Plusieurs cas d'évaporation peuvent ainsi être simulés, à savoir : le cas d'une goutte mono-composant simple, d'une goutte mono-surrogate, une goutte multi-composants et une goutte à plusieurs surrogates.

Le modèle d'*Abramzon-Sirignano* est validé sur un ensemble de cas test d'évaporation d'une goutte isolée, en comparant les résultats aux données expérimentales de différentes expériences issues de la littérature. Les expériences ont été réalisées en accrochant la goutte à l'extrémité d'une fibre de verre qui lui sert de support. Dans certains cas, cette dernière, apporte un flux de chaleur par les simulations. Ce flux de chaleur supplémentaire contribue à l'accélération du temps d'évaporation. Par conséquent, un écart est observé avec les résultats expérimentaux sans toutefois remettre en cause la pertinence du modèle.

Différents modèles de composition d'une goutte kérosène sont utilisés pour valider le modèle d'évaporation. Il a été démontré que lorsque le kérosène est modélisé par trois composants liquides distincts dans la goutte, chaque composant s'évapore avec sa propre diffusivité, contrairement aux cas modélisés par un surrogate mono-espèce ou multi-espèces. Avec cette diffusion différentielle des composants, le modèle donne un coefficient d'évaporation proche de celui donné par l'expérience et par conséquent il reproduit le temps d'évaporation de la goutte du cas expérimental.

Outre la comparaison avec les données expérimentales issues de la littérature, le modèle d'*Abramzon-Sirignano* est également comparé au modèle d'évaporation de *Spalding*. Le modèle d'*Abramzon-Sirignano* prend en compte les effets convectifs autour de la goutte en corrigeant les coefficients de transfert de masse et de chaleur à la surface de la goutte. Dans le cas d'évaporation d'une goutte isolée statique dans un environnement gazeux stagnant, les deux modèles ne montrent pas de différence.

Le modèle a également été validé sur des cas bi-composants. Il a montré un accord avec les résultats donnés par l'expérience et une cohérence sur le coefficient d'évaporation comparé à

ceux des cas mono-composant. En effet, dans le cas bi-composants étudié, le coefficient d'évaporation est contrôlé par le composant dominant dans la goutte. Au début de l'évaporation, le coefficient d'évaporation prend la valeur de celui du composant pur, dominant et le plus volatil, puis il bascule vers la valeur du coefficient d'évaporation du composant pur le moins volatil quand le premier diminue rapidement dans la goutte. Nous avons profité pour exposer à la fin de ce cas plusieurs propriétés d'évaporation, accessibles avec la simulation, pour donner une vue détaillée sur le comportement de la goutte bi-composants lors de son évaporation.

Afin de mettre en exergue la différence entre les deux modèles d'évaporation de *Spalding* et d'*Abramzon-Sirignano*, un cas d'évaporation en convection naturelle puis un cas en convection forcée ont été traités. Le cas bi-composants en convection forcée est simulé sur trois compositions différentes. Il ressort que le modèle d'*Abramzon-Sirignano* est en très bon accord avec les résultats de l'expérience à laquelle il est comparé, contrairement au modèle de *Spalding* qui montre une différence avec l'expérience durant la phase d'évaporation en convection forcée. Ceci prouve que le modèle AS prend bien en compte les effets convectifs autour de la goutte. La différence observée entre les deux modèles lors de la première phase en convection naturelle, est due à la prise en compte de la flottabilité. En effet, l'activation de la gravité lors du processus d'évaporation crée un champ de vitesse relative autour de la goutte induisant des effets convectifs faibles mais impactant à la fois l'évolution temporelle du diamètre de la goutte et le reste des propriétés d'évaporation. L'effet de la gravité sur l'évaporation en convection naturelle est ainsi exploré en fin du chapitre de validation du modèle d'évaporation. En activant la gravité, le nombre de *Reynolds* particulière montre des fluctuations qui suivent celles du champ de vitesse relative autour de la goutte, affectant ainsi les propriétés d'évaporation dépendantes du nombre de *Reynolds*.

Enfin, une étude d'une flamme diphasique est réalisée. Il s'agit de la flamme du brûleur KIAI, expérimentalement étudiée au laboratoire CORIA. Cette flamme est représentative des flammes de spray rencontrées dans les chambres aéronautiques. La simulation est réalisée avec un schéma cinétique semi-détaillé et un maillage suffisamment fin pour se passer d'un modèle de combustion en sous-maille. L'évaporation, quant à elle, est modélisée par le modèle d'*Abramzon-Sirignano*. La comparaison avec l'expérience montre la capacité de la LES à reproduire avec fidélité la structure de la flamme, les profils de vitesse de gaz et de liquide et la distribution des gouttelettes. Avec le maillage utilisé, la simulation numérique a également reproduit les interactions flamme/gouttelette : l'extinction locale à la base de la flamme causée

par le processus d'évaporation et les échanges thermiques avec la flamme, et les perturbations de la branche externe de la flamme qui sont dues aux grosses gouttelettes qui ont réussies à passer la base de la flamme.

## 7.2 Perspectives

Au terme du travail réalisé dans cette thèse, une première base est posée pour la simulation des flammes de spray de fuel liquide multi-composants. Néanmoins, plusieurs perspectives peuvent être dressées. Premièrement, utiliser le modèle d'évaporation présenté dans cette thèse pour simuler une flamme de spray d'un combustible multi-composants. L'objectif serait d'investiguer l'impact de l'évaporation préférentielle sur la structure de la flamme diphasique. Notamment sur les combustibles conventionnels comme le kérosène modélisé habituellement par un surrogate, qui s'évapore avec une seule vitesse, comme nous l'avons montré au cours de cette thèse. L'utilisation d'un schéma cinétique adéquat est nécessaire car il permet de modéliser l'aspect multi-espèces de la phase gazeuse générée par l'évaporation de combustible liquide multi-composants.

Deuxièmement, l'adaptation dynamique du maillage afin de raffiner la taille des mailles au niveau de front de flamme. Pour minimiser le nombre d'éléments du maillage, il faudrait que cette adaptation soit dynamique afin de suivre l'évolution du front de flamme au cours de calcul.

Faute d'étude expérimentale réalisée sur des flammes de spray multi-composants, une étude numérique en intégrant l'évaporation multi-composants et l'adaptation de maillage dynamique au cours de calcul, pourrait aider à construire une base de données des résultats qui vont servir de référence pour de futures études expérimentales et numériques.



# TABLE DES FIGURES

1.1	Variation du prix du pétrole brut jusqu'à l'année 2018 en fonction des principaux événements géopolitiques de ces dernières décennies. . . . .	22
1.2	Exemple de plantes servant de matières premières pour la production des bio-carburants de 2 <sup>ième</sup> génération. . . . .	25
2.1	Structure des écoulements turbulents non-réactifs / réactifs. . . . .	45
2.2	Spectre d'énergie cinétique turbulente $E$ en fonction du nombre d'onde $k$ . . . . .	47
2.3	Illustration du fonctionnement des approches RANS, LES et DNS : résolution temporelle d'une variable $\phi(t)$ . . . . .	48
2.4	Comparaison des méthodes numériques RANS, LES et DNS sur une simulation d'un jet turbulent. . . . .	49
2.5	Schéma d'une flamme de prémélange stationnaire mono-dimensionnelle. . . . .	61
2.6	Définition de l'épaisseur de flamme de prémélange. . . . .	63
2.7	Schéma d'une flamme de diffusion stationnaire mono-dimensionnelle. . . . .	63
2.8	Aspects multi-physiques et multi-échelles dans la chambre de combustion semi-industrielle MERCATO. . . . .	65
2.9	Volume de contrôle basé sur un nœud du maillage dans YALES2. . . . .	66
2.10	Représentation de la double décomposition de domaine sur un maillage composé de triangles. . . . .	69
2.11	Schéma de communication entre communicateurs et entre processeurs. . . . .	69
3.1	Schéma du domaine de la simulation 3D. . . . .	93
3.2	Validation des simulations 3D YALES2 par rapport à CANTERA. . . . .	94
3.3	Comparaison des expressions cinétique (LHS) et cinématique (RHS) pour la vitesse de consommation de la SEF. . . . .	95
3.4	Comparaison entre les données numériques et expérimentales des vitesses $\widetilde{S}_{d,b}$ et $\widetilde{S}_{d,u}$ . . . . .	96

3.5	Évolution de la vitesse de consommation par rapport au taux d'étirement de la flamme, considérant plusieurs espèces k . . . . .	97
3.6	Évolution de l'isotherme $R_{eq,k}$ et de $\Delta R$ en fonction du rayon de flamme . . . . .	98
3.7	Vitesse de propagation absolue liée aux deux rayons équivalents en considérant différentes espèces pour une flamme stoechiométrique $CH_4/air$ aux conditions atmosphériques. . . . .	99
3.8	Comparaison de la vitesse de consommation moyenne dans l'espace . . . . .	100
3.9	Comparaison de la vitesse de consommation moyenne et de la vitesse de déplacement de flamme pondérée par la densité . . . . .	101
4.1	Classes d'hydrocarbures rencontrées dans le diesel . . . . .	114
4.2	Schéma illustrant la composition d'une goutte d'un carburant liquide. . . . .	115
4.3	Schéma et notations utilisées par le modèle d'une goutte en évaporation . . . . .	119
4.4	Schéma d'une goutte s'évaporant dans un milieu ambiant gazeux. . . . .	121
4.5	Schéma illustrant l'hypothèse d'auto-similarité des profils des espèces évaporées pour le cas d'un surrogate. . . . .	123
4.6	Description de l'algorithme du modèle d'évaporation multi-composants. . . . .	134
5.1	Expérience de Nomura <i>et al.</i> et Chauveau <i>et al.</i> . . . . .	139
5.2	Comparaison expérimentale de la durée de vie des gouttes de n-heptane de Chauveau <i>et al.</i> et de Nomura <i>et al.</i> pour différentes températures ambiantes. . . . .	140
5.3	Propriétés physiques du n-heptane liquide en fonction de la température. . . . .	141
5.4	Évolution temporelle des nombres $Sc$ et $Pr$ du n-heptane gazeux . . . . .	142
5.5	Comparaison d'évaporation de gouttes de n-heptane, modèles d'évaporation avec les expériences de Chauveau <i>et al.</i> et Nomura <i>et al.</i> . . . . .	143
5.6	Évolution du taux d'évaporation des gouttes de n-décane en fonction du diamètre au carré de la fibre de support Chauveau <i>et al.</i> . . . . .	144
5.7	Images séquentielles de l'expérience de Ghassemi <i>et al.</i> montrant l'évaporation de la goutte du kérosène . . . . .	145
5.8	Évolution du diamètre au carré et de la température de la goutte de kérosène à $T = 973 K$ . Comparaison avec les résultats expérimentaux de Ghassemi <i>et al.</i> . . . . .	147
5.9	Évaporation de la goutte du kérosène : (a) Coefficient d'évaporation $C_{evap}$ (b) taux d'évaporation massique $\dot{m}$ . . . . .	148

## TABLE DES FIGURES

---

5.10	Comparaison de trois modèles de composition liquide de la goutte du kérosène. (a) Courbes de régression de la surface de la goutte. (b) Température de la goutte.	149
5.11	Coefficient d'évaporation et taux d'évaporation massique de la goutte du kérosène pour différents modèles de composition liquide. . . . .	150
5.12	Comparaison des propriétés de la goutte du kérosène pour différents modèles de composition liquide. . . . .	151
5.13	Coefficient de diffusion de la goutte du kérosène pour différents modèles de composition liquide. . . . .	152
5.14	Évaporation d'une goutte mono-composante, n-heptane et hexadécane purs. . .	153
5.15	Évolution du diamètre au carré et de la température de la goutte hexadécane à $T_g = 673 K$ . . . . .	154
5.16	Évaporation d'une goutte bi-composants n-heptane / hexadécane (50%) $T_g = 673$ à $973 K$ . . . . .	154
5.17	Coefficients d'évaporation et taux d'évaporation massiques d'une goutte bi-composants (n-heptane/hexadécane) à différentes températures du gaz ambiant.	155
5.18	Évaporation d'une goutte bi-composants n-heptane/hexadécane, $T_g = 973 K$ . .	156
5.19	Nombres de <i>Spalding</i> massiques $Bm_i$ pour les deux composants de la goutte. .	157
5.20	Nombre de <i>Schmidt</i> $Sc$ pour chaque composant et nombre de <i>Prandtl</i> $Pr$ selon la température ambiante. . . . .	158
5.21	Propriétés du mélange autour de la goutte à l'état de référence. . . . .	158
5.22	Coefficient de diffusion des deux composants de la goutte, $D_i$ , calculé à l'état de référence. . . . .	159
5.23	Évaporation d'une goutte en convection forcée pour a) n-heptane b) n-décane. Évolution temporelle du diamètre au carré adimensionné et la température de la goutte. . . . .	161
5.24	Évaporation d'une goutte bi-composants n-heptane / n-décane (75% - 25%). Évolution temporelle du diamètre et de la température. . . . .	162
5.25	Évaporation d'une goutte bi-composants n-heptane / n-décane (50% - 50%). Évolution temporelle du diamètre et de la température. . . . .	163
5.26	Quelques propriétés de l'évaporation de la goutte n-heptane/n-décane (50% - 50%). Comparaison des deux modèles d'évaporation. . . . .	164
5.27	Évaporation d'une goutte bi-composants n-heptane / n-décane (25% - 75%). Évolution temporelle du diamètre et de la température. . . . .	165

5.28	Taux d'évaporation massique et fractions massiques liquide de la goutte de n-heptane / n-décane à 50% - 50%	166
5.29	Évaporation d'une goutte de n-heptane statique dans l'air au repos. Sans la gravité sur le gaz, la vitesse relative autour de la goutte reste quasi-nulle. Le diamètre de la goutte (sphère de couleur blanche) est amplifié pour visibilité.	168
5.30	Évaporation d'une goutte de n-heptane statique dans l'air au repos. Avec l'activation de la gravité sur le gaz, un mouvement d'air descendant se crée et des cellules convectives se forment autour de la goutte.	168
5.31	Variation du nombre de Reynolds particulaire sous l'effet de la gravité lors de l'évaporation d'une goutte de n-heptane / n-décane (75% - 25%) calculée avec le modèle AS.	169
5.32	Variation des nombres de <i>Nusselt</i> et de <i>Sherwood</i> avec ou sans la gravité.	169
5.33	Variation du nombre de <i>Spalding</i> massique, $B_m$ , lors d'une évaporation avec ou sans gravité.	170
5.34	Effet de la gravité sur l'évaporation en convection naturelle d'une goutte de n-heptane / n-décane (75% - 25%). Évolution temporelle du diamètre et de la température.	170
6.1	Géométrie du système d'injection du brûleur KIAI.	175
6.2	Géométrie de la partie d'injection (air + fuel) du brûleur KIAI. Le tourbillonneur est divisé en 18 canaux avec un angle d'inclinaison nulle pour avoir un écoulement non tourbillonnaire.	175
6.3	Maillage de la géométrie KIAI - CERFACS.	178
6.4	Comparaison des profils de fractions massiques de OH et du champ expérimental issu du diagnostique OH-PLIF.	179
6.5	Quelques résultats obtenus par les différentes équipes exposés lors de TCS6.	180
6.6	Maillage raffiné $M1$ avec 520M d'élément. Taille des cellules.	181
6.7	Schéma de l'injection de l'air (lignes de courant) et de fuel (gouttelette).	182
6.8	Vitesse de la flamme laminaire prémélangée $S_L$ du mélange n-heptane/air pour différentes valeurs de richesse $\phi$	183
6.9	Distribution spatiale des gouttelettes de n-heptane, colorée par leur température dans le cas non réactif.	184
6.10	Diamètre moyen des gouttelettes et température de la phase gazeuse du cas réactif. Plans de comparaison des résultats numériques et expérimentaux.	185

## TABLE DES FIGURES

---

6.11	Structure de flamme. à gauche : simulation - fraction massique de OH. À droite : champs OH-PLIF . . . . .	185
6.12	Scatter plot de la température en fonction de la fraction du mélange $Z$ , coloré par l'indice de flamme $FI$ . . . . .	187
6.13	Indice de flamme pour trois principaux régimes de combustion. . . . .	187
6.14	Champs de vitesse de la phase gazeuse . . . . .	188
6.15	Vitesse axiale de la phase gazeuse . . . . .	189
6.16	Vitesse radiale de la phase gazeuse . . . . .	190
6.17	Diamètre de la phase liquide. . . . .	191
6.18	Vitesse axiale de la phase liquide, valeurs moyennes et RMS. . . . .	192
6.19	Vitesse radiale de la phase liquide, valeurs moyennes et RMS. . . . .	193
6.20	Vitesse moyenne axiale en fonction des classes du diamètre . . . . .	194
6.21	Vitesse moyenne radiale en fonction des classes du diamètre . . . . .	195
6.22	Température moyenne de la phase liquide pondérée par le diamètre des gouttes. . . . .	196
6.23	Champ instantané et champ moyen de la température de la phase gazeuse. . . . .	197
6.24	Taux d'évaporation massique en fonction des classes du diamètre . . . . .	197
6.25	Extinction locale à la base de la flamme due à l'interaction flamme/gouttelette. . . . .	198
6.26	Extinction locale à la base de la flamme due à l'interaction flamme/gouttelette. . . . .	199
6.27	Champ de fraction massique du n-heptane et de richesse. . . . .	199
6.28	Champ OH-PLIF des perturbations de la branche extérieure de la flamme due à l'interaction flamme/gouttelettes. . . . .	200
6.29	Évolution de la perturbation de la branche extérieure de la flamme à cause de l'interaction flamme/gouttelettes. Résultat issu de la simulation numérique. . . . .	201



# LISTE DES TABLEAUX

---

1.1	Résumé des objectifs ACARE, Vision 2020 et Flightpath 2050, par rapport aux chiffres de l'an 2000. . . . .	23
5.1	Propriétés thermodynamiques du n-heptane liquide à $T = 371K$ . . . . .	141
5.2	Définition du surrogate du kérosène KERO-LUCHE . . . . .	146
5.3	Propriétés thermodynamiques des trois composants liquides de base à la température d'ébullition. . . . .	146
5.4	Modèles du fuel kérosène utilisés dans les cas tests. . . . .	146
5.5	Comparaison des coefficients d'évaporation des différents cas. . . . .	150
6.1	Tableau résumant quelques éléments de l'étude numérique comparative de la flamme diphasique du brûleur KIAI. . . . .	177
6.2	Performances du code de calcul sur le maillage 520M. . . . .	202



## BIBLIOGRAPHIE

- [1] ABIANEH, O. S., CHEN, C.-P. et MAHALINGAM, S. (2014). Numerical modeling of multi-component fuel spray evaporation process. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 69:44–53. *Cité page 113*
- [2] ABIANEH, O. S., OEHLSCHLAEGER, M. A. et SUNG, C.-J. (2015). A surrogate mixture and kinetic mechanism for emulating the evaporation and autoignition characteristics of gasoline fuel. *Combustion and Flame*, 162(10):3773–3784. *Cité page 116*
- [3] ABRAMZON, B. et SIRIGNANO, W. A. (1989). Droplet vaporization model for spray combustion calculations. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 32(9):1605–1618. *Cité pages 106, 117, 120, 125, et 128*
- [4] AHMED, A., GOTENG, G., SHANKAR, V. S., AL-QURASHI, K., ROBERTS, W. L. et SARATHY, S. M. (2015). A computational methodology for formulating gasoline surrogate fuels with accurate physical and chemical kinetic properties. *Fuel*, 143:290–300. *Cité page 116*
- [5] ALLISON, D. O. (1972). Polynomial approximations of thermodynamic properties of arbitrary gas mixtures over wide pressure and density ranges. *National Aeronautics and Space Administration - Washington D.C.* *Cité page 33*
- [6] ARGÜELLES, P. et BUSQUIN, P. (2001). *European Aeronautics : A Vision for 2020 : Meeting Society's Needs and Winning Global Leadership.* European Commission. *Cité pages 23 et 24*
- [7] BABINSKY, E. et SOJKA, P. (2002). Modeling drop size distributions. *Progress in energy and combustion science*, 28(4):303–329. *Cité page 109*
- [8] BALUSAMY, S., CESSOU, A. et LECORDIER, B. (2011). Direct measurement of local instantaneous laminar burning velocity by a new piv algorithm. *Experiments in Fluids*, 50:1–13. *Cité page 82*
- [9] BARDI, M., PAYRI, R., MALBEC, L. M. C., BRUNEAUX, G., PICKETT, L. M., MANIN, J., BAZYN, T. et GENZALE, C. L. (2012). Engine combustion network : comparison of spray development, vaporization, and combustion in different combustion vessels. *Atomization and Sprays*, 22(10). *Cité page 115*
- [10] BARRERE, M. et PRUD'HOMME, R. (1973). *Equations fondamentales de l'aerothermo-chimie.* Paris : Masson. *Cité page 35*
- [11] BECHTOLD, J. et MATALON, M. (2001). The dependence of the markstein length on stoichiometry. *Combustion and Flame*, 127:1906–1913. *Cité page 84*

- [12] BELL, J., CHENG, R., DAY, M. et SHEPHERD, I. (2007). Numerical simulation of lewis number effects on lean premixed turbulent flames. *Proceedings of the Combustion Institute*, 31:1309–1317. Cité pages 83 et 85
- [13] BINI, M. et JONES, W. (2007). Particle acceleration in turbulent flows : A class of nonlinear stochastic models for intermittency. *Physics of Fluids*, 19(3):035104. Cité page 136
- [14] BIRD, R. B. (2002). Transport phenomena. *Applied Mechanics Reviews*, 55(1):R1–R4. Cité pages 35 et 42
- [15] BOGER, M., VEYNANTE, D., BOUGHANEM, H. et TROUVÉ, A. (1998). Direct numerical simulation analysis of flame surface density concept for large eddy simulation of turbulent premixed combustion. In *Symposium (International) on Combustion*, volume 27, pages 917–925. Elsevier. Cité page 53
- [16] BOIVIN, M., SIMONIN, O. et SQUIRES, K. D. (1998). Direct numerical simulation of turbulence modulation by particles in isotropic turbulence. *Journal of Fluid Mechanics*, 375:235–263. Cité page 135
- [17] BONHOMME, A., SELLE, L. et POINSOT, T. (2013). Curvature and confinement effects for flame speed measurements in laminar spherical and cylindrical flames. *Combustion and Flame*, 160(7):1208–1214. Cité pages 84, 88, 90, 100, et 101
- [18] BOULET, L. (2018). *Modélisation couplée des transferts thermiques entre une flamme et une paroi ; Application aux essais de tenue au feu des carters de moteurs d’hélicoptères*. Thèse de doctorat, INSA de Rouen. Cité pages 65 et 116
- [19] BOUSSINESQ, J. (1877). Théorie de l’écoulement tourbillonnant, mémoire présentée par la division savante. Cité pages 51 et 53
- [20] BRADLEY, D., GASKELL, P. et GU, X. (1996). Burning velocities, markstein lengths, and flame quenching for spherical methane-air flames : a computational study. *Combustion and Flame*, 104:176–198. Cité page 85
- [21] BRADLEY, D., LAWES, M. et MANSOUR, M. (2009). Explosion bomb measurements of ethanol-air laminar gaseous flame characteristics at pressures up to 1.4 mpa. *Combustion and Flame*, 156:1462–1470. Cité page 84
- [22] BRAY, K. (1996). The challenge of turbulent combustion. In *Symposium (International) on Combustion*, volume 26, pages 1–26. Elsevier. Cité page 53
- [23] BROKAW, R. S. (1958). Approximate formulas for the viscosity and thermal conductivity of gas mixtures. *The Journal of Chemical Physics*, 29(2):391–397. Cité page 42
- [24] BRUNO, T. (2007). The properties of s-8 and jp-10. *Report prepared for Wright Laboratory Aero Propulsion Power Directorate under MIPR F4FBY6346G001*. Cité page 113
- [25] BUTLER, T. et O’ROURKE, P. (1977). A numerical method for two dimensional unsteady reacting flows. In *Symposium (International) on Combustion*, volume 16, pages 1503–1515. Elsevier. Cité page 53

## BIBLIOGRAPHIE

---

- [26] BÉNARD, P. (2015). *Analyse et amélioration d'une chambre de combustion centimétrique par simulations aux grandes échelles*. Thèse de doctorat, INSA de Rouen. Cité pages 39 et 68
- [27] CARATI, D., GHOSAL, S. et MOIN, P. (1995). On the representation of backscatter in dynamic localization models. *Physics of Fluids*, 7(3):606–616. Cité page 55
- [28] CATHONNET, M., GUERET, C., CHAKIR, A., DAGAUT, P., BOETTNER, J. et SCHULTZ, J. (1992). On the use of detailed chemical kinetics to model aeronautical combustors performances. In *Proceedings of the third European propulsion forum, EPF91, ONERA Paris, AAAF*. Cité page 145
- [29] CHAOS, M., ZHAO, Z., KAZAKOV, A., GOKULAKRISHNAN, P., ANGIOLETTI, M. et DRYER, F. L. (2007). A prf+ toluene surrogate fuel model for simulating gasoline kinetics. In *5th US combustion Meeting*, pages 25–28. Cité page 113
- [30] CHAPMAN, S., COWLING, T. G. et BURNETT, D. (1990). *The mathematical theory of non-uniform gases : an account of the kinetic theory of viscosity, thermal conduction and diffusion in gases*. Cambridge university press. Cité page 40
- [31] CHATELIER, A., MOUREAU, V., BERTIER, N. et FIORINA, B. (2018). Large Eddy simulation of a spray jet flame using filtered tabulated chemistry. *Journal of Propulsion and Power*. Submitted. Cité page 177
- [32] CHAUVEAU, C., BIROUK, M., HALTER, F. et GÖKALP, I. (2019). An analysis of the droplet support fiber effect on the evaporation process. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 128:885–891. Cité page 140
- [33] CHAUVEAU, C., HALTER, F., LALONDE, A. et GÖKALP, I. (2008). An experimental study on the droplet vaporization : effects of heat conduction through the support fiber. In *22 nd Annual Conference on Liquid Atomization and Spray Systems (ILASS Europe 2008)*. Cité pages 3, 5, 138, 139, 140, 143, et 144
- [34] CHEN, Z. (2010). Effects of radiation and compression on propagating spherical flames of methane/air mixtures near the lean flammability limit. *Combustion and Flame*, 157(12): 2267–2276. Cité pages 82, 83, et 91
- [35] CHEN, Z. (2015). On the accuracy of laminar flame speeds measured from outwardly propagating spherical flames : Methane/air at normal temperature and pressure. *Combustion and Flame*, 162(6):2442–2453. Cité pages 92 et 95
- [36] CHEN, Z., QIN, X., XU, B., JU, Y. et LIU, F. (2007). Studies of radiation absorption on flame speed and flammability limit of co2 diluted methane flames at elevated pressures. *Proceedings of the Combustion Institute*, 31 II:2693–2700. Cité page 91
- [37] CHEVALIER, C. et PELLEGRINI, F. (2008). PT-Scotch : A tool for efficient parallel graph ordering. *Parallel computing*, 34(6-8):318–331. Cité page 68
- [38] CHORIN, A. J. (1968). Numerical solution of the Navier-Stokes equations. *Mathematics of computation*, 22(104):745–762. Cité page 72

- [39] CHUCK, C. (2016). *Biofuels for aviation : feedstocks, technology and implementation*. Academic Press. Cité page 22
- [40] CLIFT, R., GRACE, J. et WEBER, M. (1978). Bubbles, drops, and particles. Cité pages 112 et 125
- [41] COHEN, S. D., HINDMARSH, A. C. et DUBOIS, P. F. (1996). Cvode, a stiff/nonstiff ode solver in c. *Computers in physics*, 10(2):138–143. Cité pages 67 et 92
- [42] COOK, A. W. et CABOT, W. H. (2004). A high-wavenumber viscosity for high-resolution numerical methods. *Journal of Computational Physics*, 195(2):594–601. Cité page 71
- [43] COOKE, J. A., BELLUCCI, M., SMOOKE, M. D., GOMEZ, A., VIOLI, A., FARAVELLI, T. et RANZI, E. (2005). Computational and experimental study of jp-8, a surrogate, and its components in counterflow diffusion flames. *Proceedings of the Combustion Institute*, 30(1):439–446. Cité page 116
- [44] CORIA CFD TEAM (2015). *CORIA Homepage* : <http://www.coria-cfd.fr>. Cité pages 32 et 92
- [45] CURRAN, H. J., GAFFURI, P., PITZ, W. J. et WESTBROOK, C. K. (1998). A comprehensive modeling study of n-heptane oxidation. *Combustion and flame*, 114(1-2):149–177. Cité pages 58 et 115
- [46] DAGAUT, P. (2002). On the kinetics of hydrocarbons oxidation from natural gas to kerosene and diesel fuel. *Physical Chemistry Chemical Physics*, 4(11):2079–2094. Cité page 145
- [47] DAIF, A., BOUAZIZ, M., CHESNEAU, X. et CHERIF, A. A. (1999). Comparison of multicomponent fuel droplet vaporization experiments in forced convection with the sirignano model. *Experimental Thermal and Fluid Science*, 18(4):282–290. Cité pages 3, 5, 138, et 160
- [48] DAÏF, A., CHÉRIF, A. A., BRESSON, J. et SARH, B. (1995). Etude numérique et expérimentale de l'évaporation d'une ou plusieurs gouttes de mélange de carburants dans un écoulement chauffé. *Journal de Physique III*, 5(10):1643–1660. Cité page 166
- [49] DE CHARENTENAY, J. et ERN, A. (2002). Multicomponent transport impact on turbulent premixed h<sub>2</sub>/o<sub>2</sub> flames. *Combustion Theory and Modelling*, 6(3):439–462. Cité page 39
- [50] DE GOEY, L. P. H., PLESSING, T., HERMANN, R. T. E. et PETERS, N. (2005). Analysis of the flame thickness of turbulent flamelets in the thin reaction zones regime. *Proceedings of the Combustion Institute*, 30(1):859–866. Cité page 85
- [51] DESANTES, J. M., LOPEZ, J. J., GARCIA, J. M. et PASTOR, J. M. (2007). Evaporative diesel spray modeling. *Atomization and Sprays*, 17(3). Cité page 115
- [52] DESJARDINS, O., FOX, R. O. et VILLEDIEU, P. (2008). A quadrature-based moment method for dilute fluid-particle flows. *Journal of Computational Physics*, 227(4):2514–2539. Cité page 109

## BIBLIOGRAPHIE

---

- [53] DESJONQUERES, P., GOUESBET, G., BERLEMONT, A. et PICART, A. (1986). Dispersion of discrete particles by continuous turbulent motions : new results and discussions. *The Physics of fluids*, 29(7):2147–2151. Cité page 110
- [54] DOMINGO, P., VERVISCH, L. et VEYNANTE, D. (2008). Large-eddy simulation of a lifted methane jet flame in a vitiated coflow. *Combustion and Flame*, 152(3):415–432. Cité page 53
- [55] DOUÉ, N. (2005). *Modélisation de l'évaporation de gouttes multi-composants*. Thèse, Ecole Nationale Supérieure de l'Aéronautique et de l'Espace. 00011. Cité pages 118, 119, et 130
- [56] DRAGONE, G., FERNANDES, B. D., VICENTE, A. A. et TEIXEIRA, J. A. (2010). Third generation biofuels from microalgae. Cité pages 24 et 25
- [57] DRUZHININ, O. et ELGHOBASHI, S. (1998). Direct numerical simulations of bubble-laden turbulent flows using the two-fluid formulation. *Physics of Fluids*, 10(3):685–697. Cité page 108
- [58] DUDLEY, B. *et al.* (2019). Bp statistical review of world energy, 68th edition. London, UK. Cité page 22
- [59] DUKOWICZ, J. K. (1980). A particle-fluid numerical model for liquid sprays. *Journal of computational Physics*, 35(2):229–253. Cité page 110
- [60] EDWARDS, T. et MAURICE, L. Q. (2001). Surrogate mixtures to represent complex aviation and rocket fuels. *Journal of Propulsion and Power*, 17(2):461–466. Cité pages 113 et 116
- [61] ELGHOBASHI, S. (1994). On predicting particle-laden turbulent flows. *Applied scientific research*, 52(4):309–329. Cité pages 107 et 110
- [62] ELGHOBASHI, S. (2006). An updated classification map of particle-laden turbulent flows. In *IUTAM Symposium on Computational Approaches to Multiphase Flow*, pages 3–10. Springer. Cité pages 107 et 136
- [63] ELGHOBASHI, S. et ABOU-ARAB, T. (1983). A two-equation turbulence model for two-phase flows. *The Physics of Fluids*, 26(4):931–938. Cité page 108
- [64] ENJALBERT, N. (2011). *Advanced modeling of two phase turbulent combustion with strong dilution by burnt gases*. Theses, INSA de Rouen. Cité pages 106, 110, et 119
- [65] ERN, A. et GIOVANGIGLI, V. (1994). *Multicomponent transport algorithms*, volume 24. Springer Science & Business Media. Cité pages 38 et 41
- [66] ERN, A. et GIOVANGIGLI, V. (1998). Thermal diffusion effects in hydrogen-air and methane-air flames. *Combustion Theory and Modelling*, 2(4):349–372. Cité page 39
- [67] FARCY, B. (2015). *Analyse des mécanismes de destruction non-catalytique des Oxydes d'Azote (DeNOx) et application à la simulation aux grandes échelles (LES) d'un incinérateur*. Thèse, INSA de Rouen. Cité pages 106, 110, et 138

- [68] FARRELL, J., CERNANSKY, N., DRYER, F., LAW, C., FRIEND, D., HERGART, C., MCD-  
VID, R., PATEL, A., MUELLER, C. J. et PITSCH, H. (2007). Development of an experimental  
database and kinetic models for surrogate diesel fuels. Rapport technique, SAE Technical  
Paper. *Cité page 115*
- [69] FELDEN, A. (2017). *Development of Analytically Reduced Chemistries (ARC) and appli-  
cations in Large Eddy Simulations (LES) of turbulent combustion*. Thèse de doctorat, Institut  
National Polytechnique de Toulouse - INPT. *Cité page 59*
- [70] FESSLER, J. R., KULICK, J. D. et EATON, J. K. (1994). Preferential concentration of heavy  
particles in a turbulent channel flow. *Physics of Fluids*, 6(11):3742–3749. *Cité page 135*
- [71] FEVRIER, P., SIMONIN, O. et SQUIRES, K. D. (2005). Partitioning of particle velocities in  
gas–solid turbulent flows into a continuous field and a spatially uncorrelated random distri-  
bution : theoretical formalism and numerical study. *Journal of Fluid Mechanics*, 533:1–46.  
*Cité pages 109 et 110*
- [72] FLEMMER, R. L. C. et BANKS, C. L. (1986). On the drag coefficient of a sphere. *Powder  
Technology*, 48(3):217–221. *Cité page 112*
- [73] FLIGHTPATH, A. (2011). 2050-europe’s vision for aviation. *Advisory Council for Aero-  
nautics Research in Europe*. *Cité pages 23 et 24*
- [74] FRANZELLI, B., RIBER, E., SANJOSÉ, M. et POINSOT, T. (2010). A two-step chemi-  
cal scheme for kerosene–air premixed flames. *Combustion and Flame*, 157(7):1364–1373.  
*Cité pages 116, 145, 146, et 149*
- [75] FROESSLING, N. (1938). The evaporation of falling drops. *Gerlands Beiträge Geophysik*,  
52:37. *Cité page 125*
- [76] FUCHS, N. A. (2013). *Evaporation and Droplet Growth in Gaseous Media*. Elsevier.  
*Cité page 117*
- [77] FUKAGATA, K. (1999). *Large Eddy Simulation of Particulate Turbulent Channel Flows*.  
Thèse, Mécanik - FaxénLaboratoriet. *Cité page 111*
- [78] GALLOT LAVALLEE, S., NOH, D., JONES, W. P., NAVARRO-MARTINEZ, S., VERDIER,  
A., MARRERO SANTIAGO, J., CABOT, G. et RENOU, B. (2017). Experimental and numerical  
study of turbulent flame structures of a spray jet flame. *European Combustion Meeting*.  
*Cité page 177*
- [79] GAUTHIER, B., DAVIDSON, D. F. et HANSON, R. K. (2004). Shock tube determination  
of ignition delay times in full-blend and surrogate fuel mixtures. *Combustion and Flame*,  
139(4):300–311. *Cité page 113*
- [80] GERMANO, M., PIOMELLI, U., MOIN, P. et CABOT, W. H. (1991). A dynamic subgrid-  
scale eddy viscosity model. *Physics of Fluids A : Fluid Dynamics*, 3(7):1760–1765.  
*Cité page 54*

## BIBLIOGRAPHIE

---

- [81] GHASSEMI, H., BAEK, S. W. et KHAN, Q. S. (2006a). Experimental study on binary droplet evaporation at elevated pressures and temperatures. *Combustion science and technology*, 178(6):1031–1053. *Cité pages 138, 152, 153, 154, et 166*
- [82] GHASSEMI, H., BAEK, S. W. et KHAN, Q. S. (2006b). Experimental study on evaporation of kerosene droplets at elevated pressures and temperatures. *Combustion science and technology*, 178(9):1669–1684. *Cité pages 3, 5, 138, 144, 145, et 147*
- [83] GIANNAKOPOULOS, G. K., GATZOULIS, A., FROUZAKIS, C. E., MATALON, M. et TOMBOULIDES, A. G. (2015). Consistent definitions of "Flame Displacement Speed" and "Markstein Length" for premixed flame propagation. *Combustion and Flame*, 162(4):1249–1264. *Cité pages 81, 82, 83, et 85*
- [84] GICQUEL, O., DARABIHA, N. et THÉVENIN, D. (2000). Liminar premixed hydrogen/air counterflow flame simulations using flame prolongation of ILDM with differential diffusion. *Proceedings of the Combustion Institute*, 28(2):1901–1908. *Cité page 60*
- [85] GIOVANGIGLI, V. (1999). *Multicomponent Flow Modeling*. Modeling and Simulation in Science, Engineering and Technology. Birkhäuser Basel. *Cité page 38*
- [86] GIOVANGIGLI, V. (2012). Multicomponent flow modeling. *Science China Mathematics*, 55(2):285–308. *Cité pages 35 et 41*
- [87] GOODGER, E. M. (1975). *Hydrocarbon Fuels ; Production, Properties and Performance of Liquids and Gases*. John Wiley & Sons. *Cité page 145*
- [88] GOODWIN, D. G., MOFFAT, H. K. et SPETH, R. L. (2016). Cantera : An object-oriented software toolkit for chemical kinetics, thermodynamics, and transport processes. Version 2.2.1. *Cité page 93*
- [89] GRAHAM, W. R., HALL, C. A. et MORALES, M. V. (2014). The potential of future aircraft technology for noise and pollutant emissions reduction. *Transport Policy*, 34:36–51. *Cité page 23*
- [90] GROOT, G. et DE GOEY, L. (2002). A computational study on propagating spherical and cylindrical premixed flames. *Proceedings of the Combustion Institute*, 29:1445–1451. *Cité page 85*
- [91] GRUSELLE, C. (2014). *Etude du développement d'une flamme soumise à un gradient de concentration : Rôle de la stratification et des EGR*. Thèse de doctorat, INSA de Rouen. *Cité pages 40 et 41*
- [92] GUEDOT, L. (2015). *Development of numerical methods for the characterization of large scale structures in aeronautical swirl burners : application to multi-points injectors*. Thèse, INSA de Rouen. *Cité pages 106, 110, et 181*
- [93] HAKKA, M. H., GLAUDE, P.-A., HERBINET, O. et BATTIN-LECLERC, F. (2009). Experimental study of the oxidation of large surrogates for diesel and biodiesel fuels. *Combustion and Flame*, 156(11):2129–2144. *Cité page 115*

- [94] HIRSCHFELDER, J. O., CURTISS, C. F., BIRD, R. B. et MAYER, M. G. (1954). *Molecular theory of gases and liquids*, volume 26. Wiley New York. Cité pages 35, 38, et 92
- [95] HUBBARD, G., DENNY, V. et MILLS, A. (1975). Droplet evaporation : effects of transients and variable properties. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 18(9):1003–1008. Cité pages 120, 127, et 182
- [96] HUBER, M. L., LEMMON, E. W. et BRUNO, T. J. (2010). Surrogate mixture models for the thermophysical properties of aviation fuel jet-a. *Energy & Fuels*, 24(6):3565–3571. Cité pages 113 et 116
- [97] IM, H. G., LUND, T. S. et FERZIGER, J. H. (1997). Large eddy simulation of turbulent front propagation with dynamic subgrid models. *Physics of Fluids (1994-present)*. Cité page 84
- [98] INTERGOVERNMENTAL PANEL ON CLIMATE CHANGE (2013). Climate change : the ipcc scientific assessment. *The Physical Science Basis, WHO & UNEP*. Cité page 22
- [99] JARAVEL, T. (2016). *Prediction of pollutants in gas turbines using large eddy simulation*. Thèse de doctorat, INPT Toulouse. 2016INPT0039 : Thèse de doctorat dirigée par Cuenot, Bénédicte et Riber, Eleonore Energétique et Transferts Toulouse, INPT 2016. Cité pages 59 et 182
- [100] JAYACHANDRAN, J., LEFEBVRE, A., ZHAO, R., HALTER, F., VAREA, E., RENO, B. et EGOLFOPOULOS, F. N. (2015). A study of propagation of spherically expanding and counterflow laminar flames using direct measurements and numerical simulations. *Proceedings of the Combustion Institute*, 35(1):695–702. Cité pages 92 et 95
- [101] JAYACHANDRAN, J., ZHAO, R. et EGOLFOPOULOS, F. N. (2014). Determination of laminar flame speeds using stagnation and spherically expanding flames : Molecular transport and radiation effects. *Combustion and Flame*, 161(9):2305–2316. Cité pages 82, 83, et 92
- [102] JERZEMBECK, S., PETERS, N., PEPIOT-DESJARDINS, P. et PITSCH, H. (2009). Laminar burning velocities at high pressure for primary reference fuels and gasoline : Experimental and numerical investigation. *Combustion and Flame*, 156(2):292–301. Cité pages 93 et 182
- [103] JONES, W., LYRA, S. et NAVARRO-MARTINEZ, S. (2011). Large eddy simulation of a swirl stabilized spray flame. *Proceedings of the Combustion Institute*, 33(2):2153–2160. Cité page 135
- [104] KANG, D., KALASKAR, V., KIM, D., MARTZ, J., VIOLI, A. et BOEHMAN, A. (2016). Experimental study of autoignition characteristics of jet-a surrogates and their validation in a motored engine and a constant-volume combustion chamber. *Fuel*, 184:565–580. Cité page 116
- [105] KARYPIS, G. et KUMAR, V. (1995). METIS—unstructured graph partitioning and sparse matrix ordering system, version 2.0. Cité page 68
- [106] KAUFMANN, A. (2004). *Towards Eulerian-Eulerian Large Eddy Simulation of Reactive Two-Phase Flows*. Thèse, Institut National Polytechnique de Toulouse - INPT. Cité page 107

## BIBLIOGRAPHIE

---

- [107] KERSTEIN, A. R., ASHURST, W. T. et WILLIAMS, F. A. (1988). Field equation for interface propagation in an unsteady homogeneous flow field. *Phys. Rev. A*, 37:2728–2731. Cité page 84
- [108] KIM, D., MARTZ, J. et VIOLI, A. (2014). A surrogate for emulating the physical and chemical properties of conventional jet fuel. *Combustion and Flame*, 161(6):1489–1498. Cité page 116
- [109] KIM, J. et MOIN, P. (1985). Application of a fractional-step method to incompressible Navier-Stokes equations. *Journal of computational physics*, 59(2):308–323. Cité page 72
- [110] KLAINERMAN, S. et MAJDA, A. (1982). Compressible and incompressible fluids. *Communications on Pure and Applied Mathematics*, 35(5):629–651. Cité page 70
- [111] KOLERA-GOKULA, H. et ECHEKKI, T. (2006). Direct numerical simulation of premixed flame kernel–vortex interactions in hydrogen–air mixtures. *Combustion and Flame*, 146: 155–167. Cité pages 83 et 85
- [112] KOLMOGOROV, A. N. (1941). The local structure of turbulence in incompressible viscous fluid for very large reynolds numbers. In *Dokl. Akad. Nauk SSSR*, volume 30, pages 299–303. Cité page 46
- [113] KOUSOULIDOU, M. et LONZA, L. (2016). Biofuels in aviation : Fuel demand and CO2 emissions evolution in Europe toward 2030. *Transportation Research Part D : Transport and Environment*, 46:166 – 181. Cité page 26
- [114] KRAUSHAAR, M. (2011). Application of the compressible and low-Mach number approaches to Large-Eddy Simulation of turbulent flows in aero-engines. *Institut National Polytechnique de Toulouse-INPT*. Cité page 70
- [115] KUMAR, K., FREEH, J., SUNG, C. et HUANG, Y. (2007). Laminar flame speeds of preheated iso-octane/o<sub>2</sub>/n<sub>2</sub> and n-heptane/o<sub>2</sub>/n<sub>2</sub> mixtures. *Journal of propulsion and power*, 23(2):428–436. Cité page 182
- [116] KUO, K. (1986). *Principles of Combustion*. New York : John Wiley. Cité pages 35 et 118
- [117] KUO, K. K. (2005). *Principles of combustion*. TJ254. 5 K85 2005. John Wiley & Sons. Cité page 56
- [118] KUO, K. K.-y. et ACHARYA, R. (2012). *Fundamentals of turbulent and multiphase combustion*. John Wiley & Sons. Cité page 63
- [119] L. SHILLER, Z. N. (1935). *A drag coefficient correlation*, volume 77. Cité page 112
- [120] LARA-URBANEJA, P. et SIRIGNANO, W. (1981). Theory of transient multicomponent droplet vaporization in a convective field. In *Symposium (International) on Combustion*, volume 18, pages 1365–1374. Elsevier. Cité page 132
- [121] LAURENT, F. et MASSOT, M. (2001). Multi-fluid modelling of laminar polydisperse spray flames : origin, assumptions and comparison of sectional and sampling methods. *Combustion Theory and Modelling*, 5(4):537–572. Cité page 109

- [122] LEFEBVRE, A. (2016). *Theoretical, numerical and experimental analyses of the determination of the laminar burning velocity from spherically expanding flames*. Thèse de doctorat, INSA de Rouen. Cité page 204
- [123] LEFEBVRE, A., LARABI, H., MOUREAU, V., LARTIGUE, G., VAREA, E., MODICA, V. et RENOU, B. (2016). Formalism for spatially averaged consumption speed considering spherically expanding flame configuration. *Combustion and Flame*, 173:235–244. Cité page 79
- [124] LEMOINE, F. et CASTANET, G. (2013). Temperature and chemical composition of droplets by optical measurement techniques : a state-of-the-art review. *Experiments in fluids*, 54(7):1572. Cité page 176
- [125] LETTY, C., RENOU, B., REVEILLON, J., SAENGKAEW, S. et GRÉHAN, G. (2013). Experimental study of droplet temperature in a two-phase heptane/air v-flame. *Combustion and Flame*, 160(9):1803–1811. Cité page 176
- [126] LIANG, W., CHEN, Z., YANG, F. et ZHANG, H. (2013). Effects of soot diffusion on the laminar flame speed and markstein length of syngas/air mixtures. *Proceedings of the Combustion Institute*, 34(1):695–702. Cité page 92
- [127] LILLY, D. K. (1992). A proposed modification of the germano subgrid-scale closure method. *Physics of Fluids A : Fluid Dynamics*, 4(3):633–635. Cité page 54
- [128] LINDSTEDT, R. et MAURICE, L. (1995). Detailed kinetic modelling of n-heptane combustion. *Combustion Science and Technology*, 107(4-6):317–353. Cité page 115
- [129] LIU, S., HEWSON, J. C., CHEN, J. H. et PITSCH, H. (2004). Effects of strain rate on high-pressure nonpremixed n-heptane autoignition in counterflow. *Combustion and flame*, 137(3):320–339. Cité page 177
- [130] LU, T. et LAW, C. K. (2005). A directed relation graph method for mechanism reduction. *Proceedings of the Combustion Institute*, 30(1):1333–1341. Cité page 59
- [131] LU, T. et LAW, C. K. (2006). Linear time reduction of large kinetic mechanisms with directed relation graph : n-heptane and iso-octane. *Combustion and flame*, 144(1-2):24–36. Cité page 177
- [132] LUCHE, J. (2003). *Obtention de modèles cinétiques réduits de combustion - Application à un mécanisme du kérosène*. Thèse de doctorat, Université d'Orléans. Cité pages 59, 116, 145, et 146
- [133] MAAS, U. et POPE, S. B. (1992). Implementation of simplified chemical kinetics based on intrinsic low-dimensional manifolds. *In Symposium (International) on Combustion*, volume 24, pages 103–112. Elsevier. Cité page 60
- [134] MAHEU, N., MOUREAU, V. et DOMINGO, P. (2012). *In Large-eddy simulations of flow and heat transfer around a low-Mach number turbine blade*, page 12. Begellhouse. Cité page 45

## BIBLIOGRAPHIE

---

- [135] MAJDA, A. et SETHIAN, J. (1985). The derivation and numerical solution of the equations for zero mach number combustion. *Combustion science and technology*, 42(3-4):185–205. Cité page 74
- [136] MAJER, V., SVOBODA, V. et KEHIAIAN, H. V. (1985). *Enthalpies of vaporization of organic compounds : a critical review and data compilation*, volume 32. Blackwell Scientific Oxford. Cité page 141
- [137] MALANDAIN, M. (2013). *Simulation massivement parallèle des écoulements turbulents à faible nombre de Mach*. Thèse de doctorat, INSA de Rouen. Cité page 77
- [138] MALANDAIN, M., MAHEU, N. et MOUREAU, V. (2013). Optimization of the deflated conjugate gradient algorithm for the solving of elliptic equations on massively parallel machines. *Journal of Computational Physics*, 238(0):32–47. Cité pages 69 et 77
- [139] MARCHISIO, D. L., PIKTURNA, J. T., FOX, R. O., VIGIL, R. D. et BARRESI, A. A. (2003). Quadrature method of moments for population-balance equations. *AIChE Journal*, 49(5):1266–1276. Cité page 109
- [140] MARIÉS, A., HAQUE, A., YILMAZ, S. L., NIK, M. B. et MARAI, G. E. (2012). Interactive exploration of stress tensors used in computational turbulent combustion. In *New Developments in the Visualization and Processing of Tensor Fields*, pages 137–156. Springer. Cité page 49
- [141] MARTA, G. (2009). *Development and validation of the Euler-Lagrange formulation on a parallel and unstructured solver for large-eddy simulation*. Thèse, Institut National Polytechnique de Toulouse - INPT. Cité pages 107 et 110
- [142] MAWID, M., PARK, T., SEKAR, B. et ARANA, C. (2004). Importance of surrogate jp-8/jet-a fuel composition in detailed chemical kinetics development. In *40th AIAA/ASME/SAE/ASEE Joint Propulsion Conference and Exhibit*, page 4207. Cité page 116
- [143] MCGLADE, C. et EKINS, P. (2015). The geographical distribution of fossil fuels unused when limiting global warming to 2 C. *Nature*, 517(7533):187. Cité page 23
- [144] MEHL, M., CHEN, J.-Y., PITZ, W. J., SARATHY, S. M. et WESTBROOK, C. K. (2011). An approach for formulating surrogates for gasoline with application toward a reduced surrogate mechanism for cfd engine modeling. *Energy & Fuels*, 25(11):5215–5223. Cité page 113
- [145] MILLER, R., HARSTAD, K. et BELLAN, J. (1998). Evaluation of equilibrium and non-equilibrium evaporation models for many-droplet gas-liquid flow simulations. *International Journal of Multiphase Flow*, 24(6):1025–1055. Cité page 125
- [146] MOIN, P., SQUIRES, K., CABOT, W. et LEE, S. (1991). A dynamic subgrid-scale model for compressible turbulence and scalar transport. *Physics of Fluids A : Fluid Dynamics*, 3(11):2746–2757. Cité page 51
- [147] MONCHICK, L. et MASON, E. (1961). Transport properties of polar gases. *The Journal of Chemical Physics*, 35(5):1676–1697. Cité page 40

- [148] MORIN, C., CHAUVEAU, C. et GÖKALP, I. (2000). Droplet vaporisation characteristics of vegetable oil derived biofuels at high temperatures. *Experimental Thermal and Fluid Science*, 21(1-3):41–50. Cité page 147
- [149] MOSSA, J.-B. (2005). *Extension polydisperse pour la description Euler-Euler des écoulements diphasiques réactifs*. Thèse, Institut National Polytechnique de Toulouse-INPT. Cité pages 107, 108, et 109
- [150] MOUREAU, V., DOMINGO, P. et VERVISCH, L. (2011a). Design of a massively parallel cfd code for complex geometries. *Comptes Rendus Mécanique*, 339(2-3):141–148. Cité page 45
- [151] MOUREAU, V., DOMINGO, P. et VERVISCH, L. (2011b). From large-eddy simulation to direct numerical simulation of a lean premixed swirl flame : Filtered laminar flame-pdf modeling. *Combustion and Flame*, 158(7):1340 – 1357. Cité page 69
- [152] MUELLER, C. J., CANNELLA, W. J., BAYS, J. T., BRUNO, T. J., DEFABIO, K., DETTMAN, H. D., GIELECIAK, R. M., HUBER, M. L., KWEON, C.-B., MCCONNELL, S. S. *et al.* (2016). Diesel surrogate fuels for engine testing and chemical-kinetic modeling : Compositions and properties. *Energy & Fuels*, 30(2):1445–1461. Cité page 116
- [153] MUELLER, C. J., CANNELLA, W. J., BRUNO, T. J., BUNTING, B., DETTMAN, H. D., FRANZ, J. A., HUBER, M. L., NATARAJAN, M., PITZ, W. J., RATCLIFF, M. A. *et al.* (2012). Methodology for formulating diesel surrogate fuels with accurate compositional, ignition-quality, and volatility characteristics. *Energy & Fuels*, 26(6):3284–3303. Cité page 116
- [154] NAKAMURA, M., AKAMATSU, F., KUROSE, R. et KATSUKI, M. (2005). Combustion mechanism of liquid fuel spray in a gaseous flame. *Physics of Fluids*, 17(12):123301. Cité page 198
- [155] NICOLAIDES, R. A. (1987). Deflation of conjugate gradients with applications to boundary value problems. *SIAM Journal on Numerical Analysis*, 24(2):355–365. Cité page 78
- [156] NIGAM, P. S. et SINGH, A. (2011). Production of liquid biofuels from renewable resources. *Progress in energy and combustion science*, 37(1):52–68. Cité page 25
- [157] NJE NJE, C. (2000). *Etude numerique de l'évaporation instationnaire d'un nuage de gouttes multicomposants*. Thèse de doctorat, Université de Rouen, Rouen. Cité pages 118, 119, et 130
- [158] NOMURA, H., UJIIE, Y., RATH, H. J., SATO, J. et KONO, M. (1996). Experimental study on high-pressure droplet evaporation using microgravity conditions. *Symposium (International) on Combustion*, 26(1):1267–1273. Cité pages 3, 5, 138, 139, 140, et 143
- [159] NOVELLI, P. (2012). Swafea : A european study on the feasibility and impact of the introduction of alternative fuels in aviation. *Innovation for Sustainable Aviation in a Global Environment : Proceedings of the Sixth European Aeronautics Days, Madrid, 30 March-1 April, 2011*, page 129. Cité page 26

## BIBLIOGRAPHIE

---

- [160] OIJEN, J. v. et GOEY, L. D. (2000). Modelling of premixed laminar flames using flamelet-generated manifolds. *Combustion Science and Technology*, 161(1):113–137. Cité page 60
- [161] OKONGO’O, N. A. et BELLAN, J. (2004). Consistent large-eddy simulation of a temporal mixing layer laden with evaporating drops. part 1. direct numerical simulation, formulation and a priori analysis. *Journal of Fluid Mechanics*, 499:1–47. Cité page 135
- [162] OKONG’O, N. et BELLAN, J. (2000). A priori subgrid analysis of temporal mixing layers with evaporating droplets. *Physics of Fluids*, 12(6):1573–1591. Cité page 135
- [163] O’ROURKE, P. et BRACCO, F. (1979). Two scaling transformations for the numerical computation of multidimensional unsteady laminar flames. *Journal of Computational Physics*, 33(2):185–203. Cité page 53
- [164] OUTCALT, S. L., LAESECKE, A. et BRUMBACK, K. J. (2009). Thermophysical Properties Measurements of Rocket Propellants RP-1 and RP-2. *Journal of Propulsion and Power*, 25(5):1032–1040. Cité page 113
- [165] PASSALACQUA, A. et FOX, R. (2009). Multiphase cfd for gas-particle flows : Beyond the two-fluid model. In *Seventh International Conference on CFD in the Minerals and Process Industries*, CSIRO, Melbourne, Australia. Cité page 107
- [166] PAULHIAC, D. (2015). *Modélisation de la combustion d’un spray dans un brûleur aéronautique*. Thèse de doctorat, INP Toulouse. Cité page 110
- [167] PAYRI, R., SALVADOR, F. J., GIMENO, J. et PERAZA, J. E. (2016). Experimental study of the injection conditions influence over n-dodecane and diesel sprays with two ecn single-hole nozzles. part ii : Reactive atmosphere. *Energy conversion and management*, 126:1157–1167. Cité page 115
- [168] PAYRI, R., VIERA, J. P., GOPALAKRISHNAN, V. et SZYMKOWICZ, P. G. (2017). The effect of nozzle geometry over the evaporative spray formation for three different fuels. *Fuel*, 188:645 – 660. Cité page 115
- [169] PEPIOT, P. (2008). *Automatic strategies to model transportation fuel surrogates*. Thèse de doctorat, Stanford University. Cité pages 3, 5, 59, et 182
- [170] PEPIOT-DESJARDINS, P. et PITSCH, H. (2008). An efficient error-propagation-based reduction method for large chemical kinetic mechanisms. *Combustion and Flame*, 154(1-2):67–81. Cité page 59
- [171] PETERS, N. (1985). Numerical and asymptotic analysis of systematically reduced reaction schemes for hydrocarbon flames. In *Numerical simulation of combustion phenomena*, pages 90–109. Springer. Cité page 59
- [172] PETERS, N. (2000). *Turbulent Combustion*. Cambridge University Press. Cité pages 64 et 81
- [173] PETERS, N. et ROGG, B. (1993). *Reduced kinetic mechanisms for applications in combustion systems*, volume 15. Springer Science & Business Media. Cité page 59

- [174] PITSCH, H. (2005). A consistent level set formulation for large-eddy simulation of premixed turbulent combustion. *Combustion and Flame*, 143(4):587–598. Cité page 53
- [175] PITZ, W., WESTBROOK, C., HERBINET, O. et SILKE, E. (2008). Progress in chemical kinetic modeling for surrogate fuels. *7th International Conference on Modeling and Diagnostics for Advanced Engine Systems*. COMODIA 2008, Sapporo, Japan : Pages 9–15;. Cité pages 113, 114, et 115
- [176] PITZ, W. J. et MUELLER, C. J. (2011). Recent progress in the development of diesel surrogate fuels. *Progress in Energy and Combustion Science*, 37(3):330–350. Cité pages 115 et 116
- [177] POINSOT, T., ECHEKKI, T. et MUNGAL, M. (1992). A study of the laminar flame tip and implications for premixed turbulent combustion. *Combustion science and technology*, 81(1-3):45–73. Cité page 39
- [178] POINSOT, T. et VEYNANTE, D. (2012). *Theoretical and numerical combustion*. RT Edwards, Inc. Cité pages 34, 37, 38, 43, 56, 61, 62, 63, 81, 83, et 92
- [179] POPE, S. (1997). Computationally efficient implementation of combustion chemistry using in situ adaptive tabulation. *Combustion Theory and Modelling*, 1(1):41–63. Cité page 60
- [180] POPP, P. et BAUM, M. (1997). Analysis of wall heat fluxes, reaction mechanisms, and unburnt hydrocarbons during the head-on quenching of a laminar methane flame. *Combustion and Flame*, 108(3):327–348. Cité page 39
- [181] QUILLATRE, P., VERMOREL, O., POINSOT, T. et RICOUX, P. (2013). Large eddy simulation of vented deflagration. *Industrial & Engineering Chemistry Research*, 52(33):11414–11423. Cité page 84
- [182] RA, Y. et REITZ, R. D. (2009). A vaporization model for discrete multi-component fuel sprays. *International Journal of Multiphase Flow*, 35(2):101–117. Cité page 113
- [183] RA, Y., REITZ, R. D., MCFARLANE, J. et DAW, C. S. (2009). Effects of fuel physical properties on diesel engine combustion using diesel and bio-diesel fuels. *SAE International Journal of Fuels and Lubricants*, 1(1):703–718. Cité page 115
- [184] RANZ, W. et MARSHALL, W. (1952). Evaporation from drops. *Chemical Engineering Progress*, 48(3):141446. Cité pages 125 et 128
- [185] RANZI, E., FRASSOLDATI, A., STAGNI, A., PELUCCHI, M., CUOCI, A. et FARAVELLI, T. (2014). Reduced kinetic schemes of complex reaction systems : Fossil and biomass-derived transportation fuels. *International Journal of Chemical Kinetics*, 46(9):512–542. Cité page 177
- [186] REID, R. C., PRAUSNITZ, J. M. et POLING, B. E. (1987). The properties of liquids and gases. *McGraw-Hill, New York*. Cité pages 121 et 122

## BIBLIOGRAPHIE

---

- [187] REVEILLON, J. et DEMOULIN, F.-X. (2007). Effects of the preferential segregation of droplets on evaporation and turbulent mixing. *Journal of Fluid Mechanics*, 583:273–302. Cité page 135
- [188] REYNOLDS, O. (1883). An Experimental Investigation of the Circumstances Which Determine Whether the Motion of Water Shall Be Direct or Sinuous, and of the Law of Resistance in Parallel Channels. *Philosophical Transactions of the Royal Society of London*, 17:935–982. Cité page 45
- [189] RIBER, E., MOUREAU, V., GARCÍA, M., POINSOT, T. et SIMONIN, O. (2009). Evaluation of numerical strategies for large eddy simulation of particulate two-phase recirculating flows. *Journal of Computational Physics*, 228(2):539–564. Cité page 110
- [190] RICHARDSON, L. F. (2007). *Weather prediction by numerical process*. Cambridge University Press, 2nd édition. Cité page 46
- [191] RIVARA, M.-C. (1984). Mesh refinement processes based on the generalized bisection of simplices. *SIAM Journal on Numerical Analysis*, 21(3):604–613. Cité page 181
- [192] SADIKI, A., CHRIGUI, M., JANICKA, J. et MANESHKARIMI, M. (2005). Modeling and simulation of effects of turbulence on vaporization, mixing and combustion of liquid-fuel sprays. *Flow, Turbulence and Combustion*, 75(1-4):105–130. Cité page 135
- [193] SAENGAEW, S., BODOC, V., LAVERGNE, G. et GREHAN, G. (2013). Application of global rainbow technique in sprays with a dependence of the refractive index on droplet size. *Optics Communications*, 286:295–303. Cité pages 176 et 195
- [194] SAFFARIPOUR, M., VESHKINI, A., KHOLGHY, M. et THOMSON, M. J. (2014). Experimental investigation and detailed modeling of soot aggregate formation and size distribution in laminar coflow diffusion flames of jet a-1, a synthetic kerosene, and n-decane. *Combustion and Flame*, 161(3):848 – 863. Special Issue on Alternative Fuels. Cité page 116
- [195] SAFFMAN, P. G. (1992). *Vortex dynamics*. Cambridge university press. Cité page 49
- [196] SAMIMI ABIANEH, O., CHEN, C. et CERRO, R. L. (2012). Batch distillation : The forward and inverse problems. *Industrial & Engineering Chemistry Research*, 51(38):12435–12448. Cité page 113
- [197] SANJOSÉ, M. (2009). *Evaluation de La Méthode Euler-Euler Pour La Simulation Aux Grandes Échelles Des Chambres à Carburant Liquide*. Thèse, Institut National Polytechnique de Toulouse - INPT. Cité pages 107, 146, et 149
- [198] SANTIAGO, J. M., VERDIER, A., GODARD, G., VANDEL, A., CABOT, G., BOUKHALFA, M. et RENOU, B. (2016). Experimental study of laser ignition probability, kernel propagation and air and fuel droplet properties in a confined swirled jet-spray burner. In *18th International Symposium on the Application of Laser and Imaging Techniques to Fluid Mechanics*, page 84. Cité page 174
- [199] SAZHIN, S. S. (2006). Advanced models of fuel droplet heating and evaporation. *Progress in energy and combustion science*, 32(2):162–214. Cité pages 117 et 118

- [200] SAZHIN, S. S. (2017). Modelling of fuel droplet heating and evaporation : Recent results and unsolved problems. *Fuel*, 196:69–101. *Cité page 118*
- [201] SAZHIN, S. S., ELWARDANY, A., KRUTITSKII, P., CASTANET, G., LEMOINE, F., SAZHINA, E. et HEIKAL, M. (2010). A simplified model for bi-component droplet heating and evaporation. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 53(21-22):4495–4505. *Cité page 113*
- [202] SCHULZ, W. (1992). Oxidation products of a surrogate jp-8 fuel. *Preprints-American Chemical Society. Division of Petroleum Chemistry*, 37(2):383–392. *Cité page 116*
- [203] SENONER, J., SANJOSÉ, M., LEDERLIN, T., JAEGLE, F., GARCÍA, M., RIBER, E., CUENOT, B., GICQUEL, L., PITSCH, H. et POINSOT, T. (2009). Eulerian and lagrangian large-eddy simulations of an evaporating two-phase flow. *Comptes Rendus Mécanique*, 337(6):458. *Cité page 110*
- [204] SHUM-KIVAN, F. (2017). *Simulation des Grandes Echelles de flammes de spray et modélisation de la combustion non-prémélangée*. Thèse de doctorat, INPT Toulouse. Thèse de doctorat dirigée par Cuenot, Bénédicte et Riber, Eleonore Dynamique des fluides Toulouse, INPT 2017. *Cité pages 178 et 182*
- [205] SHUM-KIVAN, F., SANTIAGO, J. M., VERDIER, A., RIBER, E., RENOU, B., CABOT, G. et CUENOT, B. (2017). Experimental and numerical analysis of a turbulent spray flame structure. *Proceedings of the Combustion Institute*, 36(2):2567 – 2575. *Cité pages 3, 5, 174, 177, 178, et 182*
- [206] SIERRA SÁNCHEZ, P. (2012). *Modeling the Dispersion and Evaporation of Spray in Aeronautical Combustion Chamber*. Thèse, Institut National Polytechnique de Toulouse-INPT. *Cité pages 109 et 135*
- [207] SIRIGNANO, W. A. (2010). *Fluid dynamics and transport of droplets and sprays*. Cambridge University Press. *Cité pages 118, 119, et 131*
- [208] SMAGORINSKY, J. (1963). General circulation experiments with the primitive equations : I. the basic experiment. *Monthly weather review*, 91(3):99–164. *Cité page 54*
- [209] SMITH, G., GOLDEN, D., FRENKLACH, M., MORIARTY, N., EITENEER, B., GOLDENBERG, M., BOWMAN, C., HANSON, R., SONG, S., JR., W. G., LISIANSKI, V. et QIN, Z. (1999, Gas Research Institute). *GRI-Mech Homepage*, [http://www.me.berkeley.edu/gri\\_mech/](http://www.me.berkeley.edu/gri_mech/). *Cité pages 58 et 93*
- [210] SPALDING, D. B. (1953). The combustion of liquid fuels. *In Symposium (international) on combustion*, volume 4, pages 847–864. Elsevier. *Cité page 106*
- [211] SUBRAMANIAN, V., DOMINGO, P. et VERVISCH, L. (2010). Large eddy simulation of forced ignition of an annular bluff-body burner. *Combustion and Flame*, 157:579–601. *Cité page 84*
- [212] SUTHERLAND, W. (1893). Lii. the viscosity of gases and molecular force. *The London, Edinburgh, and Dublin Philosophical Magazine and Journal of Science*, 36(223):507–531. *Cité page 42*

## BIBLIOGRAPHIE

---

- [213] TAO, F., REITZ, R. D. et FOSTER, D. E. (2007). Revisit of diesel reference fuel (n-heptane) mechanism applied to multidimensional diesel ignition and combustion simulations. In *Seventeenth International Multidimensional Engine Modeling User's Group Meeting at the SAE Congress*. Cité page 115
- [214] TCHEN, C. M. (1947). *Mean Value and Correlation Problems Connected with the Motion of Small Particles Suspended in a Turbulent Fluid*. Martinus Nijhoff, The Hague. Cité page 110
- [215] TIEN, J. et MATALON, M. (1991). On the burning velocity of stretched flames. *Combustion and Flame*, 84:238–248. Cité page 84
- [216] TONG, A. Y. et SIRIGNANO, W. A. (1986). Multicomponent transient droplet vaporization with internal circulation : integral equation formulation and approximate solution. *Numerical Heat Transfer, Part A : Applications*, 10(3):253–278. Cité page 126
- [217] TROUVE, A. et POINSOT, T. (1994). Evolution equation for the flame surface density in turbulent premixed combustion. *Journal of Fluid Mechanics*, 278:1–31. Cité pages 83 et 85
- [218] VANHOVE, G., PETIT, G. et MINETTI, R. (2006). Experimental study of the kinetic interactions in the low-temperature autoignition of hydrocarbon binary mixtures and a surrogate fuel. *Combustion and Flame*, 145(3):521–532. Cité page 113
- [219] VANTIEGHEM, S. (2011). Numerical simulations of quasi-static magnetohydrodynamics using an unstructured finite-volume solver : development and applications. *Université Libre de Bruxelles*. Cité page 71
- [220] VAREA, E., BEECKMANN, J., PITSCH, H., CHEN, Z. et RENOU, B. (2015). Determination of burning velocities from spherically expanding h<sub>2</sub>/air flames. *Proceedings of the Combustion Institute*, 35(1):711–719. Cité pages 92, 93, et 95
- [221] VAREA, E., LARABI, H., LEFEBVRE, A., MODICA, V., LARTIGUE, G., MOUREAU, V. et RENOU, B. (2018). Determination of spatially averaged consumption speed from spherical expanding flame. a new experimental methodology. In *37th International Symposium on Combustion*. Cité page 204
- [222] VAREA, E., MODICA, V., VANDEL, A. et RENOU, B. (2012). Measurement of laminar burning velocity and markstein length relative to fresh gases using a new postprocessing procedure : Application to laminar spherical flames for methane, ethanol and iso-octane/air mixtures. *Combustion and Flame*, 159:577–590. Cité pages 82, 93, 95, et 98
- [223] VERDIER, A. (2017). *Experimental Study of Dilute Spray Combustion*. Thèse de doctorat, Normandie Université. Cité pages 175, 198, et 200
- [224] VERDIER, A., RENOU, B., VANDEL, A., SAENGKAEW, S., CABOT, G., GRÉHAN, G. et BOUKHALFA, M. (2015). Experimental characterization of fuel droplet temperature in a spray jet flame. page 6. Cité page 174

- [225] VERDIER, A., SANTIAGO, J. M., VANDEL, A., SAENKAEW, S., CABOT, G., GREHAN, G. et RENOU, B. (2017). Experimental study of local flame structures and fuel droplet properties of a spray jet flame. *Proceedings of the Combustion Institute*, 36(2):2595 – 2602. Cité pages 3, 5, 174, et 176
- [226] VERVISCH, L. et VEYNANTE, D. (2000). Interlinks between approaches for modeling turbulent flames. *Proceedings of the Combustion Institute*, 28(1):175–183. Cité pages 53 et 83
- [227] VEYNANTE, D. et VERVISCH, L. (2002). Turbulent combustion modeling. *Progress in energy and combustion science*, 28(3):193–266. Cité page 53
- [228] VIOLI, A., YAN, S., EDDINGS, E., SAROFIM, A., GRANATA, S., FARAVELLI, T. et RANZI, E. (2002). Experimental formulation and kinetic model for jp-8 surrogate mixtures. *Combustion Science and Technology*, 174(11-12):399–417. Cité page 116
- [229] VIÉ, A. (2010). *Simulation Aux Grandes Échelles d'écoulements Diphasiques Turbulents à Phase Liquide Dispersée*. Thèse, Institut National Polytechnique de Toulouse-INPT. Cité page 109
- [230] WANG, B. (2010). Inter-phase interaction in a turbulent, vertical channel flow laden with heavy particles. part i : Numerical methods and particle dispersion properties. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 53(11-12):2506–2521. Cité page 135
- [231] WANG, G., BOILEAU, M. et VEYNANTE, D. (2011). Implementation of a dynamic thickened flame model for large eddy simulations of turbulent premixed combustion. *Combustion and Flame*, 158(11):2199–2213. Cité page 41
- [232] WARNATZ, J., MAAS, U. et DIBBLE, R. W. (2001). *Verbrennung : physikalisch-chemische Grundlagen, Modellierung und Simulation, Experimente, Schadstoffentstehung ; mit 17 Tabellen*. Springer. Cité page 57
- [233] WARNATZ, J., MAAS, U., DIBBLE, R. W. et WARNATZ, J. (1996). *Combustion*, volume 3. Springer. Cité page 40
- [234] WESTBROOK, C. K., PITZ, W. J., HERBINET, O., CURRAN, H. J. et SILKE, E. J. (2009). A comprehensive detailed chemical kinetic reaction mechanism for combustion of n-alkane hydrocarbons from n-octane to n-hexadecane. *Combustion and flame*, 156(1):181–199. Cité page 115
- [235] WILLIAMS, F. (1985a). *Combustion Theory*. Addison-Wesley, 2nd édition. Cité page 37
- [236] WILLIAMS, F. (1985b). Turbulent combustion. In *The mathematics of combustion*, pages 97–131. SIAM. Cité pages 35 et 56
- [237] WU, F., LIANG, W., CHEN, Z., JU, Y. et LAW, C. K. (2015). Uncertainty in stretch extrapolation of laminar flame speed from expanding spherical flames. *Proceedings of the Combustion Institute*, 35(1):663 – 670. Cité page 95

## BIBLIOGRAPHIE

---

- [238] XIOURIS, C., YE, T., JAYACHANDRAN, J. et EGOLFOPOULOS, F. N. (2016). Laminar flame speeds under engine-relevant conditions : Uncertainty quantification and minimization in spherically expanding flame experiments. *Combustion and Flame*, 163:270–283. *Cité pages 92 et 96*
- [239] YAMASHITA, H., SHIMADA, M. et TAKENO, T. (1996). A numerical study on flame stability at the transition point of jet diffusion flames. *In Symposium (International) on Combustion*, volume 26, pages 27–34. Elsevier. *Cité page 64*
- [240] YANG, B. et POPE, S. (1998). Treating chemistry in combustion with detailed mechanisms—in situ adaptive tabulation in principal directions—premixed combustion. *Combustion and Flame*, 112(1-2):85–112. *Cité page 60*
- [241] YANG, J.-R. et WONG, S.-C. (2002). An experimental and theoretical study of the effects of heat conduction through the support fiber on the evaporation of a droplet in a weakly convective flow. *International journal of heat and mass transfer*, 45(23):4589–4598. *Cité pages 140 et 141*
- [242] YAWS, C. L. et GABBULA, C. (2003). *Yaws" Handbook of Thermodynamic and Physical Properties of Chemical Compounds*. Knovel. *Cité pages 141, 145, et 146*
- [243] YU, H., HAN, W., SANTNER, J., GOU, X., SOHN, C. H., JU, Y. et CHEN, Z. (2014). Radiation-induced uncertainty in laminar flame speed measured from propagating spherical flames. *Combustion and Flame*, 161(11):2815–2824. *Cité page 91*
- [244] YU, R., YU, J. et BAI, X. (2012). An improved high-order scheme for DNS of low Mach number turbulent reacting flows based on stiff chemistry solver. *Journal of Computational Physics*, 231(16):5504–5521. *Cité page 92*
- [245] YUEN, M. C. et CHEN, L. W. (1976). On drag of evaporating liquid droplets. *Combustion Science and Technology*, 14(4-6):147–154. *Cité pages 120 et 127*
- [246] YUU, S., UENO, T. et UMEKAGE, T. (2001). Numerical simulation of the high reynolds number slit nozzle gas–particle jet using subgrid-scale coupling large eddy simulation. *Chemical Engineering Science*, 56(14):4293–4307. *Cité page 135*
- [247] ZHU, G.-S. et REITZ, R. D. (2002). A model for high-pressure vaporization of droplets of complex liquid mixtures using continuous thermodynamics. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 45(3):495–507. *Cité page 113*