



HAL
open science

Simulation des Grandes Echelles de flammes de spray et modélisation de la combustion non-prémélangée

Francis Shum-Kivan

► **To cite this version:**

Francis Shum-Kivan. Simulation des Grandes Echelles de flammes de spray et modélisation de la combustion non-prémélangée. Autre [cond-mat.other]. Institut National Polytechnique de Toulouse - INPT, 2017. Français. NNT: 2017INPT0050 . tel-04222901

HAL Id: tel-04222901

<https://theses.hal.science/tel-04222901>

Submitted on 29 Sep 2023

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.



Université
de Toulouse

THÈSE

En vue de l'obtention du

DOCTORAT DE L'UNIVERSITÉ DE TOULOUSE

Délivré par :

Institut National Polytechnique de Toulouse (INP Toulouse)

Discipline ou spécialité :

Dynamique des fluides

Présentée et soutenue par :

M. FRANCIS SHUM-KIVAN

le jeudi 15 juin 2017

Titre :

Simulation des Grandes Echelles de flammes de spray et modélisation de
la combustion non-prémélangée

Ecole doctorale :

Mécanique, Energétique, Génie civil, Procédés (MEGeP)

Unité de recherche :

Centre Européen de Recherche et Formation Avancées en Calcul Scientifique (CERFACS)

Directeur(s) de Thèse :

MME BENEDICTE CUENOT

MME ELEONORE RIBER

Rapporteurs :

M. DENIS VEYNANTE, ECOLE CENTRALE PARIS

M. STÉPHANE JAY, IFPEN

Membre(s) du jury :

M. FABIEN HALTER, UNIVERSITE D'ORLEANS, Président

M. BRUNO RENOUE, INSA ROUEN, Membre

Mme BENEDICTE CUENOT, CERFACS, Membre

Mme ELEONORE RIBER, CERFACS, Membre

ABSTRACT

The combustion of hydrocarbons still represents a major part of the worldwide production of energy, especially in the aeronautical industry. Most industrial burners are fed with liquid fuel that is directly injected in the combustion chamber, generating a strong interaction between the spray, the turbulent flow and the flame. In order to provide a better understanding of turbulent spray flame complex structures, a numerical study has been performed on the two-phase flow burner KIAI which has been experimentally fully characterized. Numerical simulations consist of Large Eddy Simulation coupled to Discrete Particle Simulation for the dispersed phase (LES-DPS). A detailed analysis of the flame structure shows that non-premixed combustion plays an important role in this type of spray flame. This motivates, in a second step of the present work, the development of a new approach to model turbulent diffusion flames. The model is based on the response to the mesh, strain rate and wrinkling. The global flame heat release is analyzed through configurations of increasing complexity and the capacity of the model to describe it is evaluated.

RÉSUMÉ

La combustion d'hydrocarbures représente encore aujourd'hui une part très majoritaire de la production d'énergie dans le monde, et en particulier dans l'industrie aéronautique. La plupart des brûleurs industriels sont alimentés par un carburant sous forme liquide, injecté directement dans la chambre de combustion, générant ainsi de fortes interactions entre le spray, l'écoulement turbulent et la flamme. Dans le but d'acquérir une meilleure compréhension de la structure complexe des flammes de spray, une étude numérique a été réalisée sur la configuration du brûleur diphasique KIAI, caractérisée de façon précise et complète expérimentalement. Une approche de type simulation des grandes échelles a été utilisée pour simuler la phase gazeuse tandis que la phase liquide était résolue selon un formalisme Lagrangien déterministe (LES-DPS). L'analyse détaillée de la structure de flamme de spray permet de mettre en exergue le rôle important de la combustion non prémélangée dans ce type de flamme. Cela a motivé dans une seconde étape le développement d'une nouvelle approche pour modéliser les flammes de diffusion turbulentes. Le modèle présenté s'appuie sur la réponse des flammes de diffusion laminaires au maillage, à l'étirement et au plissement. Le dégagement de chaleur global de la flamme a été analysé dans des configurations de complexité croissante, et la capacité du modèle à le décrire a été évaluée.

*"Le succès, c'est se promener d'échecs en échecs tout en restant motivé."
(Winston Churchill)*

Remerciements

Je voudrais tout d'abord remercier les membres du jury : D. Veynante, S. Jay, F. Halter, B. Renou et A. Cayre pour avoir pris de leur temps afin d'évaluer le contenu du manuscrit et d'avoir assisté à la soutenance ouvrant ainsi de nombreuses perspectives et valorisations du travail. Je souhaite par la même occasion remercier la team Expé. du CORIA et notamment Antoine et Javier avec qui j'ai pris beaucoup de plaisir à travailler.

Ce travail n'aurait pas été possible sans mes deux encadrantes, Bénédicte et Elé, et leurs précieux conseils aussi bien au niveau scientifique, que de la rédaction et des présentations. Leur expérience ainsi que leur vision globale ont été des éléments essentiels au succès de ces trois années. Elles m'ont également soutenu et encouragé moralement dans les grands moments de stress précédant les conférences auxquelles je devais participer.

J'aimerais remercier toutes les personnes que j'ai côtoyé au CERFACS et avec qui j'ai pu échanger durant ces trois années. Je pense notamment à tous les seniors qui font le maximum pour se rendre disponible, tous les collègues thésards et post-docs qui animent le laboratoire au quotidien (Franchine, Thomas G., César, Félix, Lucien, Majd, Luc, Laura, Omar, Pierre, Dario, Mélissa, Anne, Nico, Lucas) ainsi que les anciens qui m'ont beaucoup aidé (JarJar, Damien, Greg, Laure). Un remerciement particulier à mon co-bureau Luis avec qui j'ai débuté au CERFACS en stage, toujours de bon conseil, et avec qui j'ai aimé partager des discussions très enrichissantes aussi bien scientifiquement qu'humainement.

Je n'oublie pas l'équipe CSG (Fabrice, Gérard, Isabelle) ainsi que l'équipe Administration (Nicole, Marie, Chantal, Michèle) qui font un travail remarquable et toujours avec le sourire pour nous permettre de travailler dans les meilleures conditions.

Pour terminer, je remercie ma famille pour le soutien qu'elle m'apporte depuis toujours et ce, de façon inconditionnelle. Un énorme merci à ma chérie Alicia qui a traversé ces trois années avec moi, dont de nombreuses soirées et weekends passés à trois, elle, moi et... mon mac :)! Elle a partagé avec moi les moments de joie comme de doute au quotidien et m'a toujours soutenu.

Table des matières

PARTIE I CONTEXTE DE L'ÉTUDE

Chapitre 1 : Introduction générale

1.1 Contexte industriel et environnemental	11
1.2 Phénoménologie des flammes de spray	17
1.3 La recherche en combustion diphasique	33
1.4 Objectifs et plan du manuscrit	41

PARTIE II ÉQUATIONS ET MODÈLES POUR LES ÉCOULEMENTS TURBULENTS DIPHASIQUES RÉACTIFS POUR LA LES

Chapitre 2 : Equations et modèles pour la phase gazeuse

2.1 Equations de conservation	45
2.2 Loi d'état et propriétés de transport	48
2.3 Cinétique chimique	50
2.4 Le concept de la LES	51
2.5 Equations de conservation pour la LES	55
2.6 Termes non fermés.	58
2.7 Modèles de sous-maille.	59
2.8 Modèles de combustion	61

Chapitre 3 : Equations et modèles pour la phase dispersée

3.1 Hypothèses de modélisation	69
3.2 Equations pour la phase liquide	70
3.3 Modèles macroscopiques pour la phase liquide	71
3.4 Couplage avec la phase gazeuse	79

PARTIE III LES DU MONO-BRÛLEUR DIPHASIQUE KIAI

Chapitre 4 : Configuration non swirlée et non confinée

4.1 Présentation du banc expérimental KIAI	84
4.2 Méthode numérique	87
4.3 Structure et validation de l'écoulement diphasique non réactif	93
4.4 Validation de l'écoulement diphasique réactif	97
4.5 Analyse de la structure de flamme	102
4.6 Influence du modèle d'évaporation	114
4.7 Influence de la cinétique chimique	117
4.8 Conclusion	122

Chapitre 5 : Configuration swirlée et confinée

5.1 Présentation de la configuration expérimentale	125
5.2 Méthode numérique	126
5.3 Topologie et validation de l'écoulement diphasique non réactif	127
5.4 Validation de l'écoulement diphasique réactif	131
5.5 Analyse de la structure de flamme	131
5.6 Conclusion et perspectives	137

PARTIE IV THÉORIE ET MODÉLISATION DE LA COMBUSTION NON PRÉMÉLANGÉE

Chapitre 6 : Théorie et bases de la combustion non prémélangée

6.1 Structure d'une flamme de diffusion laminaire stationnaire étirée	148
6.2 Quantités d'intérêt pour l'analyse des flammes de diffusion	155
6.3 Illustration en combustion méthane-air	158
6.4 Effets de la turbulence sur la flamme de diffusion et modélisations existantes	160

6.5	Conclusion	164
Chapitre 7 : Développement d'une approche TFLES en diffusion		
7.1	Objectif du modèle	166
7.2	Effet d'un maillage sous-résolu sur la structure de flamme	167
7.3	Effet de la turbulence sur l'étirement	175
7.4	Effet de la turbulence sur le plissement	175
7.5	Récapitulatif de la méthodologie	176
7.6	Détermination d'un senseur de flamme	176
7.7	Application à une flamme de diffusion dans une Turbulence Homogène Isotrope (THI)	178
7.8	Application à la flamme Sandia D	188
7.9	Conclusion	194
Chapitre 8 : Conclusions et perspectives		

Liste de symboles

Caractères romains

Symbole	Description	Unité
C_p	Capacité calorifique à pression constante	$[J/(kgK)]$
d_l	Diamètre des gouttes	[m]
D_k	Coefficient de diffusion de l'espèce k	[-]
\mathcal{E}	Fonction d'efficacité	[-]
$F_{p,i}$	Force de traînée d'une particule lagrangienne	[N]
\mathcal{F}	Facteur d'épaississement	[-]
h_s	Enthalpie sensible	[J/kg]
HRR	Taux de dégagement de chaleur (Heat Release Rate)	$[W/m^3]$
$J_{j,k}$	Flux diffusifs d'espèces k	$[kg/m^2/s]$
L_v	Chaleur latente d'évaporation	[J/kg]
m_p	Masse des particules lagrangiennes	[kg]
P	Pression	[Pa]
T	Température	[K]
T_p	Température des particules lagrangiennes	[K]
u_i	Vecteur vitesse du gaz	[m/s]
$u_{p,i}$	Vecteur vitesse des particules lagrangiennes	[m/s]
W	Masse moléculaire	[kg/mol]
x_i	Coordonnée spatiale (vecteur)	[m]
$x_{p,i}$	Position des particules lagrangiennes	[m]
Y_k	Fraction massique d'espèces k	[-]
Z	Coordonnée spatiale	[m]
z	Fraction de mélange	[-]

Caractères grecs

Symbole	Description	Unité
α_l	Fraction volumique liquide	[-]
χ	Taux de dissipation scalaire	[s ⁻¹]
δ_{ij}	Symbole de Kronecker	[-]
η_κ	Echelle de Kolmogorov	[m]
λ	Coefficient de conductivité thermique	[W/m/K]
Λ	Etirement	[s ⁻¹]
μ	Viscosité moléculaire	[Pa s]
μ_t	Viscosité turbulente	[Pa s]
ϕ	Richesse	[-]
ϕ_g	Richesse gazeuse	[-]
ϕ_l	Richesse liquide	[-]
ρ	Masse volumique	[kg/m ³]
ρ_l	Masse volumique liquide	[kg/m ³]
τ_p	Temps de relaxation de la particule	[s]
$\dot{\omega}_k$	Terme source de l'espèce k	[kg/m ³ /s]

Nombres adimensionnés

Symbole	Description
B_M	Nombre de Spalding pour le transfert de masse
B_T	Nombre de Spalding pour le transfert de chaleur
Da	Nombre de Damköhler
Le	Nombre de Lewis
Nu	Nombre de Nusselt
Pr	Nombre de Prandtl
Pr_t	Nombre de Prandtl turbulent
Re	Nombre de Reynolds
Re_t	Nombre de Reynolds turbulent
Re_p	Nombre de Reynolds particulaire
Sc	Nombre de Schmidt
Sh	Nombre de Sherwood
St	Nombre de Stokes
We	Nombre de Weber

Acronymes

Acronyme	Définition
ARC	Analytically Reduced Chemistry
CFD	Computational Fluid Dynamics
CFM	Coherent Flame Model
CMC	Conditional Moment Closure
CRZ	Central Recirculation Zone
DNS	Direct Numerical Simulation
DTFLES	Dynamically Thickened Flame model pour la LES
FIM-UR	Fuel Injection Method by Upstream Reconstruction
GRT	Global Rainbow Technique
HIT	Homogeneous Isotropic Turbulence
IRZ	Inner Recirculation Zone
KIAI	Knowledge for Ignition, Acoustics and Instabilities
LDV	Laser Doppler Velocimetry
LES	Large Eddy Simulation
LW	Lax-Wendroff
NSCBC	Navier-Stokes Characteristic Boundary Conditions
ORZ	Outer Recirculation Zone
PCM	Presumed Conditional Moments
PDA	Phase Doppler Anemometry
PDF	Probability Distribution Function
PEA	Pre-Exponential Adjustment
PIV	Particle Image Velocimetry
PLIF	Planar Laser-Induced Fluorescence
QSS	Quasi-Steady State
RANS	Reynolds Average Navier-Stokes
RMS	Root-Mean-Square
SMD	Sauter Mean Diameter
SS	Steady Strained
TF	Thickened Flame
TFLES	Thickened Flame model pour la LES
TTGC	Two-step Taylor-Galerkin scheme version C
UU	Unsteady Unstrained
WALE	Wall-Adapting Local Eddy-viscosity

Première partie
Contexte de l'étude

Introduction générale

Sommaire

1.1 Contexte industriel et environnemental	11
1.1.1 <i>Formation des polluants</i>	12
1.1.2 <i>Fonctionnement général d'un moteur aéronautique</i>	14
1.2 Phénoménologie des flammes de spray	17
1.2.1 <i>Couplage spray/turbulence</i>	18
1.2.2 <i>Couplage spray/combustion</i>	21
1.2.3 <i>Couplage turbulence/combustion</i>	29
1.3 La recherche en combustion diphasique	33
1.3.1 <i>Caractérisation expérimentales d'un spray turbulent réactif</i>	33
1.3.2 <i>Simulations numériques de spray</i>	35
1.3.3 <i>Configurations classiques pour l'étude de spray réactifs</i>	38
1.4 Objectifs et plan du manuscrit	41

1.1 Contexte industriel et environnemental

L'espèce humaine représente de manière générale l'espèce vivante qui consomme le plus d'énergie sur la planète, que ce soit pour se nourrir, se chauffer, se déplacer ou encore se divertir... Malgré des ressources non renouvelables qui ne cessent de diminuer, cette consommation continue d'augmenter à ce jour. Plusieurs causes peuvent expliquer cela : d'une part, la démographie mondiale n'a cessé de croître ces dernières décennies, celle-ci ayant quasiment doublé de 1970 à aujourd'hui (Fig. 1.1). Même si cette croissance tend à ralentir, la population mondiale atteindra les 10 milliards d'habitants en 2050 selon les estimations de l'Organisation des Nations Unies [132], impliquant des besoins énergétiques plus importants. D'autre part, l'évolution des conditions et modes de vie fait qu'une personne consomme en moyenne aujourd'hui environ deux fois plus d'énergie qu'en 1960

[53].

Parmi les secteurs consommateurs d'énergie, le transport (principalement automobile et aérien) occupe une place prédominante avec environ un quart de l'énergie consommée (Fig. 1.2). Des solutions tentent de voir le jour, notamment dans le domaine automobile où la technologie hybride (électrique + pétrole) s'est largement développée ces dernières années. Néanmoins, aucune source d'énergie alternative n'est susceptible, à ce jour, de pouvoir remplacer le carburant fossile liquide utilisé dans le cadre de la propulsion aéronautique du fait des rapports poids/puissance nécessaires ainsi que de l'autonomie requise. Aussi, les processus de combustion des carburants fossiles liquides jouent un rôle prédominant à la fois pour l'efficacité des moteurs, mais aussi pour les émissions de polluants indésirables. Chacun de ces deux aspects est un élément clé pour l'avenir et nécessite des investigations poussées afin de limiter leur impact.

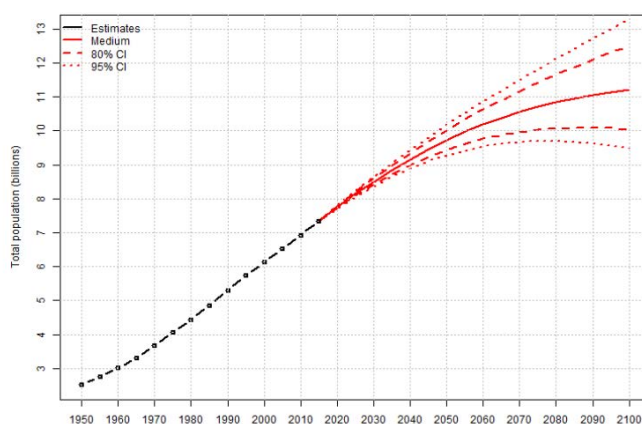


Figure 1.1 – Evolution de la démographie mondiale et extrapolation moyenne (ligne rouge) pour les prochaines décennies ; Intervalles de confiance (CI) à 80 % (tirets rouges) et à 95 % (pointillés rouges). [132].

1.1.1 Formation des polluants

Les processus de combustion constituent l'un des principaux émetteurs de pollution atmosphérique. Parmi les polluants notables on peut citer :

- **Les oxydes de carbone CO_x** , principaux produits de la combustion d'hydrocarbures. Le dioxyde de carbone CO_2 , même s'il n'est pas un polluant au sens strict puisque c'est un produit normal de la combustion complète des hydrocarbures, absorbe le rayonnement infrarouge du soleil justifiant sa dénomination de gaz à effet de serre. Le monoxyde de carbone CO , trace d'une combustion incomplète, est un gaz très toxique incolore et inodore qui réduit l'oxygénation du sang, en prenant la

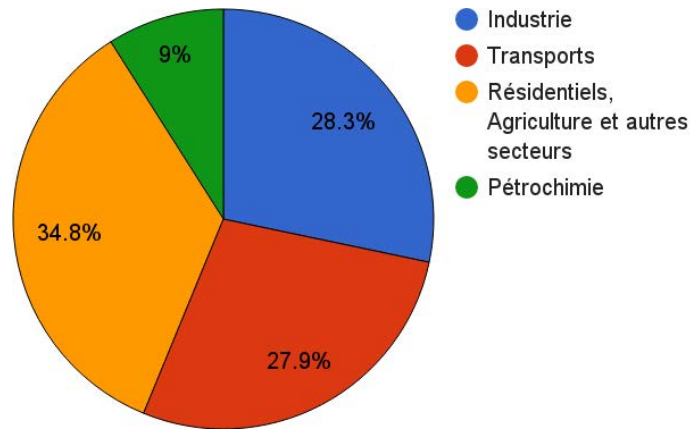


Figure 1.2 – Répartition de l'énergie mondiale par secteur, adapté de [82].

place des molécules de dioxygène. Celui-ci peut causer des malaises plus ou moins importants (nausées, pertes de connaissance) pouvant, dans le pire des cas, entraîner la mort. Par ailleurs, une exposition chronique à de faibles concentrations peut affecter le système cardiovasculaire.

- **Les oxydes d'azotes** NO_x (NO , NO_2 , N_2O) sont issus de la recombinaison des radicaux hydrogénés du carburant avec les composants azotés de l'air et du combustible. Leur impact sur l'environnement est néfaste. Responsables de pluies acides et d'effet de serre, ils représentent également un risque sanitaire, le NO et NO_2 étant neurotoxiques et causant l'irritation des bronches tout en réduisant le pouvoir d'oxygénation du sang. Les oxydes d'azotes peuvent être formés selon plusieurs mécanismes : à basse température ($\sim 1000\text{ K}$) dans les zones riches (NO précoce), ou à haute température (NO thermique) essentiellement dans les gaz brûlés. Un long temps de résidence des volumes chauds favorise la production de NO thermique.
- **Les suies** constituent un type particulier d'imbrûlés et sont responsables de la fumée noire visible à l'échappement des moteurs. Si les processus de formation de ces particules fines sont encore mal connus, leur impact nocif sur le système respiratoire a bien été démontré [109].

Afin de réduire les émissions de polluants, les politiques déploient des mesures de plus en plus drastiques afin d'inciter les motoristes à concevoir des moteurs plus efficaces et plus propres. De nouvelles normes environnementales voient le jour et fixent des taux d'émissions polluantes de plus en plus sévères. Le consortium ACARE (Advisory Council for Aeronautics Research in Europe) a par exemple imposé une réduction de 75% des

émissions de dioxyde de carbone (CO_2) et de 90% des émissions d'oxydes d'azote (NO_x) pour 2050 par rapport à 2000. Pour répondre à ces problématiques environnementales et économiques, les industriels doivent de trouver de nouvelles solutions technologiques. L'amélioration des processus de combustion en fait partie et reste une voie de recherche privilégiée pour tenter de réduire les émissions de polluants et d'améliorer les rendements.

1.1.2 Fonctionnement général d'un moteur aéronautique

Moteurs aéronautiques et turbines à gaz reposent sur le même principe de transformation d'énergie chimique en énergie mécanique selon le cycle de Brayton (Fig. 1.3). L'énergie mécanique ainsi récupérée sert alors à propulser un avion, entraîner les hélices d'un hélicoptère ou encore produire de l'électricité. La turbine à gaz se compose principalement de trois parties permettant la réalisation du cycle thermodynamique de Brayton : un compresseur, une chambre de combustion et une turbine (Fig. 1.4). En premier lieu, de grandes quantités d'air sont aspirées à travers la soufflante et sont amenées dans le compresseur, ce qui permet de transmettre du travail mécanique au fluide. Une partie de l'air comprimé (entre 4 et 32 bars) est ensuite envoyé dans une chambre de combustion où il est mélangé à du carburant dans des proportions adéquates pour favoriser la combustion. Les gaz chauds issus de la combustion sont alors éjectés vers la tuyère où un processus de détente et de récupération d'énergie sous forme mécanique s'effectue à travers une turbine. L'augmentation des performances du moteur passe forcément par l'amélioration de ces trois blocs : augmentation du taux de compression dans le compresseur, meilleure efficacité de la combustion et réduction des émissions de polluants dans la chambre de combustion, augmentation de la température à l'entrée de la turbine sans risque de détérioration des matériaux constituant la turbine grâce à des techniques de refroidissement efficaces. La zone qui nous intéresse dans la suite est la chambre de combustion.

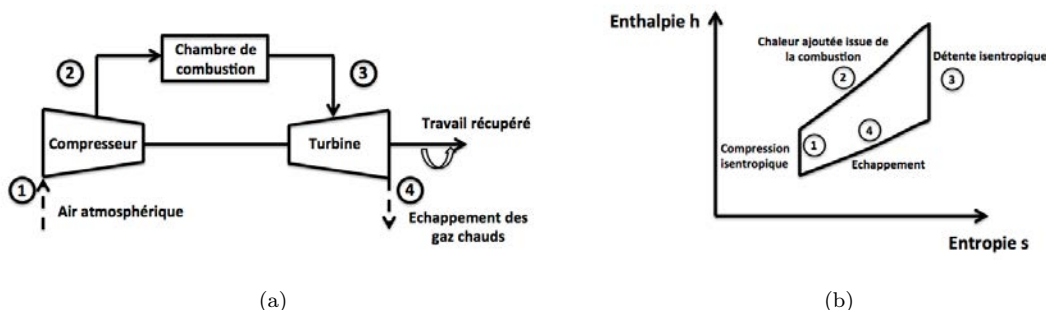


Figure 1.3 – (a) Cycle thermodynamique d'une turbine à gaz; (b) Cycle idéal de Brayton-Joule dans un diagramme enthalpie-entropie. Adapté de [128]

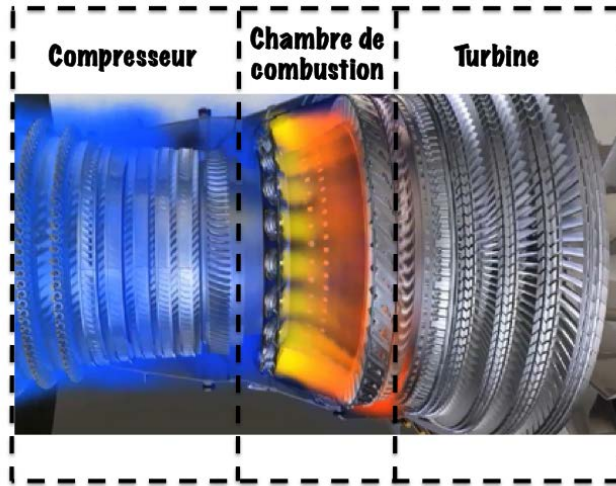


Figure 1.4 – Représentation imagée des blocs compresseur, chambre de combustion et turbine.

Chambre de combustion

La chambre de combustion d'une turbine à gaz doit satisfaire des contraintes sévères : assurer une combustion complète du combustible, réduire les émissions de polluants, minimiser les pertes de charge, assurer une bonne stabilité de la température d'entrée turbine et ce, tout en permettant un bon refroidissement des parois. On trouve des chambres de combustion de tailles très variables, allant de la dizaine de mètres pour les fours industriels, à quelques centimètres dans le secteur aéronautique où celle-ci doit être la moins encombrante possible. De façon générale, une chambre de combustion se compose d'un système d'injection d'air, un système d'injection de carburant, un système d'allumage et des systèmes de refroidissement.

- **Système d'injection d'air** : l'écoulement d'air turbulent apporte l'oxydant nécessaire à la combustion et est également utilisé pour le refroidissement. Il doit en outre permettre la stabilisation de la flamme en installant des zones de faible vitesse [12]. La méthode la plus commune consiste à utiliser un tourbillonneur de sorte à créer une large zone de recirculation qui, en plus de stabiliser la flamme, la rend plus compacte. L'écoulement d'air interagit également avec l'injection de carburant liquide et doit faciliter l'atomisation du jet et la dispersion des gouttes (Section 1.2.1).
- **Système d'injection de carburant** : pour des raisons de densité énergétique, le carburant utilisé est stocké sous forme liquide. L'objectif principal du système d'injection de carburant est de générer un spray composé de gouttes aussi fines que possibles sur une distance minimale afin que la combustion soit la plus homogène et

compacte. Le fait d'atomiser le carburant en fines gouttelettes permet d'augmenter la surface de contact avec l'air chaud et ainsi d'accélérer l'évaporation des gouttes. Différents systèmes d'injection existent pour les moteurs aéronautiques, les plus communs étant les systèmes de type "pressure-swirl" et les atomiseurs de type "air-blast".

- **L'atomiseur de type "pressure swirl"** (Fig. 1.5, *gauche*) consiste à éjecter le carburant préalablement pressurisé à travers un orifice de petite dimension. L'un des systèmes les plus communs est l'injecteur simplex qui comporte une chambre à swirl et qui génère un cône d'injection creux très ouvert dans la chambre de combustion. L'avantage principal de cette méthode est que la taille des gouttes obtenues est quasiment indépendante des conditions opératoires. Celle-ci ne dépend que de la différence de pression dans le jet liquide et de la chambre de combustion.

- **Pour l'atomiseur de type "air-blast"** (Fig. 1.5, *droite*), le carburant liquide est injecté avec une vitesse relativement peu élevée. Il est atomisé au contact de l'écoulement d'air rapide environnant. Sur ce type de système d'injection, il se forme d'abord un film liquide sur les parois de l'injecteur créant ainsi une interface gaz-liquide propice aux échanges de quantités de mouvement et à la formation d'instabilités. Le processus d'atomisation a lieu au niveau des lèvres de l'injecteur. Ce type d'atomiseurs présente des performances satisfaisantes sur une large gamme de conditions opératoires.

- **Système d'allumage** : le rôle du système d'allumage est de fournir une quantité d'énergie initiale suffisante et de manière très localisée afin de permettre la création d'un noyau de flamme puis le développement d'une flamme turbulente. Cette énergie est le plus souvent électrique (bougies d'allumages).

- **Système de refroidissement** : le refroidissement des parois de la chambre de combustion est effectué essentiellement à partir d'air provenant du compresseur, à l'aide de films d'air de refroidissement formés à la paroi via des plaques multi-perforées [74]. Des trous de dilution plus en aval de la chambre permettent de refroidir les gaz brûlés avant l'entrée de la turbine.

La chambre de combustion du moteur est ainsi le lieu d'un écoulement turbulent, réactif et diphasique complexe. La flamme issue de ce type de configuration est appelée flamme de spray. Sa structure diffère des flammes purement gazeuses, c'est pourquoi elle fait encore aujourd'hui l'objet de nombreuses recherches.

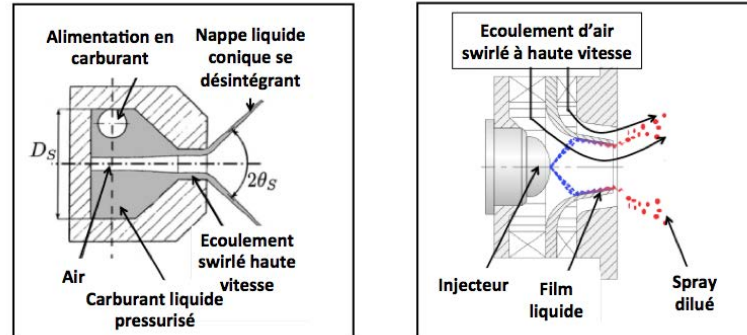


Figure 1.5 – Schéma de fonctionnement d'un injecteur "pressure swirl" (gauche) et d'un atomiseur "air blast" (droite).

1.2 Phénoménologie des flammes de spray

Cette section présente les caractéristiques principales des flammes de spray, depuis l'injection du carburant liquide et l'obtention d'un spray dilué, jusqu'à l'évaporation des gouttes et la combustion du carburant selon différents régimes. Tous ces processus font intervenir des phénomènes physiques complexes liés à la turbulence, le spray et la combustion, eux-même fortement couplés (Fig. 1.6). Lorsque le carburant est injecté sous forme gazeuse, la turbulence permet localement le mélange direct des espèces gazeuses et modifie le comportement de la flamme, elle-même influencée par le cisaillement et l'étirement générés par l'écoulement. La structure du mélange local peut alors entraîner différents régimes de combustion, allant de parfaitement prémélangé, partiellement prémélangé à non prémélangé. Lorsque le carburant injecté est liquide, de nouvelles interactions apparaissent. L'écoulement turbulent agit sur l'atomisation et la dispersion des gouttes dans la chambre. Les gouttes agissent en retour sur la turbulence locale du fait de leur frottement avec la phase gazeuse. L'évaporation des gouttes est contrôlée par le mélange local et la température imposée par la flamme environnante. En retour, le carburant gazeux, issu de l'évaporation des gouttes, modifie la structure du mélange local. La présence simultanée de différents régimes de combustion est alors encore plus probable en raison des inhomogénéités de mélange induites. Ainsi, tous ces phénomènes doivent être pris en compte simultanément pour saisir correctement la physique de la combustion turbulente diphasique.

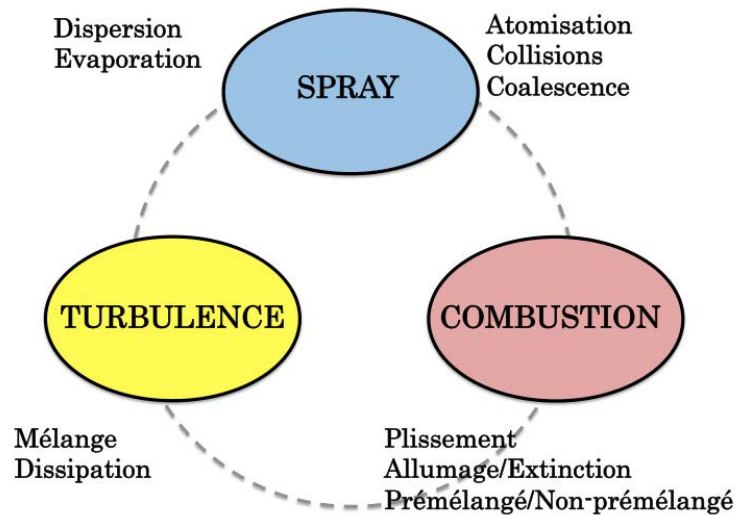


Figure 1.6 – Représentation schématique des interactions entre la turbulence, le spray et la combustion.

1.2.1 Couplage spray/turbulence

Atomisation et dispersion :

Les propriétés du spray (forme du spray, taille de gouttes) dépendent fortement du processus d'atomisation qui est lui-même contrôlé par l'écoulement turbulent environnant. L'atomisation est un phénomène très complexe dont certains mécanismes sont encore aujourd'hui compris de manière imparfaite. Les principales étapes d'atomisation d'un jet ou d'une nappe liquide se déroulent en régime dense, c'est-à-dire avec une fraction volumique liquide $\alpha_l > 10^{-3}$ et sont répertoriées ci-dessous (Fig. 1.7 et 1.8) :



Figure 1.7 – Atomisation assistée par air : déstabilisation d'un jet liquide par un courant gazeux [196].

- **Film liquide et atomisation primaire** : le film liquide formé par des gouttes impactant la paroi est déstabilisé par le cisaillement induit par l'écoulement d'air rapide environnant. Cela se traduit par l'apparition d'instabilités au niveau de l'interface

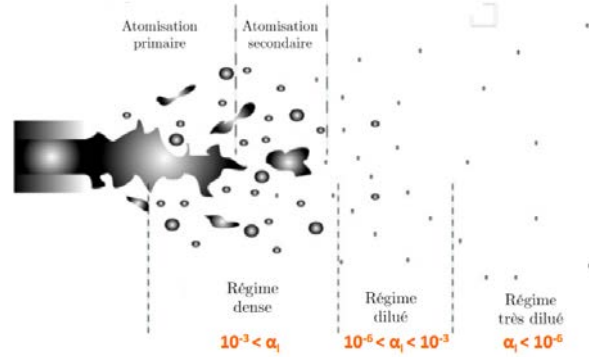


Figure 1.8 – Schéma des différentes phases d'atomisation du jet liquide. Adapté de [89].

air/liquide conduisant à la formation d'ondes de surface. Le jet liquide se fragmente alors sous l'effet de phénomènes d'instabilités de Rayleigh-Taylor se traduisant par des ondes transverses qui provoquent la formation et la séparation de ligaments et de très grosses gouttes.

- **Atomisation secondaire** : les efforts aérodynamiques dus à la vitesse relative des deux phases cause la désintégration des ligaments qui se divisent pour donner des gouttes plus petites, de forme quasiment sphériques (Fig. 1.7). Ces phases d'atomisation sont dominées par la coalescence et les collisions de paquets liquides. Une façon d'évaluer les régimes d'atomisation [203] est de considérer le nombre de Weber, noté W_e , qui est défini de la façon suivante :

$$W_e = \frac{\rho U^2 L}{\sigma} \quad (1.1)$$

Ce nombre représente le rapport entre forces d'inertie de la goutte $\rho U^2 L$ et forces de tension interfaciale ou capillaires σ . Il caractérise la capacité d'une goutte, d'un jet ou d'un ligament à résister aux forces aérodynamiques grâce aux forces de tension de surface. Les forces capillaires dominent à faible nombre de Weber ($W_e < 15$) et l'écoulement est dans ce cas trop faible pour déformer la goutte, qui reste sphérique. A l'inverse, un grand nombre de Weber indique une faible tension de surface et favorise la fragmentation. La dynamique du spray varie selon la densité volumique de gouttes. Les sprays denses sont contrôlés par les collisions entre particules alors que les sprays dilués sont contrôlés par les interactions des particules avec le fluide. Dans le cadre de cette thèse, seul le régime dilué est considéré.

- **Dispersion des gouttes** : après l'atomisation secondaire, les interactions intergouttes sont négligeables et la dynamique des gouttes est contrôlée par le rapport

de leur inertie sur la traînée. Le nombre de Stokes S_t est un nombre adimensionnel représentant le rapport de ces deux forces comparant le temps de réponse de la particule τ_p au temps caractéristique de l'écoulement τ_f : $S_t = \frac{\tau_p}{\tau_f}$. C'est un indicateur de la réponse de la particule aux variations de vitesse de l'écoulement.

- $S_t \gg 1$: les particules sont peu affectées par la phase porteuse et possèdent un comportement balistique.
- $S_t \ll 1$: les particules se conduisent comme des traceurs et suivent la trajectoire imposée par l'écoulement gazeux.
- $S_t \sim 1$: les gouttes interagissent avec le fluide porteur avec une certaine inertie et peuvent conduire à un phénomène de **concentration préférentielle** [177], c'est-à-dire une augmentation du nombre de particules dans des régions particulières (Fig. 1.9). Squires et Eaton [178] ont analysé la dispersion de particules solides au sein d'un écoulement turbulent et ont observé l'accumulation des particules dans les zones de faibles vorticités et de fort cisaillement [118], où les gouttes dévient de la trajectoire imposée par le gaz à cause de leur inertie [200]. Parmi les premiers travaux portant sur la dispersion de particules liquides qui s'évaporent, ceux réalisés par Mashayek *et al.* [122, 123] ou plus récemment par Réveillon [154] montrent que la concentration préférentielle influe localement de façon importante l'évaporation et par la même occasion le mélange du carburant avec l'air, modifiant localement le régime de combustion.

Modulation de la turbulence par la phase dispersée

Même dans le cas de spray dilués, la phase dispersée peut affecter la turbulence de la phase gazeuse [209]. D'un côté, le transfert d'énergie gaz-liquide pour accélérer les particules a pour effet une dissipation de la turbulence gazeuse du fait du frottement à la surface des gouttes. D'un autre côté, les tourbillons formés dans le sillage des gouttes ainsi que le cisaillement à leur surface contribuent à l'augmentation de la turbulence. La modulation de la turbulence gazeuse par la phase dispersée résulte ainsi de l'équilibre de ces deux effets dont l'intensité va principalement dépendre du nombre de Stokes de la particule et de la densité du spray. L'analyse de l'état de l'art des interactions entre le spray et la turbulence, notamment concernant les effets de concentration préférentielle et d'atténuation de la turbulence par la phase dispersée a été revue récemment en détail par Balachandar *et al.* [7]. Au final, la classification des régimes de spray est illustrée en Fig. 1.10.

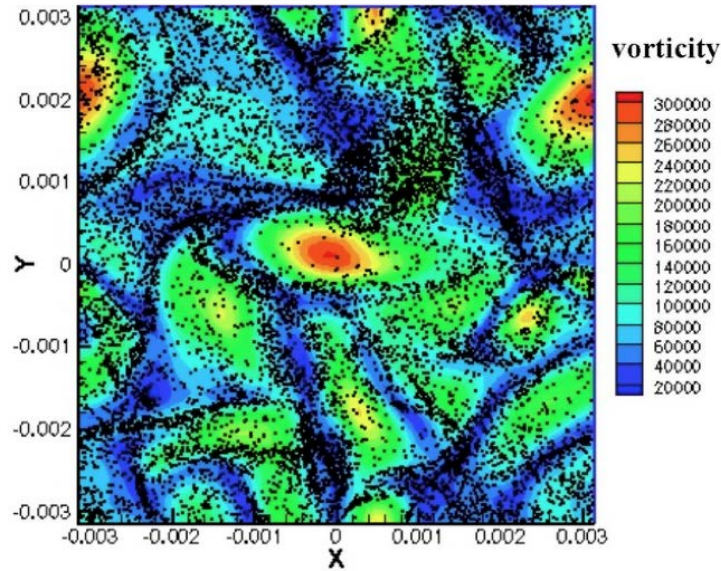


Figure 1.9 – Concentration préférentielle des particules dans une turbulence homogène isotrope [65].

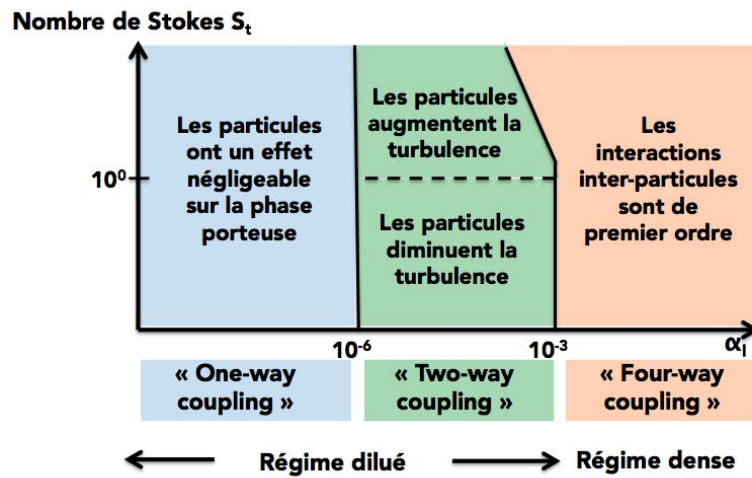


Figure 1.10 – Classification des régimes de spray en fonction de la fraction volumique liquide et du nombre de Stokes. Adapté de [89].

1.2.2 Couplage spray/combustion

Une caractéristique essentielle de la combustion de spray est que le carburant initialement injecté sous forme liquide doit passer par une étape d'évaporation, puis la vapeur de carburant gazeux doit se mélanger avec l'air avant que les réactions chimiques n'aient lieu.

Il en résulte des régimes de combustion variant des flammes prémélangées, partiellement prémélangées à non prémélangées. En fonction des caractéristiques du système étudié, la combustion peut avoir lieu soit après l'évaporation complète du combustible, soit au sein du spray en cours d'évaporation comme illustré en Fig. 1.11. L'interaction du spray avec la combustion est en partie déterminée par le rapport entre le temps d'évaporation et le temps convectif des gouttes. Si celui-ci est petit, les gouttes s'évaporent avant la flamme et la combustion est purement gazeuse. Dans le cas inverse, des interactions complexes apparaissent entre les gouttes en cours d'évaporation, générant du carburant gazeux, et la flamme :

- **Combustion après pré-évaporation totale du spray** : les gouttes liquides ont un temps suffisant pour s'évaporer avant d'atteindre la zone de réaction qu'elles alimentent en vapeur de carburant. Dans ce cas, la flamme présente les mêmes caractéristiques qu'une flamme partiellement prémélangée gazeuse.
- **Combustion diphasique homogène** : les gouttes liquides ne s'évaporent pas totalement avant la zone de réaction et interagissent directement avec la flamme, le spray étant suffisamment dense et homogène pour alimenter la flamme de façon continue.
- **Combustion diphasique hétérogène** : identique au cas précédent à l'exception que les gouttes interagissant avec la flamme sont éparpillées et peuvent brûler selon divers régimes décrits ci-après.

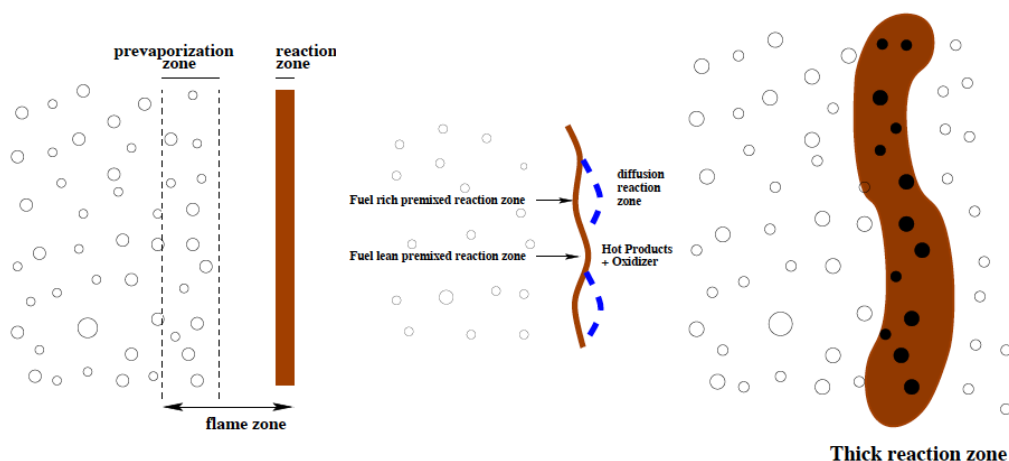


Figure 1.11 – (gauche) Flamme de spray préé vaporisée. (milieu) Effets des fluctuations locales de richesse sur la flamme. (droite) Flamme de spray épaissie (Borghini [25]).

Comme évoqué précédemment, la combustion diphasique hétérogène peut engendrer une multitude de régimes de combustion possibles dont la caractérisation a fait l'objet de nombreuses études. À partir de l'observation expérimentale selon laquelle les gouttes de carburant brûlent rarement de façon individuelle, Chiu *et al.* [37, 38, 39] proposent une classification des différents régimes de combustion de gouttes rencontrés. En raisonnant sur un nuage de gouttes plongé dans une atmosphère d'oxydant chaud, ils distinguent différents régimes de combustion en introduisant le nombre de groupe G (Fig. 1.12). Ce nombre sans dimension peut être vu comme le rapport entre la vitesse caractéristique d'évaporation et la vitesse de diffusion de la température au sein du nuage.

$$G = \frac{3}{4} Le Sh N^{2/3} \frac{D}{l} \quad (1.2)$$

Le et Sh désignent respectivement les nombres de Lewis et de Sherwood, D le diamètre moyen des gouttes, N le nombre de gouttes et l la distance moyenne inter-gouttes. Candel *et al.* [33] montrent que lorsque le nombre de Péclet, défini comme $Pe = Lv/\alpha = Re \times Pr$ avec α la diffusivité thermique, est grand, c'est-à-dire lorsque le temps caractéristique de transfert par convection est grand devant le temps caractéristique de transfert par diffusion, la relation $G \approx 5N^{2/3}/S$ permet d'obtenir une valeur approchée du nombre de groupe, avec $S = l/\delta_{rf}$ le paramètre de séparation, δ_{rf} étant le rayon de la flamme de diffusion qui entourerait une goutte unique ayant les propriétés moyennes des gouttes du nuage. De ce fait, lorsque le nombre de séparation décroît, il existe un point où la topologie de la flamme passe d'un régime de combustion individuelle à un régime de groupe (Fig. 1.12) :

- **$G \ll 1$, combustion en goutte isolée** : la densité du nuage de gouttes est suffisamment faible et les gouttes suffisamment éloignées les unes des autres pour que la chaleur issue des gaz brûlés diffuse à l'intérieur du nuage liquide. Un processus individuel d'évaporation et de combustion peut alors avoir lieu autour de chaque goutte.
- **$G < 1$, combustion de groupe interne** : la flamme ne peut plus pénétrer dans le coeur du nuage, trop riche ou trop froid, mais se maintient à distance tout en étant alimentée par l'évaporation des gouttes internes. Les gouttes à l'extérieur de la flamme brûlent individuellement dans les gaz brûlés.
- **$G > 1$, combustion de groupe externe** : identique à la combustion de groupe interne à la différence que la flamme englobe cette fois tout le groupe de gouttes.
- **$G \gg 1$, combustion en enveloppe externe** : les gouttes sont trop proches les unes des autres pour permettre la diffusion de température au sein du nuage. En raison des effets de saturation de vapeur au coeur du nuage très dense, seule la couche externe du nuage liquide peut s'évaporer et alimenter une flamme. La flamme reste

donc à une distance fixe du bord du nuage.

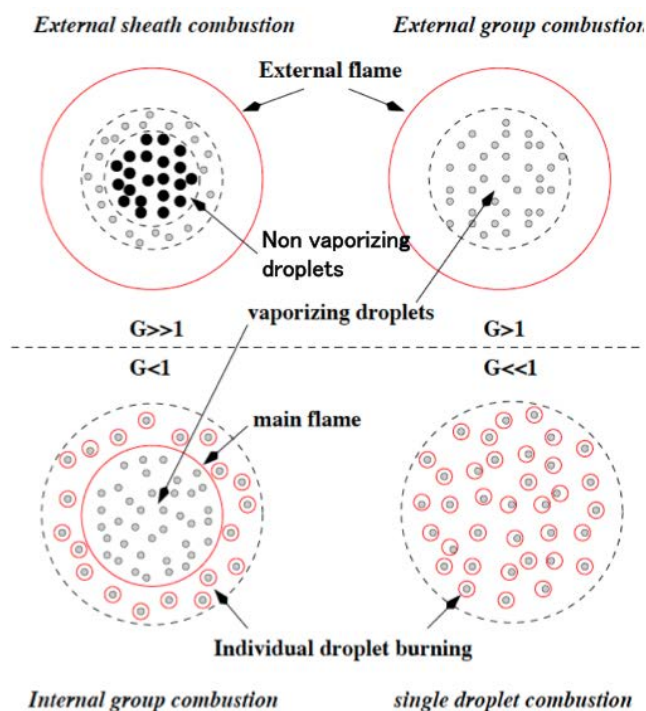


Figure 1.12 – Régimes de combustion diphasique selon le nombre de groupe G (Chiu et al. [39]).

La classification initiale proposée par Chiu *et al.* [39] a ensuite été complétée et adaptée pour différentes géométries de nuages de gouttes, ainsi que pour prendre en compte l'influence de l'écoulement environnant. La vaste littérature sur ce sujet a été revue par Annamalai *et al.* [5]. Les travaux de Borghi et ses collaborateurs [24, 25] ont permis la prise en compte de paramètres supplémentaires pour caractériser les différents régimes de combustion. Ils ont ainsi introduit l'épaisseur de flamme δ_f et son temps caractéristique τ_f ainsi que le temps d'évaporation moyen des gouttes τ_v . Le diagramme résultant de cette analyse est représenté en Fig 1.13 dans un système de coordonnées τ_v/τ_f et l/δ_f . Lorsque $\tau_v \ll \tau_f$, les gouttes s'évaporent très rapidement et une combustion de type prémélangée gazeuse a lieu, quelles que soient la distance inter-gouttes ou l'épaisseur de flamme (Fig. 1.11a). Néanmoins, les fluctuations de fraction volumique du spray peuvent entraîner des variations locales de la vapeur de carburant devant le front de flamme et provoquer des effets de prémélange partiel (Fig. 1.11b). Si le temps d'évaporation est plus important, pour $\delta_f > l$, les gouttes pénètrent dans les zones de réaction-diffusion car la flamme est plus épaisse que l'espace inter-goutte. Cette situation mène rapidement à un épaissement de la flamme (Fig. 1.11c). A l'inverse, si $\delta_f < l$, les gouttes qui traversent le front de flamme

brûlent dans une seconde zone réactive. La topologie de cette zone secondaire dépendra du paramètre S . Comme évoqué précédemment, pour les petites valeurs de S , les gouttes brûlent individuellement ou alors sont amalgamées en petits groupes également appelés clusters, entourés par une flamme. Il s'agit du régime de combustion de groupe. Lorsque la valeur du paramètre S augmente, Borghi [25] a également identifié l'apparition d'un régime de percolation et d'un régime de poches.

Réveillon et Vervish [155] ont étendu cette analyse en étudiant l'impact de la richesse liquide globale de la flamme $\dot{\Phi}_l = \left(\frac{\dot{m}_l}{\dot{m}_{air}}\right) / \left(\frac{\dot{m}_l}{\dot{m}_{air}}\right)_{st}$ et de la turbulence sur la structure de la flamme. Des simulations numériques directes 2D de flammes de sprays faiblement turbulentes dans un écoulement d'air co-courant ont permis de mettre en évidence la topologie de la flamme pour différentes richesses (Fig. 1.14) mettant ainsi en évidence trois différents régimes de combustion :

- **Régime de combustion externe** : pour des valeurs extrêmes de richesse, la combustion s'effectue en un front de flamme continu :
 - fermé : ϕ_l^0 faible. Le front, principalement prémélangé, est capable de consommer l'intégralité du carburant liquide et gazeux (Fig. 1.14a).
 - ouvert : ϕ_l^0 élevé. Le carburant brûle à la fois en prémélange et en diffusion. (Fig. 1.14d).
- **Régime de combustion de groupe** : les gouttes forment des poches riches dont la combustion a lieu en prémélange puis en diffusion (Fig. 1.14b).
- **Régime de combustion hybride** : Lorsque la richesse augmente, les groupes de gouttes brûlent en prémélange mais la richesse élevée empêche la percolation des flammes de diffusion dans le spray. Le carburant non brûlé est alors consommé en diffusion avec le co-courant d'oxydant (Fig. 1.14c).

Plus récemment, Urzay [185] a présenté une autre révision du diagramme de combustion diphasique (Fig. 1.15) initialement proposé par Chiu *et al.* [39]. Celui-ci ne prend plus seulement en compte le nombre de groupe G mais également le rayon d'une flamme autour d'une goutte individuelle et la stoechiométrie carburant-oxydant. Pour cela, deux nombres sans dimension représentant respectivement la charge massique α (mass loading ratio) définie comme la masse de liquide par unité de masse de gaz dans le spray, et le nombre de Stokes d'évaporation $St_v = \alpha/G$ sont introduits. La charge massique critique α_f correspond au

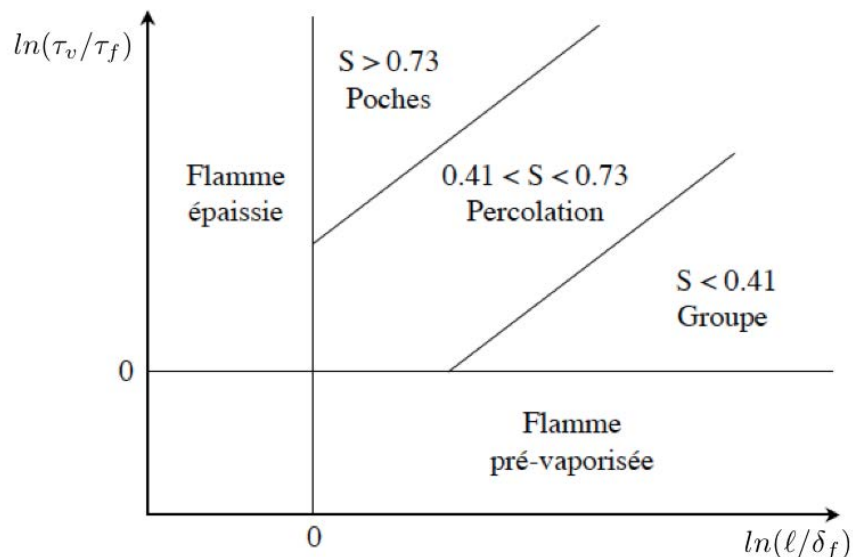


Figure 1.13 – Régimes de combustion diphasique prenant en compte le temps d'évaporation des gouttes [26].

cas où l'espace inter-gouttes est égal au diamètre de la flamme autour de la goutte ($l \sim \delta_{r,f}$ i.e $S \sim 1$).

A la différence du diagramme de Chiu *et al.* [39], plusieurs régimes de combustion peuvent être obtenus pour une même valeur du nombre de groupe G en raison des valeurs différentes de charge massique. Pour $G \gg 1$, on retrouve le régime de combustion en enveloppe externe du diagramme de Chiu *et al.* [39]. Pour $G = O(1)$, l'épaisseur de vaporisation se développe jusqu'à une distance comparable au rayon du nuage de gouttes et une transition s'établit soit vers une combustion de groupe interne, soit vers une combustion de groupe externe selon la charge massique. En particulier, lorsque $\alpha/\alpha_f > 1$, l'espace inter-gouttes devient plus petit que le rayon de la flamme autour d'une goutte isolée et par conséquent, une flamme de diffusion unique enveloppe le nuage. Enfin pour $G \ll 1$, on peut remarquer que le régime de goutte isolée ne peut exister que pour $\alpha/\alpha_f < 1$. Dans le cas contraire, les gouttes brûlent en régime de groupe externe.

Vitesse et épaisseur des flammes diphasiques laminaires

Une des caractéristiques qu'on cherche à obtenir lorsqu'on étudie les flammes diphasiques laminaires est la vitesse laminaire de propagation, qui joue notamment un rôle dans la stabilisation de la flamme dans l'écoulement. La présence de la phase liquide nécessite de distinguer deux richesses. La richesse gazeuse Φ_g correspond au rapport des concentrations en carburant gazeux et en oxydant gazeux :

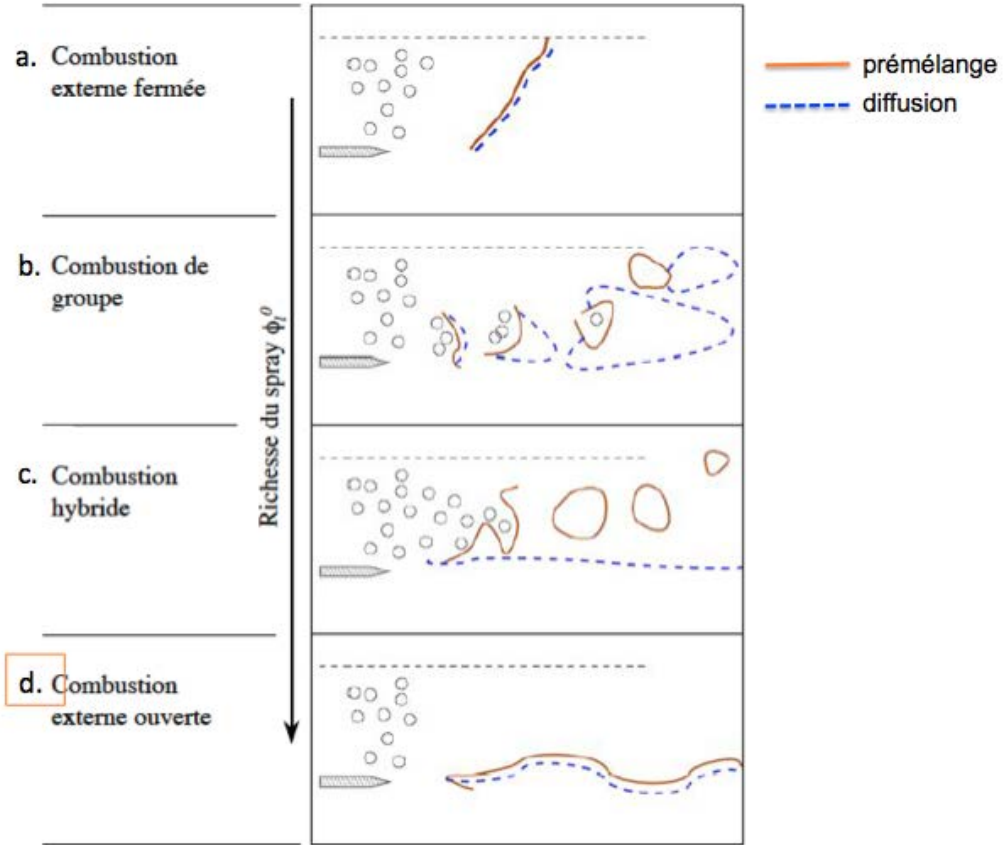


Figure 1.14 – Structure de flamme diphasique en fonction de la richesse (Réveillon et al. [155]).

$$\Phi_g = s \frac{Y_F}{Y_O} \quad (1.3)$$

avec s le coefficient stoechiométrique massique de la réaction. La richesse liquide Φ_l correspond à la richesse gazeuse qui serait obtenue après évaporation complète du liquide et s'écrit :

$$\Phi_l = s \frac{Y_{fl}}{Y_O} \quad (1.4)$$

avec $Y_{fl} = \rho_l \alpha_l / [\rho_l \alpha_l + \rho_g (1 - \alpha_l)]$ la fraction massique de carburant équivalente que représentent les gouttes.

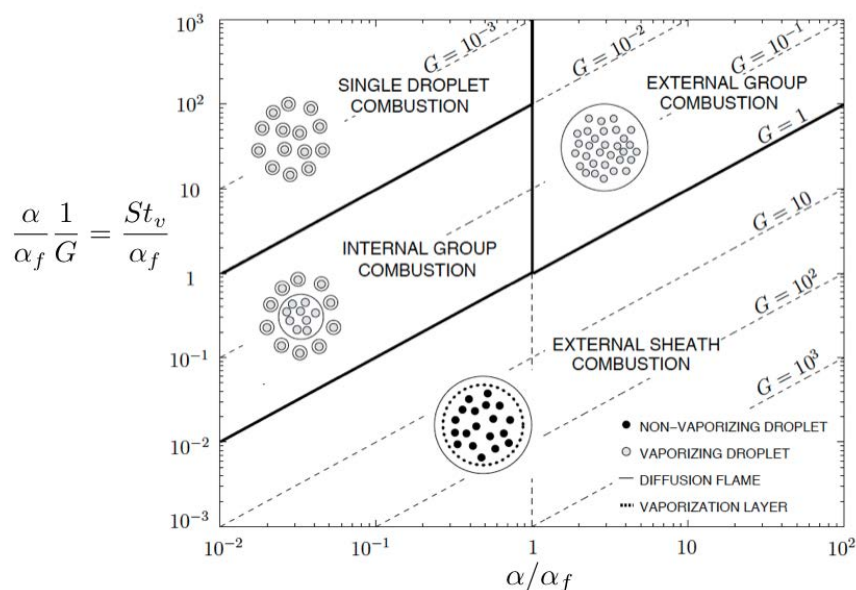


Figure 1.15 – Diagramme de Chiu révisé par Urzay [185]. Les régimes de combustion sont classés en fonction de la charge massique α et du nombre de Stokes d'évaporation St_v .

Il existe des approches analytiques qui permettent d'estimer la vitesse de flamme diphasique. Par exemple, Greenberg *et al.* [72] proposent une formule qui permet d'obtenir la vitesse de propagation d'une flamme laminaire dans un spray hétérogène et polydispense. Kaufmann *et al.* [98] dérivent par une approche unidimensionnelle la vitesse de consommation d'une flamme diphasique monodisperse, qui est similaire à une vitesse de consommation gazeuse à laquelle s'ajoute un terme lié à la richesse initiale stockée sous forme liquide.

La simulation numérique permet également d'étudier ces propriétés. Neophytou *et al.* [130] montrent que la vitesse de flamme est maximale quand la richesse du mélange gazeux est proche de 1. En amont de la flamme, la richesse gazeuse est quasi-nulle, le carburant étant essentiellement liquide. La richesse effective dans la flamme dépend alors du rapport entre un temps caractéristique de transfert entre richesse liquide Φ_l et gazeuse Φ_g , et un temps caractéristique de la flamme. Plus récemment, Wacks *et al.* [198] ont étudié les effets de l'intensité de la turbulence, du diamètre des gouttes et de la richesse sur les interactions entre des gouttes monodisperses et des flammes planes à partir de simulations DNS pour la phase porteuse. Ils ont notamment montré que les gouttes peuvent entraîner une augmentation de l'épaisseur de la flamme. Ils observent également que la vitesse de flamme laminaire est généralement plus faible en présence de gouttes comparé à un cas purement gazeux. Néanmoins, d'autres études ont montré que la vitesse de flamme peut être accélérée par des

effets chimiques locaux [130] ou par un effet d'expansion des gaz dû à l'évaporation, qui ajoute localement de la masse sous forme gazeuse, initialement sous forme liquide. Aussi, la problématique consistant à déterminer la vitesse laminaire de flamme diphasique reste encore aujourd'hui une question ouverte.

1.2.3 Couplage turbulence/combustion

La combustion dans un écoulement laminaire constitue en soi un processus complexe où des milliers de réactions peuvent faire réagir des centaines d'espèces avec des échelles de temps et d'espace très variables. Lorsqu'une flamme interagit avec un écoulement turbulent, sa structure se trouve modifiée en fonction du rapport d'échelles turbulence-chimie : celle-ci se plisse, augmentant ainsi la surface de la flamme et la vitesse globale de flamme. Il en résulte une relation entre la vitesse turbulente de flamme S_T et le plissement de la surface de flamme pour des flammes prémélangées, proposée par Damköhler [52] :

$$\frac{S_T}{S_L^0} \simeq \frac{A_T}{A_L} \quad (1.5)$$

où A_L et A_T sont les surfaces de flamme correspondant aux flammes laminaire et turbulente respectivement. Le rapport A_T/A_L est le facteur de plissement de la flamme Ξ . Mais la turbulence peut aussi provoquer l'extinction locale lorsque l'étirement local atteint l'étirement d'extinction.

Si la turbulence modifie le front de flamme, la flamme elle-même modifie l'écoulement turbulent principalement par deux processus aux effets opposés. D'un côté, l'expansion des gaz chauds issus de la flamme conduit à une accélération de l'écoulement au niveau de la flamme. Les gradients de vitesse ainsi créés peuvent alors engendrer la création de tourbillons du côté des gaz brûlés [129]. D'un autre côté, la température des gaz chauds conduit à l'augmentation de la viscosité et donc une réduction du nombre de Reynolds. Ainsi, selon les cas, la compétition entre ces deux processus peut aussi bien générer de la turbulence (appelée alors "flame-generated turbulence" [97]) que l'atténuer (re-laminarisation par la combustion [113]).

Pour étudier les interactions entre la turbulence et la combustion, une évaluation des échelles temporelles et spatiales caractéristiques de chacun des phénomènes est nécessaire afin de distinguer différents régimes de combustion turbulente. Les nombres adimensionnés de Damköhler, noté Da , et de Karlovitz, noté Ka , sont ainsi respectivement définis comme le rapport entre un temps caractéristique turbulent lié aux grandes échelles τ_m et un temps

chimique τ_c d'une part, et le rapport entre ce même temps chimique et l'échelle de temps de Kolmogorov τ_k d'autre part.

$$Da = \frac{\tau_m}{\tau_c} \qquad Ka = \frac{\tau_c}{\tau_k} \qquad (1.6)$$

- Lorsque $Da \gg 1$, le temps chimique est bien inférieur au temps turbulent et la zone de flamme peut être considérée comme infiniment fine. La structure interne de la flamme est peu affectée par la turbulence, et peut être considérée similaire à la structure d'une flamme laminaire : on parle alors de flammelles.
- A l'inverse, pour $Da < 1$, la chimie est suffisamment lente pour que le mélange des réactifs et des produits par la turbulence ait un impact sur la structure de la flamme.

On introduit également le nombre de Karlovitz Ka_r basé sur l'épaisseur de la zone de réaction δ_r de façon à distinguer les effets de la turbulence sur la structure interne de la flamme (i.e. la zone de réaction) des effets de la turbulence sur la flamme entière (incluant la zone de préchauffage et la zone post-flamme) :

$$Ka_r = \left(\frac{\delta_r}{l_k} \right)^2 \qquad (1.7)$$

où l_k représente l'échelle de Kolmogorov. Ces nombres adimensionnés peuvent être utilisés pour définir différents régimes de combustion turbulente. Borghi puis Peters [142] proposent ainsi une classification des différentes structures de flammes turbulentes en régime de prémélange en fonction de ces derniers (Fig. 1.16).

Sur ce diagramme, on distingue différents régimes de combustion suivant le nombre de Karlovitz, le nombre de Reynolds turbulent ainsi que le nombre de Damköhler.

- **Ka < 1 - Régime de flammelles** : l'épaisseur de la flamme est plus petite que les plus petites structures turbulentes qui ne peuvent pas pénétrer la flamme. Dans ce régime, le front de flamme est fin et sa structure interne est proche de celle d'une flamme laminaire. Deux sous-divisions peuvent être proposées selon la valeur du rapport des vitesses $u'(l_t)/S_l$.

1. **flammelles plissées (wrinkled flames)** : les structures turbulentes sont trop faibles pour plisser la flamme et interagir avec sa structure. La flamme n'est que faiblement courbée et sa structure peut être associée à celle d'une flamme laminaire.

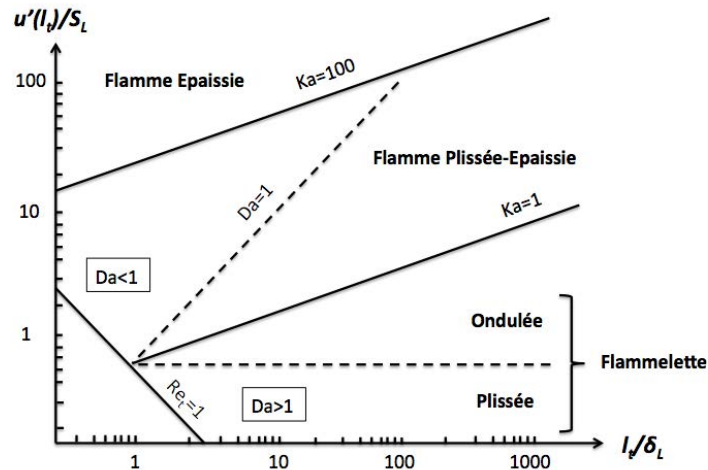


Figure 1.16 – Diagramme des régimes de combustion turbulente prémélangée (adapté de [142]).

2. **flammelettes ondulées (corrugated flames)** : dans cette situation le régime de flammelettes est toujours valide mais les plus grosses structures turbulentes deviennent capables d’interagir avec la flamme et peuvent mener à la formation de poches.

- **$1 < Ka < 100$ - Régime de flamme épaissie-plissée (Thickened-wrinkled / Reaction sheet)** : dans ce cas, les plus petits tourbillons (de taille l_k) sont plus petits que l’épaisseur de la flamme δ_L ($Ka_r > 1$) et peuvent interagir avec la zone de préchauffage, augmentant par conséquent les transferts massiques et thermiques. La zone de préchauffage est alors épaissie au contraire de la zone de réaction qui reste plus petite que l’échelle de Kolmogorov ($Ka_r < 1$) et qui n’est par conséquent pas affectée et reste continue.
- **$Ka > 100$ - régime de flamme épaissie** : l’échelle de Kolmogorov l_k est plus petite que l’épaisseur de la zone de réaction. La zone de préchauffage ainsi que la zone de réaction sont alors fortement affectées par la turbulence. Aucune structure de flamme laminaire ne peut être identifiée.

Pour les flammes non prémélangées, une telle classification est plus délicate parce qu’une flamme de diffusion ne se propage pas et ne possède pas d’épaisseur fixe (voir Chapitre 6). Par conséquent, celle-ci repose principalement sur la comparaison des échelles de temps caractéristiques de la turbulence et de la chimie avec le nombre de Damköhler Da . Lorsque le nombre de Damköhler est petit ($Da < 1$), les échelles de la turbulence et la longueur de mélange sont plus petits que l’épaisseur de la flamme. Ces petits tourbillons intensifient

le transport turbulent, et donc le mélange dans la zone de réaction. Ce régime est appelé régime de zones de réaction distribuées. Au contraire, si la combustion est rapide comparée au mélange, le nombre de Damköhler est grand ($Da > 1$) et l'effet de la turbulence sur la structure de flamme est faible. La structure locale de flamme est identique à celle d'une flamme laminaire : c'est le régime de flammelettes. Ces deux régimes sont représentés schématiquement sur la Fig. 1.17. Une comparaison d'échelles spatiales peut aussi être faite en utilisant l'échelle intégrale de la turbulence l_t et l'épaisseur diffusive de la flamme δ_d qui est étirée par l'étirement local. Si on fait l'hypothèse que la flamme est étirée à l'échelle de Kolmogorov [146], qui correspond à l'étirement maximal, alors l'épaisseur diffusive est contrôlée par les plus petits tourbillons et on peut écrire $Re_t = (l_t/\eta_k)^{(4/3)} \approx (l_t/\delta_d)^{(4/3)}$. Comme le rapport des temps caractéristiques de la turbulence est proportionnel à $Re_t^{1/2}$, on introduit comme pour les flammes de prémélange un nombre de Damköhler pour la grande échelle Da et un nombre de Damköhler pour la petite échelle Da^{fl} , vérifiant $Da = Re_t^{1/2} Da^{fl}$.

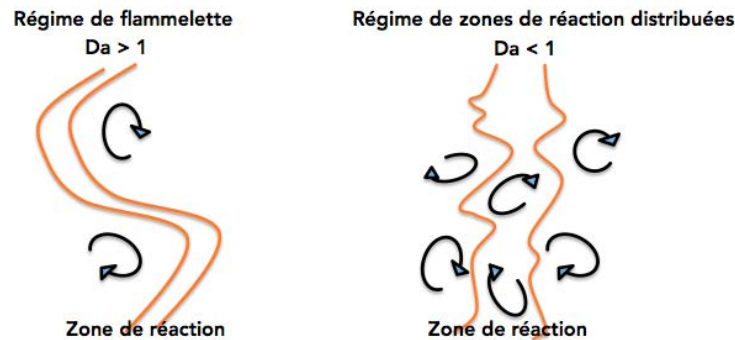


Figure 1.17 – Effet de la turbulence sur la structure de la zone de réaction d'une flamme non prémélangée.

Il est possible de classer les régimes de combustion en fonction des nombres de Damköhler et Reynolds dans un diagramme $\log\text{-}\log(Da, Re_t)$ (Fig. 1.18). Quand la chimie est suffisamment rapide (grandes valeurs de Da), la flamme a une structure de flamme laminaire et le régime est dit de "flammelette". Cette condition est délimitée par la droite $Da^{fl} = Da^{LFA}$ où Da^{LFA} est une valeur seuil. Les extinctions se produisent pour des temps chimiques grands, quand $Da^{fl} < Da^{ext}$. Entre ces deux limites, le temps chimique devient non négligeable devant le temps caractéristique de l'écoulement et les effets instationnaires deviennent importants. Toutefois, ce type de diagramme reste qualitatif d'autant plus que pour un vrai brûleur, les conditions locales de l'écoulement sont susceptibles de varier énormément d'une

position à une autre. Une analyse plus détaillée des quantités et échelles liées aux flammes de diffusion est proposée dans le Chapitre 6.

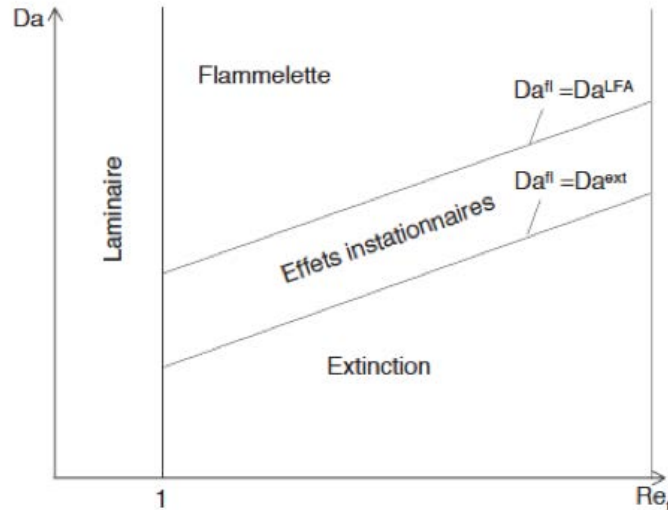


Figure 1.18 – Représentation schématique des régimes de combustion turbulente non prémélangée [49].

1.3 La recherche en combustion diphasique

Même si la combustion diphasique apparaît dans une grande majorité d'applications, la proportion des recherches en combustion diphasique représente moins de 5% des articles en relation à la combustion (selon une analyse sur ISI Web of Knowledge de 1900 à mai 2014). Cette thématique a en effet longtemps représenté un challenge, la présence de gouttes représentant un obstacle aussi bien du côté expérimental que numérique. Avec l'amélioration des techniques de mesures optiques et l'augmentation des capacités de calcul, le nombre de publications traitant des flammes n'a cessé d'augmenter durant ces dernières décennies, montrant de réelles perspectives de progrès dans ce domaine. Cette évolution est illustrée en Fig. 1.19. Dans la suite, les techniques expérimentales permettant la caractérisation des sprays sont brièvement évoquées et les différentes approches de modélisation de la phase liquide sont décrites.

1.3.1 Caractérisation expérimentales d'un spray turbulent réactif

Les mesures expérimentales sont essentielles dans l'étude des sprays turbulents réactifs. D'une part, elles permettent la visualisation de phénomènes physiques jusqu'alors peu ou pas connus. D'autre part, elles fournissent des données précises, utiles dans le développement

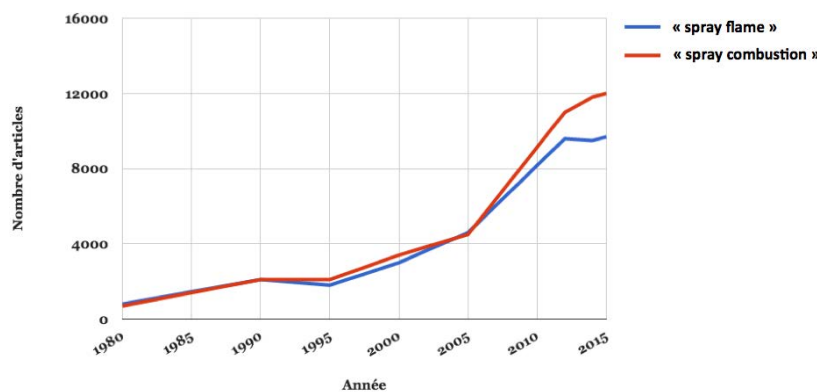


Figure 1.19 – Estimation du nombre de publications liées à la combustion diphasique durant ces dernières années (Google Scholar).

de modèles numériques. Les grandeurs d'intérêt pour la phase dispersée sont principalement la vitesse des particules, leur taille et leur ségrégation, ainsi que leur température. Il existe un grand nombre de techniques permettant la caractérisation expérimentale de ces grandeurs, principalement pour la vitesse et la taille de gouttes. Une revue de l'état de l'art de la granulométrie laser en mécanique des fluides est réalisée par Onofri [133].

- **Mesures de la vitesse des gouttes :** comme pour la phase gazeuse, la Vélocimétrie par Images de Particules (PIV) et la Vélocimétrie Laser par effet Doppler (LDV) peuvent être utilisées afin de caractériser la vitesse des gouttes, celles-ci faisant office d'ensemencement. Comme la présence des gouttes du spray perturbe la mesure de vitesse des particules de la phase gazeuse, la principale difficulté consiste alors à obtenir simultanément les vitesses de la phase liquide et de la phase gazeuse, et donc une estimation de la vitesse relative des deux phases. Il existe globalement deux méthodes pour avoir accès simultanément à la vitesse des deux phases. La première consiste à séparer les phases par traitement de l'image, après acquisition, sur des critères de taille ou d'intensité. La seconde méthode repose sur l'utilisation de plusieurs caméras afin d'avoir une image pour chaque phase individuellement.
- **Mesures de la taille des gouttes :** la PIV diphasique donne également accès à la taille des gouttes. Pour la mesure de taille, la donnée importante est la phase du signal recueilli en fonction de la position du détecteur dans l'espace entourant la goutte. Celle-ci dépend du diamètre de la particule, supposée sphérique, et de son indice de réfraction [6]. Dans les techniques permettant de mesurer la taille des gouttelettes et au moins deux composantes de la vitesse, on peut également citer la technique ponctuelle d'Interférométrie Phase Doppler (PDI, ou PDA ou PDPA pour Phase Doppler Particle Analyser). Son principe est identique à celui de la LDV, pour

la mesure de vitesse. La technique de PDI (Particle/Droplet Imaging Technique) [171] permet d'avoir des informations supplémentaires sur la forme des gouttes, ce qui est très utile dans les premières phases d'atomisation où les effets de distortion des gouttes sont importants.

- **Mesures de la température des gouttes :** peu de méthodes existent pour mesurer les propriétés thermochimiques des gouttes ainsi que leur température. On peut néanmoins citer la technique Arc-en-ciel globale (GRT pour Global Rainbow Technique) basée sur la mesure de l'indice de réfraction des gouttes qui a été appliquée avec succès dans plusieurs études impliquant des sprays réactifs [110, 112, 160]. Néanmoins, des études plus nombreuses sont nécessaires afin d'évaluer sa validité et sa précision dans des conditions variées.

1.3.2 Simulations numériques de spray

Si les mesures expérimentales sont indispensables à la compréhension de phénomènes physiques, celles-ci ne sont pas suffisantes pour les caractériser de manière complète. A ce titre, la simulation numérique des écoulements fluides ou CFD (Computational Fluid Dynamics) joue un rôle prédominant et est totalement complémentaire des expériences. Du point de vue de l'industrie, le recours à la CFD est encouragé par la puissance continuellement grandissante des machines de calcul permettant d'effectuer des calculs avec des temps de retour de plus en plus acceptables même sur des configurations complexes, et ce, en prenant en compte toujours plus de phénomènes physiques. Cela permet en outre de partiellement s'affranchir d'un certain nombre d'expériences au coût élevé prohibitif et dont les mesures à des conditions opératoires de pression et température particulières sont parfois délicates. Les méthodes numériques pour la simulation des écoulements diphasiques se distinguent principalement en deux groupes :

- **Les méthodes Lagrangiennes** qui consistent à suivre la trajectoire de chaque particule de façon individuelle dans le domaine du calcul.
- **Les méthodes Eulériennes** qui traitent la phase liquide comme des milieux continus.

Ces méthodes considèrent la phase dispersée comme des particules dont le rayon, la température, la vitesse et la concentration peuvent évoluer en fonction des efforts et des échanges avec la phase porteuse.

1.3.2.1 Approches Lagrangiennes

Les méthodes Lagrangiennes consistent à suivre la trajectoire de chaque particule de façon individuelle dans le domaine du calcul. Pour cela, les équations de la mécanique du point pour les particules soumises aux forces exercées par le fluide porteur sont résolues. Les particules peuvent désigner des particules réelles ou des ensembles de particules réelles (particules numériques) relativement proches et ayant les mêmes propriétés. Dans ce cas, on parle de méthode Lagrangienne **déterministe**. Celle-ci est décrite de manière détaillée dans le cadre de la LES dans le Chapitre 4.

Comme la position des gouttes ne coïncide pas nécessairement avec le maillage, les propriétés du fluide doivent être interpolées à la position de la particule avec une précision suffisante. Dans le cas de la LES, seules les grandeurs filtrées de la phase gazeuse sont disponibles et les effets des échelles de sous-maille doivent être reconstruits. Pour des nombres de Stokes $S_t > 5$, il n'est pas nécessaire d'introduire de modèle supplémentaire. Pour $S_t > 0.5$, la turbulence de sous-maille peut être réintroduite par le biais d'une approche Lagrangienne stochastique [17, 55, 93, 150]. Les méthodes Lagrangiennes stochastiques considèrent non pas les particules réelles de l'écoulement, mais un grand nombre de particules fictives ou stochastiques. Ce type d'approche conduit à la résolution d'une équation d'évolution d'une fonction de probabilité de présence des gouttes sur le domaine. La grande dimensionalité de cette équation ne permettant pas une résolution directe, des méthodes de type Monte-Carlo sont utilisées en pratique [92, 149]. Pour $S_t < 0.5$, d'autres approches plus complexes sont nécessaires [168]. Dans la pratique, les effets des échelles de sous-maille sur la dynamique du spray sont souvent négligés.

Les problématiques liées au formalisme Lagrangien sont multiples. Tout d'abord, ce type de méthode est plus particulièrement adapté pour traiter les régimes de spray dilués dans la mesure où le coût de calcul est directement lié au nombre de particules. En outre, une des faiblesses de formalisme vient du nombre de particules par cellule nécessaire pour atteindre une convergence statistique suffisante [195]. Une autre faiblesse du formalisme Lagrangien vient de la difficulté à paralléliser les calculs à la fois pour la phase dispersée et la phase porteuse de manière efficace. En effet, en général, le partitionnement du domaine de calcul se fait en fonction du maillage Eulérien. Néanmoins, pour une simulation Euler/Lagrange, l'ajout de particules évoluant dans le domaine induit un coût CPU supplémentaire. Ce coût est à peu près proportionnel au nombre de particules si l'on néglige les interactions entre les particules. Les particules n'étant généralement pas uniformément réparties dans la chambre, un déséquilibre de charge peut apparaître, induisant une diminution de l'efficacité du calcul en termes de temps restitution, car la charge est mal répartie entre les processeurs et certains doivent attendre les résultats des autres. De plus, comme les parti-

cules interagissent avec la phase gazeuse, il est nécessaire que les particules soient traitées par le même processeur que la cellule qui les contient pour éviter des communications supplémentaires. Pour faire face à ce problème, il est possible d'effectuer un partitionnement à double contrainte, prenant en compte à la fois le maillage Eulérien et la position des particules qui forment une grille Lagrangienne.

1.3.2.2 Approches Eulériennes

Les méthodes Eulériennes ne cherchent pas à déterminer les propriétés de chaque particule mais à résoudre la phase dispersée de façon statistique via une fonction de densité de nombre (NDF pour Number Density Function) qui désigne la probabilité de trouver une particule à une certaine position de l'espace de phase, les dimensions de cet espace étant la position, la vitesse, la taille, la température, etc... de la particule. Le spray est ainsi traité comme un milieu continu constitué des propriétés moyennes locales de l'ensemble des particules, au même titre que le gaz est une description continue de l'ensemble des molécules qui le constituent. La NDF est solution d'une équation d'équilibre appelée Population Balance Equation (PBE) ou équation de Williams-Boltzmann [206]. La résolution directe de cette équation n'est en pratique pas possible du fait de sa grande dimensionalité. L'approche la plus commune est d'utiliser la méthode des moments qui consiste à intégrer la PBE sur l'espace des vitesses afin de reconstruire la NDF à partir des moments [170]. Cette approche nécessite des modèles de fermeture qu'on peut globalement classer en deux catégories :

- Les modèles pour des nombres de Stokes $S_t < 1$: lorsque les particules ne se croisent pas, l'hypothèse selon laquelle les particules à une même position donnée ont la même vitesse est valide [106]. Une telle distribution peut être déterminée en utilisant uniquement les moments d'ordre 0 et 1 (densité et quantité de mouvement) :
 - **Dusty gases** [34] : la vitesse de la phase liquide est identique à la vitesse du gaz.
 - **Approche "Equilibrium Eulerian"** [62] : la vitesse de la phase liquide est exprimée comme une fonction de la vitesse du gaz par développement de Taylor autour de celle-ci [61].
 - **Approche "Monokinetic"** [106] : la vitesse de la phase liquide est déterminée à l'aide d'une seule équation supplémentaire pour la quantité de mouvement des particules.

- Les modèles pour des nombres de Stokes $S_t > 1$: dans ce cas, les trajectoires des particules sont susceptibles de se croiser. La distribution de vitesse ne peut alors plus être représentée par une fonction Dirac et des moments d'ordre élevés sont nécessaires. Plusieurs méthodes sont disponibles dans la littérature :
 - **Algebraic-Closure-Based Moment Methods** [3, 125] : fermeture algébrique reposant sur des arguments physiques.
 - **Kinetic Based Moment Method** : une forme présumée de la NDF est utilisée afin de fermer le système. Celle-ci peut être de type gaussienne [96, 159] ou anisotropie [193].

D'un point de vue pratique, l'approche Euler-Euler semble plus adaptée dans le cas de régimes de sprays denses pour lequel l'hypothèse de milieu continu pour la phase liquide est plus réaliste. Dans ce cas, l'utilisation d'une approche Euler-Lagrange serait plus coûteuse du fait du grand nombre de particules et nécessiterait des modèles Lagrangiens complexes spécifiques pour prendre en compte les interactions inter-gouttes (collisions/coalescence...). Néanmoins, cet avantage est contrebalancé par le coût supplémentaire induit par la prise en compte de la polydispersion avec le formalisme Euler-Euler. En effet, une des faiblesses des méthodes Eulériennes réside dans leur difficulté à modéliser les sprays polydispersés, c'est-à-dire présentant une distribution de diamètres de gouttes à chaque position. Pour pallier cette difficulté, une méthode sectionnelle a été introduite par Laurent et Massot [106] dans laquelle le spray est divisé en sections contenant chacune une classe de diamètre, chaque section nécessitant son propre jeu d'équations Eulériennes.

Le tableau 1.20 résume les principaux avantages et inconvénients des approches Lagrangiennes et Eulériennes. Dans cette thèse l'approche utilisée est une approche Euler-Lagrange déterministe (voir Chapitre 3). Cette approche a notamment été choisie pour la prise en compte aisée de la polydispersion du spray. De plus, les écoulements simulés étant principalement réactifs, le nombre de gouttes dans le domaine reste raisonnable en raison de l'évaporation des gouttes.

1.3.3 Configurations classiques pour l'étude de spray réactifs

Des configurations académiques...

Jusqu'à récemment, les seules études numériques portant sur les flammes diphasiques se concentraient principalement sur des configurations académiques pour des raisons de coût de calcul et de définition du problème aux conditions limites. Parmi les configurations

	Euler-Lagrange	Euler-Euler
Avantages	<ul style="list-style-type: none"> - Polydispersion inhérente - Numériquement robuste - Implantation intuitive des mécanismes physiques 	<ul style="list-style-type: none"> - Adapté aux sprays denses - Coût CPU indépendant de N - Parallélisation aisée
Inconvénients	<ul style="list-style-type: none"> Coût CPU dépendant de N - Possible déséquilibre de charge - Localisation des particules difficile en non structuré - Convergence statistique 	<ul style="list-style-type: none"> - Polydispersion coûteuse - Efforts de modélisation et numériques importants - Croisements de trajectoires de particules difficiles à décrire - Convergence en maillage

Figure 1.20 – Avantages et inconvénients des formalismes Euler-Lagrange et Euler-Euler. N désigne le nombre de particules.

classiques, on trouve des études de combustion de nuages de gouttes placées dans des conditions homogènes et/ou un écoulement à vitesse moyenne nulle telle qu’une Turbulence Homogène Isotrope (THI) [22, 124]. On peut par exemple citer les travaux de Réveillon et Dumoulin [154] portant sur les effets de la ségrégation préférentielle des gouttes sur l’évaporation et la combustion dans une turbulence homogène isotrope. Wang et Rutland [201] ont étudié les effets de la température et de la richesse sur l’allumage d’un spray de n -heptane dans un écoulement turbulent 2D. Une étude de Wang *et al.* [199] a permis la caractérisation des effets de la turbulence et de la taille de gouttes sur la combustion d’un spray de n -heptane. Un paramètre caractérisant la part de combustion prémélangée par rapport à la combustion non prémélangée est analysé et il en ressort que la fraction de combustion prémélangée augmente avec l’intensité de la turbulence et diminue avec la taille des gouttes. Dans le même esprit, certaines analyses consistent à étudier de façon paramétrique un jet évoluant temporellement ou une couche de mélange [202]. Une étude récente d’Abdelsamie et Thévenin [1] sur une configuration de jet périodique avec des gouttes d’ n -heptane montre notamment l’effet du cisaillement sur l’évaporation, le mélange et l’allumage. Une étude paramétrique sur la taille de goutte, la richesse locale et la vitesse du jet montre que le délai d’autoallumage et la vitesse de consommation dépendent fortement de la taille de goutte et de la vitesse du jet mais est indépendante de la richesse locale.

La configuration de flamme à contre-courant représente un autre type de configuration académique où la flamme peut être étudiée dans un état stationnaire. Celle-ci a longtemps été étudiée en monophasique et a également fait l’objet de travaux en présence de sprays. Une revue détaillée des flammes diphasiques sur ce type de configuration a été faite par Li [114]. Kee *et al.* [99] ont par exemple étudié l’interaction des gouttes et de la flamme dans le cadre de flammes de spray à contre-courant avec différents carburants complexes et des chimies détaillées. Ils montrent ainsi que les propriétés thermophysiques du carburant influencent grandement le comportement des gouttes mais peu la flamme. Ils observent éga-

lement que le fait d'augmenter la pression amincit la flamme mais modifie peu sa position. Continillo et Sirignano [43] ont effectué des calculs de flammes de spray monodisperse à contre-courant avec de l'octane et distinguent des zones de prémélange et de diffusion. La taille initiale des gouttes et l'étirement se confirment être des paramètres clés. Une augmentation de la taille initiale des gouttes tend à causer une séparation de la flamme en une zone prémélangée et une zone de diffusion, tandis qu'une augmentation de l'étirement tend à amincir la flamme et à empêcher une telle séparation. Gutheil et Sirignano [73] ont réalisé le même type d'étude pour des taux d'étirement élevés dans des cas où les gouttes ne s'évaporent pas totalement avant la flamme. Il met ainsi en évidence l'apparition d'un phénomène d'oscillations ("push-back") des gouttes autour du plan de stagnation. Ce type de phénomène est également identifié dans les simulations de Chen *et al.* [36]. Massot et Laurent [107, 127] ont réalisé des études expérimentales et numériques de ce type de configuration avec de l'heptane pour différents étirements et une chimie détaillée. Des travaux similaires incluant les effets de Soret ont été réalisés par Dakhli *et al.* [51] qui ont conclu que leur influence est négligeable. Plus récemment, Vié *et al.* [194] ont réalisé une étude DNS 3D d'une flamme de spray à contre-courant et ont observé un phénomène de bifurcation de la structure de flamme qui pouvait exhiber une zone de réaction simple ou double suivant l'étirement local et la taille des gouttes.

...aux configurations complexes

Bien que très utiles à la compréhension de la structure des flammes diphasiques, les configurations académiques ne sont pas suffisantes pour l'application directe à des cas industriels. Pour cela, des configurations de complexité intermédiaires doivent faire l'objet du même type d'analyse. Ces configurations consistent généralement en des expériences à l'échelle du laboratoire et dont les conditions opératoires sont très proches de celles rencontrées dans les vrais moteurs. Ces dernières années, de plus en plus de bancs expérimentaux dotés de dispositifs de mesures adaptés aux flammes de spray voient le jour, permettant ainsi le développement des méthodes de simulation numérique. Parmi les études numériques récentes, on peut citer les travaux LES portant sur le brûleur *n*-heptane/air swirlé de Cambridge [138] où une structure de flamme en forme de "M" a pu être analysée, permettant ainsi l'observation de différents régimes de combustion, dont la combustion de gouttes isolées. Le groupe de Jones *et al.* [94] a obtenu des résultats satisfaisants en terme de dispersion et distribution de taille de goutte et de vitesse pour une configuration de brûleur diphasique méthanol/air non swirlé avec une injection de type *pressure swirl*, en utilisant une méthode LES stochastique eulérienne pour prendre en compte les interactions chimie turbulence. Hu *et al.* [79] ont également employé une méthode stochastique, de type Euler-Lagrange, afin de simuler une flamme de spray éthanol/air. Dans cette méthode, la dissipation scalaire est décrite par une équation de transport supplémentaire et la combustion est modélisée par tabulation de flammelettes incluant l'évaporation. Ma et Roekearts [119] ont étudié la struc-

ture des flammes multiples rencontrées en combustion diphasique dans le cas d'un brûleur diphasique éthanol/air de Delft. Dans cette configuration, ils ont pu faire varier la nature de l'écoulement co-courant via sa température et montrent que des structures de flamme similaires peuvent être obtenues avec des conditions très différentes, tant que les échelles de temps caractéristiques d'évaporation sont identiques. Giusti *et al.* [68] ont réalisé des simulations LES d'une flamme éthanol/air swirlée diphasique dans des conditions proches de l'extinction. Dans cette étude, la combustion est traitée avec le modèle CMC, une chimie détaillée et une équation de transport de variance de la fraction de mélange de sous-maille avec un terme prenant en compte l'interaction avec le spray. Les études paramétriques portant sur la nature complexe des carburants sont de plus en plus nombreuses. L'impact du type de carburant liquide a été étudié par Ranjan *et al.* [152] dans la configuration LDI (Lean Direct Injector) swirlée diphasique développée à l'Université de Sydney [32] pour des conditions atmosphériques en utilisant une approche numérique de type Euler-Lagrange. Les différences observées en terme de dynamique, de régime de combustion et de statistiques concernant le spray sont attribuées principalement aux propriétés du carburant liquide ainsi qu'à la cinétique chimique. Récemment, Stagni *et al.* [179] ont montré que la composition multiple du carburant joue un rôle important dans la réactivité de la phase gazeuse et le temps d'autoallumage en raison d'effets d'évaporation préférentielle.

1.4 Objectifs et plan du manuscrit

Durant les vingt dernières années, le CERFACS s'est forgé une expertise dans la Simulation aux Grandes Echelles de systèmes réactifs. L'étude des écoulements diphasiques a tout d'abord débuté avec les travaux de Pascaud [136], Riber [156] et Sanjosé [161] dans laquelle la phase liquide était traitée avec le formalisme Eulérien. La mise en place du formalisme Lagrangien dans AVBP a commencé avec les travaux de Garcia [65] en 2006 sur la modélisation de la dynamique du spray. Jaegle [85] a introduit la prise en compte de l'évaporation du spray et réalisé les premières simulations LES-DPS réactives avec AVBP. Depuis lors, la méthodologie LES-DPS n'a cessé d'évoluer pour incorporer de plus en plus de physique, allant de la méthode d'injection [167] du spray à l'amélioration des modèles d'évaporation [169]. Plus récemment, Paulhiac [137] a développé une méthodologie pour modéliser le régime de combustion de goutte isolée dans le cadre de la LES-DPS.

La multitude de travaux et de thèses réalisés sur ces dernières années montre que la recherche sur les écoulements diphasiques réactifs s'est accélérée, conséquence d'un réel besoin de l'industrie. Les calculs LES diphasiques, bien que non systématiques, sont devenus réalisables par les industriels démontrant que la méthodologie LES-DPS a atteint un niveau de maturité suffisant en terme de technique mais aussi en terme de coût de calcul. Il n'en reste pas moins qu'il manque encore à ce jour une caractérisation fine de

la prédictivité de ces méthodes. Il s'agit d'une étape charnière avant de pouvoir aborder l'étude de phénomènes plus complexes tels que l'effet de la phase liquide sur l'allumage et l'extinction ainsi que sur les émissions de polluants. Le développement de configurations expérimentales caractérisées de façon précise et complète à la fois pour la phase gazeuse et la phase liquide permettent aujourd'hui un tel niveau de validation.

Par ailleurs, la simulation de configurations diphasiques implique de pouvoir modéliser correctement tous les régimes de combustion : prémélangé, partiellement prémélangé et non-prémélangé. Dans toutes les études du CERFACS citées précédemment, la combustion est modélisée avec l'approche de flamme épaissie développée au CERFACS. Cette approche a montré des résultats satisfaisants sur des configurations relativement complexes [21, 166]. Néanmoins, son utilisation n'est pas justifiée théoriquement dans le cas des flammes de diffusion, dont les mécanismes sont totalement différents des flammes prémélangées.

L'objectif principal de cette thèse est de consolider la méthodologie LES-DPS pour la simulation de flamme de spray afin de mieux comprendre leur structure complexe ainsi que les mécanismes les contrôlant. Pour ce faire, une étude en deux parties a été réalisée. Dans une première étape, une flamme de spray bien caractérisée expérimentalement a été simulée et analysée pour répondre aux besoins de validation mentionnés plus haut. Dans une seconde étape, une étude des flammes de diffusion laminaires et turbulentes dans l'approche LES est réalisée, afin de jeter les bases d'une modélisation compatible avec la méthode de flamme épaissie. Le manuscrit est construit de la façon suivante :

La **partie II** est consacrée à la formulation des équations pour la LES-DPS. Le formalisme de la LES est présenté pour la phase gazeuse. Les équations et modèles décrivant l'évolution de la phase dispersée sont décrites dans un second temps. Dans la **partie III**, une étude LES-DPS du brûleur diphasique est présentée, d'abord dans sa configuration non confinée et non swirlée puis dans une configuration confinée et swirlée. Les résultats sont validés et analysés en détail à partir de comparaisons avec les données expérimentales. La flamme de spray exhibe clairement des zones de prémélange et de diffusion bien distinctes. Aussi, la **partie IV** décrit le développement d'une méthodologie afin de modéliser la combustion non-prémélangée. Celle-ci est basée sur une analyse des mécanismes contrôlant une flamme de diffusion. Cette méthodologie est construite et appliquée à trois configurations de complexité croissante. Le premier cas consiste en une flamme à contre-courant axisymétrique laminaire. Le second cas est une flamme de diffusion turbulente 3D dans une turbulence homogène isotrope forcée. Le dernier cas test est la flamme jet turbulente stationnaire de la configuration SANDIA-D.

Deuxième partie

Équations et modèles pour les écoulements turbulents diphasiques réactifs pour la LES

Equations et modèles pour la phase gazeuse

Sommaire

2.1	Equations de conservation	45
2.2	Loi d'état et propriétés de transport	48
2.3	Cinétique chimique	50
2.4	Le concept de la LES	51
2.5	Equations de conservation pour la LES	55
2.6	Termes non fermés	58
2.7	Modèles de sous-maille	59
2.8	Modèles de combustion	61
2.8.1	<i>Les approches géométriques</i>	61
2.8.2	<i>Les approches statistiques</i>	63
2.8.3	<i>L'approche de flamme épaissie artificiellement (TFLES)</i>	64

Ce chapitre présente dans un premier temps les équations décrivant un écoulement multi-espèces turbulent réactif gazeux (Sections 2.1, 2.2). Les difficultés pour résoudre ces équations, principalement liées à la résolution de la turbulence, ainsi que les principales approches permettant de la simuler, sont abordées en Section 2.4. La Simulation aux Grandes Echelles (LES) adoptée dans cette thèse est présentée plus en détail et les équations obtenues par procédure de filtrage des équations de Navier-Stokes sont décrites en Section 2.5. Le filtrage fait apparaître des termes non fermés à modéliser. Les modèles nécessaires à la fermeture de ces équations sont présentés en Section 2.6. En particulier, les principaux modèles pour gérer le terme source réactif sont abordés en Section 2.8.

2.1 Equations de conservation

Un écoulement turbulent réactif est régi selon un système de $2 + D + N$ équations où D représente la dimension du problème et N le nombre d'espèces composant le fluide. Ces

équations représentent des principes de conservation de la masse, de la quantité de mouvement, des espèces et de l'énergie totale. Dans la suite, les notations suivantes sont adoptées :

- ρ : masse volumique du fluide
- u : vitesse
- P : pression statique
- Y_k : fraction massique de l'espèce k

Conservation de la masse

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial \rho u_i}{\partial x_i} = 0 \quad (2.1)$$

Conservation de la quantité de mouvement

$$\frac{\partial \rho u_i}{\partial t} + \frac{\partial (\rho u_i u_j)}{\partial x_j} = -\frac{\partial}{\partial x_j} [P \delta_{ij} - \tau_{ij}] \quad (2.2)$$

avec δ_{ij} le symbole de Kronecker et τ_{ij} le tenseur des contraintes visqueuses défini pour un fluide newtonien par :

$$\tau_{ij} = 2\mu \left(S_{ij} - \frac{1}{3} \delta_{ij} S_{ll} \right) \quad (2.3)$$

où S_{ij} désigne le tenseur de déformations $S_{ij} = \frac{1}{2} (g_{ij} + g_{ji})$, correspondant à la partie symétrique du tenseur de gradient de vitesse $g_{ij} = \partial u_i / \partial x_j$ et μ la viscosité dynamique du fluide dont la modélisation est décrite en Section 2.2.

Conservation des espèces

Pour un fluide contenant k espèces, la conservation de chaque espèce s'écrit :

$$\frac{\partial \rho Y_k}{\partial t} + \frac{\partial \rho Y_k u_i}{\partial x_i} = -\frac{\partial J_{ik}}{\partial x_i} + \dot{\omega}_k \quad (2.4)$$

où le terme $\dot{\omega}_k$ est un terme source lié à la consommation et à la production d'espèces lors de la combustion. Ce terme est décrit en Section 2.3. J_{ik} représente le flux diffusif de l'espèce k :

$$J_{ik} = \rho V_{ik} Y_k \quad (2.5)$$

V_{ik} est la $i^{\text{ème}}$ composante de la vitesse de diffusion de l'espèce k . Le calcul exact des vitesses de diffusion étant complexe et coûteux [56], l'approximation de Hirshfelder et Curtiss [78] est généralement utilisée et permet d'exprimer ce flux à partir des gradients de fractions molaires d'espèces X_k et de leurs coefficients de diffusion moléculaire D_k :

$$J_{ik} = -\rho D_k \frac{W_k}{W} \frac{\partial X_k}{\partial x_i} \quad (2.6)$$

où D_k représente le coefficient de diffusion de mélange de l'espèce k qu'on peut exprimer en fonction des coefficients de diffusion binaires $D_{j,k}$ en s'appuyant sur la théorie cinétique des gaz [18] :

$$D_k = \frac{1 - Y_k}{\sum_{j \neq k} X_j / D_{j,k}} \quad (2.7)$$

Cette approximation présente l'inconvénient de ne pas assurer la conservation de la masse. Pour pallier à ce problème, il est nécessaire d'introduire une vitesse de correction V_i^c tel que :

$$J_{ik} = -\rho D_k \frac{W_k}{W} \frac{\partial X_k}{\partial x_i} + V_i^c \quad (2.8)$$

Cette vitesse de correction est choisie de façon à ce que $(\sum_{k=1}^N J_{ik} = 0)$ et peut donc être exprimée ainsi :

$$V_i^c = \sum_{k=1}^N D_k \frac{W_k}{W} \frac{\partial X_k}{\partial x_i} \quad (2.9)$$

Finalement, le flux diffusif de l'espèce J_{ik} s'écrit :

$$J_{ik} = -\rho \left(D_k \frac{W_k}{W} \frac{\partial X_k}{\partial x_i} - Y_k V_i^c \right) \quad (2.10)$$

Les effets de Soret (diffusion des espèces due au gradient de température) et de Dufour (flux de chaleur dû au gradient d'espèces) sont négligés dans cette étude [67]. Il est à noter que, dans le cas particulier où toutes les espèces possèdent la même diffusivité ($D_k = D$), l'approximation de Hirschfelder et Curtiss conduit à une loi de Fick classique $V_k = -D \nabla Y_k / Y_k$.

Conservation de l'énergie

L'équation de conservation de l'énergie peut être formulée de multiples façons. Ici, on se limite à une formulation sur l'énergie totale non chimique $E = u^2/2 + e_s$, avec e_s l'énergie interne, comme implémenté dans AVBP :

$$\frac{\partial \rho E}{\partial t} + \frac{\partial(\rho E u_i)}{\partial x_i} = -\frac{\partial}{\partial x_i} [u_i(P\delta_{ij} - \tau_{ij}) + q_i] + \dot{\omega}_T \quad (2.11)$$

avec q_i le flux de chaleur total et $\dot{\omega}_T$ le taux de dégagement de chaleur. Le flux de chaleur total q_i est la somme du flux de chaleur par conduction exprimé avec une loi de Fourier et du flux de chaleur par diffusion des espèces :

$$q_i = \lambda \frac{\partial T}{\partial x_i} - \rho \sum_{k=1}^N h_{s,k} Y_k V_{k,i} \quad (2.12)$$

où $h_{s,k}$ désigne l'enthalpie sensible de l'espèce k . Enfin, le taux de dégagement de chaleur est directement lié au terme source de consommation d'espèce $\dot{\omega}_k$ et à son enthalpie de formation $h_{f,k}^0$ à $T_0 = 298K$:

$$\dot{\omega}_T = - \sum_{k=1}^N \Delta h_{f,k}^0 \dot{\omega}_k \quad (2.13)$$

2.2 Loi d'état et propriétés de transport

Loi d'état

Afin de fermer ce système d'équations, une équation d'état liant la pression, la température et la densité est nécessaire. On considère ici la phase gazeuse comme un mélange de N gaz parfaits. L'équation d'état s'écrit alors :

$$P = \rho \frac{R}{\overline{W}} T \quad (2.14)$$

où $R = 8,314 \text{ J/mol/K}$ désigne la constante des gaz parfaits et \overline{W} est la masse molaire du mélange définie par :

$$\frac{1}{\overline{W}} = \sum_{k=1}^N \frac{Y_k}{W_k} \quad (2.15)$$

Propriétés de transport

Des modèles élaborés existent afin de reproduire le transport des espèces et le transport de chaleur. Ils sont notamment employés dans des solveurs consacrés à la cinétique chimique comme CANTERA [69]. Ceux-ci restent cependant trop coûteux pour des calculs LES. Une approche simplifiée est donc adoptée dans cette étude et est décrite ci-dessous.

Viscosité

Une première approximation classique est de considérer la viscosité dynamique μ du fluide comme indépendante de la composition du mélange. Cette approximation conduit à des erreurs faibles dans le cadre d'un mélange proche d'un gaz parfait. Celle-ci ne dépend ainsi que de la température selon une loi puissance :

$$\mu = \mu_{ref} \left(\frac{T}{T_{ref}} \right)^b \quad (2.16)$$

où μ_{ref} est la viscosité dynamique mesurée à la température de référence T_{ref} . Le coefficient b varie entre 0.5 et 1 (0.76 pour de l'air). Une alternative est de considérer la loi de Sutherland [182] :

$$\mu = c_1 \frac{T^{3/2}}{T + c_2} \frac{T_{ref} + c_2}{T_{ref}^{3/2}} \quad (2.17)$$

où c_1 et c_2 sont des constantes. Pour l'air à $T_{ref} = 273K$, $c_1 = 1.71e^{-5} \text{ kg/m.s}$ et $c_2 = 110.4K$.

Conductivité thermique

La conduction thermique du mélange λ est calculée en considérant un nombre de Prandtl Pr constant pour le mélange défini comme :

$$\lambda = \frac{\mu C_p}{Pr} = \rho C_p D_{th} \quad \text{avec} \quad D_{th} = \frac{\nu}{Pr} \quad (2.18)$$

où C_p est la capacité calorifique du mélange défini par :

$$\overline{C_p} = \sum_{k=1}^N C_{p,k} Y_k \quad (2.19)$$

Diffusivité

Le calcul de la diffusivité moléculaire D_k donnée par l'Eq. 2.7 n'est pas envisageable dans le cadre de notre étude. Afin de réduire le coût de calcul associé à l'estimation des coefficients de diffusion binaires, l'approximation faite dans AVBP est de considérer des nombres de Schmidt Sc_k constants (de façon similaire à la diffusion thermique) de sorte que :

$$D_k = \frac{\mu}{\rho Sc_k} \quad (2.20)$$

où Sc_k désigne le nombre de Schmidt pour l'espèce k . Finalement, le nombre adimensionnel de Lewis Le_k permet de comparer l'importance de la diffusion thermique par rapport à la diffusion moléculaire :

$$Le_k = \frac{D_{th}}{D_k} = \frac{Sc_k}{Pr} \quad (2.21)$$

2.3 Cinétique chimique

Le processus de combustion implique des mécanismes cinétiques mettant en jeu de nombreuses réactions chimiques. Pour N espèces qui réagissent selon un mécanisme comportant M réactions, l'équilibre chimique s'écrit :

$$\sum_{k=1}^N \nu'_{kj} M_k \iff \sum_{k=1}^N \nu''_{kj} M_k \quad (2.22)$$

où M_k représente l'espèce k , ν'_{kj} et ν''_{kj} sont les coefficients stœchiométriques molaires de l'espèce k dans la réaction j . Le taux de réaction $\dot{\omega}_k$ de l'espèce k présent dans l'Eq. 2.4 est la somme des taux de réaction $\dot{\omega}_{k,j}$ des M réactions :

$$\dot{\omega}_k = \sum_{j=1}^M \dot{\omega}_{k,j} = W_k \sum_{j=1}^M \nu_{kj} Q_j \quad (2.23)$$

où $\nu_{kj} = \nu''_{kj} - \nu'_{kj}$ et Q_j est le taux d'avancement de la réaction j défini comme :

$$Q_j = K_{fj} \prod_{k=1}^N \left(\frac{\rho Y_k}{W_k} \right)^{\nu'_{kj}} - K_{rj} \prod_{k=1}^N \left(\frac{\rho Y_k}{W_k} \right)^{\nu''_{kj}} \quad (2.24)$$

$K_{f,j}$ et $K_{r,j}$ sont les coefficients de vitesse de la réaction j , respectivement directe et inverse. La loi empirique d'Arrhénius donne une expression simplifiée de ces vitesses :

$$K_{fj} = A_{fj} \exp\left(-\frac{E_{aj}}{RT}\right) \quad (2.25)$$

où A_{fj} et E_{aj} sont respectivement le facteur d'Arrhénius et l'énergie d'activation de la réaction directe j . A l'état moléculaire, la loi d'Arrhénius représente la probabilité d'avoir un échange d'atome lors d'une collision. Le coefficient de vitesse de la réaction inverse est alors obtenu en supposant l'équilibre de la réaction :

$$\frac{K_{f,j}}{K_{r,j}} = K_{eq,j} \quad (2.26)$$

avec $K_{eq,j}$ la constante d'équilibre de la réaction. Celle-ci s'exprime de la façon suivante [104] :

$$K_{eq,j} = \left(\frac{P_0}{RT}\right)^{\sum_{k=1}^N \nu_{kj}} \exp\left(\frac{\Delta S_j^0}{R} - \frac{\Delta H_j^0}{RT}\right) \quad (2.27)$$

où P_0 représente la pression atmosphérique, ΔH_j^0 et ΔS_j^0 sont respectivement les variations d'enthalpie et d'entropie pour la réaction j obtenues par tabulation. Finalement le dégagement de chaleur total lié à la combustion s'exprime en fonction de la somme des taux de réaction de chaque espèce $\dot{\omega}_k$:

$$\dot{\omega}_T = - \sum_{k=1}^N \Delta h_{f,k}^o \dot{\omega}_k \quad (2.28)$$

2.4 Le concept de la LES

L'une des principales motivations des progrès effectués en CFD (Computational Fluids Dynamics) est la compréhension et la prédiction des écoulements turbulents. La turbulence peut apparaître lorsque les forces d'inertie au sein de l'écoulement sont grandes devant les forces visqueuses. Le caractère turbulent ou non d'un écoulement est ainsi déterminé via le nombre de Reynolds noté Re défini comme tel :

$$Re = \frac{uL}{\nu} \quad (2.29)$$

avec u et L respectivement une vitesse et une longueur caractéristique de l'écoulement, ν la viscosité cinématique du fluide.

La turbulence est directement liée au caractère non linéaire de l'équation de quantité de mouvement dans les équations de Navier-Stokes (Section 2.1). A partir d'une solution initiale à une harmonique donnée, cette non-linéarité engendre la création d'harmoniques supérieures [149]. Physiquement, ces harmoniques apparaissent sous la forme de tourbillons d'échelles spatiales et temporelles très différentes convectés par l'écoulement moyen. La plus grande échelle de tourbillon, appelée échelle intégrale l_t , est déterminée par la géométrie (taille de la chambre de combustion, diamètre de l'injecteur). Ces tourbillons interagissent entre eux, s'apparient, se disloquent et donnent naissance à des tourbillons plus petits. Ce processus se répète avec les tourbillons ainsi générés jusqu'à une taille minimale η_k , appelée échelle de Kolmogorov en dessous de laquelle aucune structure tourbillonnaire n'existe en raison de la dissipation visqueuse. Ce processus de cascade énergétique des grandes échelles vers les petites échelles a été conceptualisé par Richardson [158] puis Kolmogorov [102]. Le spectre de Kolmogorov représenté en Fig. 2.1 permet de représenter les échelles associées au mouvement turbulent dans le cas d'une turbulence homogène (invariance par translation) isotrope (invariance par rotation et par symétrie par rapport aux axes du système de coordonnées). On distingue trois zones sur ce spectre :

- La zone de production, appelée zone intégrale, correspond aux grosses structures intégrales d'échelle l_t . Ces structures sont caractérisées par des nombres d'ondes k faibles et sont porteuses d'énergie cinétique E . Elles restent très dépendantes de la taille caractéristique de la géométrie. En revanche, elles sont peu influencées par la viscosité.
- La zone centrale sur le courbe est une zone inertielle dans laquelle les structures sont étirées et déformées par les forces de cisaillement générées par les tourbillons de plus grande taille. Elles finissent par se disloquer et permettent la formation de tourbillons plus petits. Ainsi, l'énergie est transférée des grosses structures vers les plus petites. Dans le cas particulier d'une Turbulence Homogène Isotrope (THI), ce transfert d'énergie s'effectue selon une loi en $-5/3$ (Fig. 2.1).
- La zone dissipative correspond aux petits tourbillons d'échelle η_k . Dans cette zone, la dissipation visqueuse est prépondérante et s'exprime sous forme de chaleur.

Pour une turbulence homogène isotrope, le rapport entre l'échelle intégrale l_t et l'échelle de Kolmogorov η_k est de l'ordre de :

$$\frac{l_t}{\eta_k} = Re_t^{3/4} = \frac{u' l_t}{\nu} \quad (2.30)$$

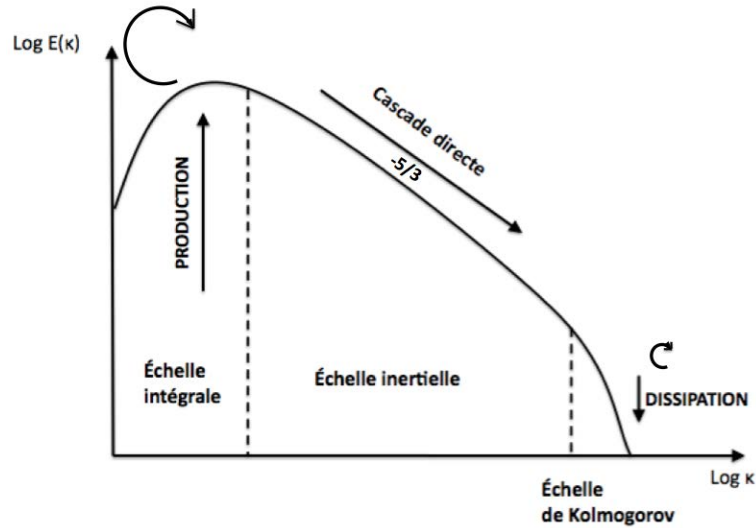


Figure 2.1 – Spectre d'énergie dans le domaine fréquentiel pour une turbulence homogène isotrope, représentatif du concept de cascade énergétique [102].

où Re_t est le nombre de Reynolds turbulent associé à l'intensité turbulente u' et l'échelle intégrale l_t . Ainsi, plus le nombre de Reynolds est élevé et plus la disparité des échelles est importante. C'est pourquoi même si en théorie toute l'information est contenue dans les équations de Navier-Stokes, il est impossible de résoudre toutes les échelles dynamiques pour des nombres de Reynolds trop élevés. Face à cette difficulté, trois grandes classes d'approches se sont démarquées au fil des années afin de simuler les écoulements turbulents. Le niveau de modélisation requis pour chacune de ces méthodes est schématisé en Fig. 2.2.

Simulation Numérique Directe (DNS)

La Simulation Numérique Directe consiste à résoudre entièrement les équations de Navier-Stokes, ce qui implique de résoudre toutes les échelles dynamiques de l'écoulement. Cela signifie que la taille des mailles doit être de l'ordre de l'échelle de Kolmogorov. Pour une configuration tridimensionnelle et en l'absence de paroi, une évaluation du nombre de points nécessaires N_{points} pour résoudre l'écoulement est de l'ordre de :

$$N_{points} = \left(\frac{l_t}{\eta_k} \right)^3 = Re_t^{9/4} \quad (2.31)$$

Sachant que les applications industrielles actuelles impliquent régulièrement des écoulements avec des nombres de Reynolds de l'ordre de 10^6 , il faudrait environ $3 \cdot 10^{14}$ points pour réaliser de telles simulations, ce qui est hors de portée de la puissance actuelle des

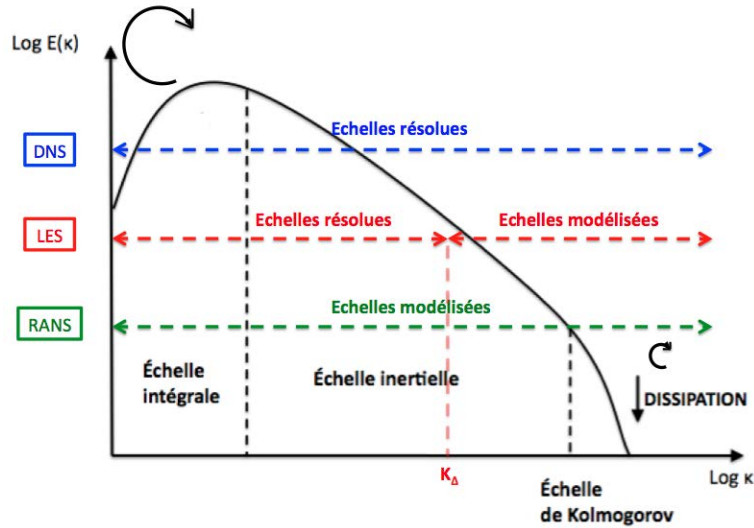


Figure 2.2 – Représentation schématique du niveau de modélisation requis pour chacune des approches.

calculateurs. En outre, cette estimation ne prend pas en compte la présence de parois près desquelles les contraintes de résolution sont encore plus importantes [149]. C'est pourquoi l'usage de la Simulation Numérique Directe est aujourd'hui réservé à des configurations académiques (géométrie et conditions limites simples) très petites et pour des nombres de Reynolds assez faibles. La Simulation Numérique Directe permet notamment l'étude des aspects fondamentaux de la turbulence. Elle constitue une référence, au même titre qu'une expérience, pour le développement et la validation de nouveaux modèles.

Reynolds Averaged Navier-Stokes Equations (RANS)

Le principe des méthodes RANS est de considérer une version moyennée des équations de Navier-Stokes. Pour cela, l'écoulement turbulent est décomposé en une contribution moyenne et partie fluctuante aussi appelée décomposition de Reynolds :

$$Q = \langle Q \rangle + Q' \text{ avec } \langle Q' \rangle = 0 \quad (2.32)$$

où $\langle . \rangle$ représente une moyenne d'ensemble de la quantité Q et Q' une fluctuation par rapport à cette moyenne. L'opérateur de moyenne correspond à une moyenne arithmétique faite en tout point de l'espace x_i et du temps t sur un grand nombre de réalisations N de la même expérience :

$$\langle Q \rangle (x_i; t) = \frac{1}{N} \sum_{k=1}^N Q_k(x_i; t) \quad (2.33)$$

En pratique, l'hypothèse d'ergodicité est classiquement appliquée et permet de considérer que la moyenne statistique d'ensemble est équivalente à la moyenne temporelle.

Les équations obtenues en appliquant cette décomposition permettent d'obtenir l'évolution moyenne de l'écoulement turbulent. Les termes non linéaires des équations de Navier-Stokes font apparaître des termes non fermés représentant l'influence de la turbulence sur le champ moyen. Ceux-ci peuvent être modélisés ou résolus en considérant des équations de transport supplémentaires possédant des termes non fermés d'ordre élevé. Les modèles employés doivent rendre compte de l'ensemble des échelles turbulentes présentes dans l'écoulement. Néanmoins, comme les grandes échelles dépendent très fortement de la géométrie considérée, ces modèles manquent généralement d'universalité ce qui limite la capacité de prédiction de cette approche. Ceci est particulièrement vrai dans le cas de la combustion turbulente où les interactions entre l'écoulement et la flamme conduisent à des structures complexes et des instationnarités à des échelles de temps très diverses.

Large Eddy Simulation (LES)

La Simulation des Grandes Echelles se situe à mi-chemin entre la Simulation Numérique Directe et les méthodes RANS. Comme son nom l'indique, son principe consiste à résoudre complètement les grandes structures porteuses d'énergie, qui dépendent fortement de la géométrie, et à modéliser les petites échelles qui possèdent un comportement plus universel. Pour cela, les équations de Navier-Stokes sont filtrées spatialement et les échelles plus petites que la taille du filtre K_Δ sont modélisées (Fig. 2.1). La capacité de prédiction de la LES pour des écoulements turbulents complexes est a priori plus grande que pour les méthodes RANS dans la mesure où une grande partie de la physique est liée aux grandes échelles qui sont résolues en LES. De plus, la LES permet une représentation dynamique de l'écoulement et des structures turbulentes instationnaires de grande échelle. En contrepartie, l'exigence en terme de résolution spatiale et temporelle est plus importante que pour les méthodes RANS. Le formalisme des équations de Navier-Stokes filtrées fait l'objet de la section suivante (Section 2.5).

2.5 Equations de conservation pour la LES

Afin d'obtenir les équations de la LES, un filtre spatial G_Δ de taille caractéristique Δ est appliqué à toute grandeur instantanée f de la manière suivante :

$$\bar{f}(\mathbf{x}, t) = \int G_{\Delta}(\mathbf{x} - \mathbf{y})f(y, t) \, d\mathbf{y} \quad (2.34)$$

On obtient de cette façon la grandeur filtrée \bar{f} . Il s'agit de la partie résolue tandis que les effets des grandeurs de sous-maillages f' définies par :

$$f' = f - \bar{f} \quad (2.35)$$

sont modélisées. Dans le cas du code AVBP, le filtrage est implicite, ce qui signifie qu'aucun filtre n'est explicitement appliqué. La taille minimale possible du filtre est donc directement imposée par la résolution du maillage.

Pour les écoulements à densité ρ variable, on introduit le filtrage pondéré par la masse volumique, noté \tilde{f} , par analogie avec la moyenne de Favre :

$$\bar{\rho}\tilde{f} = \overline{\rho f} \quad (2.36)$$

En appliquant ce filtre sur les équations de Navier-Stokes (Section 2.1), on obtient les équations de conservation pour la LES aussi appelées équations de Navier-Stokes filtrées :

Conservation de la masse filtrée

$$\frac{\partial \bar{\rho}}{\partial t} + \frac{\partial \bar{\rho}\tilde{u}_i}{\partial x_i} = 0 \quad (2.37)$$

Conservation de la quantité de mouvement filtrée

$$\frac{\partial \bar{\rho}\tilde{u}_i}{\partial t} + \frac{\partial (\bar{\rho}\tilde{u}_i\tilde{u}_j)}{\partial x_j} = -\frac{\partial}{\partial x_j} [\bar{P}\delta_{ij} - \bar{\tau}_{ij} - \bar{\tau}_{ij}^{sgs}] \quad (2.38)$$

Le tenseur de contraintes filtré $\bar{\tau}_{ij}$ est défini comme :

$$\bar{\tau}_{ij} = \overline{2\mu \left(S_{ij} - \frac{1}{3}\delta_{ij}S_{ll} \right)} \quad (2.39)$$

Négliger les termes croisés d'ordre élevé permet d'écrire l'approximation suivante :

$$\bar{\tau}_{ij} \simeq 2\bar{\mu} \left(\widetilde{S}_{ij} - \frac{1}{3}\delta_{ij}\widetilde{S}_{ll} \right) \quad (2.40)$$

avec $\widetilde{S}_{ij} = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial \widetilde{u}_j}{\partial x_i} + \frac{\partial \widetilde{u}_i}{\partial x_j} \right)$ et $\bar{\mu} \simeq \mu(\widetilde{T})$.

Conservation des espèces filtrées

Pour un fluide contenant k espèces :

$$\frac{\partial \bar{\rho} \widetilde{Y}_k}{\partial t} + \frac{\partial \bar{\rho} \widetilde{Y}_k \widetilde{u}_i}{\partial x_i} = - \frac{\partial}{\partial x_i} (\bar{J}_{ik} + \bar{J}_{ik}^{sgs}) + \bar{\omega}_k \quad (2.41)$$

Similairement au tenseur de contraintes visqueux filtré, il est possible d'obtenir une approximation du flux diffusif en négligeant les termes croisés d'ordre élevé :

$$\bar{J}_{ik} = -\rho \overline{\left(D_k \frac{W_k}{W} \frac{\partial X_k}{\partial x_i} - Y_k V_i^c \right)} \simeq -\bar{\rho} \left(\bar{D}_k \frac{W_k}{W} \frac{\partial \widetilde{X}_k}{\partial x_i} - \widetilde{Y}_k \widetilde{V}_i^c \right) \quad (2.42)$$

avec la vitesse de correction filtrée qui s'écrit :

$$\widetilde{V}_i^c = \sum_{k=1}^{n_{spec}} \bar{D}_k \frac{W_k}{W} \frac{\partial \widetilde{X}_k}{\partial x_i} \text{ and } \bar{D}_k \simeq \frac{\bar{\mu}}{\bar{\rho} S c_k} \quad (2.43)$$

Conservation de l'énergie filtrée

$$\frac{\partial \bar{\rho} \widetilde{E}}{\partial t} + \frac{\partial (\bar{\rho} \widetilde{E} \widetilde{u}_i)}{\partial x_i} = - \frac{\partial}{\partial x_i} [\overline{u_i (P \delta_{ij} - \tau_{ij})} + \bar{q}_i + \bar{q}_i^{sgs}] + \bar{\omega}_T \quad (2.44)$$

Enfin, le flux de chaleur filtré s'exprime :

$$\bar{q}_i = -\lambda \frac{\partial \overline{T}}{\partial x_i} + \sum_{k=1}^N \overline{J_{ik} h_{sk}} \simeq -\bar{\lambda} \frac{\partial \widetilde{T}}{\partial x_i} + \sum_{k=1}^N \bar{J}_{ik} \widetilde{h}_{sk} \quad (2.45)$$

où $\bar{\lambda} = \frac{\bar{\mu} \overline{C_p}(\widetilde{T})}{Pr}$.

Le filtrage des équations de conservation fait apparaître des termes de sous-maille $\overline{\tau_{ij}^{sgs}}$, $\overline{J_{ik}^{sgs}}$, \bar{q}_i^{sgs} , $\bar{\omega}_k$ et $\bar{\omega}_T$ non fermés qu'il est nécessaire de modéliser.

2.6 Termes non fermés

Fermeture du tenseur de contraintes de sous-maille

Le tenseur de contraintes de sous-maille $\overline{\tau_{ij}^{sgs}} = -\bar{\rho}(\widetilde{u_i u_j} - \widetilde{u_i} \widetilde{u_j})$ est généralement modélisé en faisant appel à l'hypothèse de Boussinesq de telle sorte que celui-ci s'exprime linéairement par rapport au taux de déformation via une viscosité turbulente μ_t . Ainsi, de manière analogue au tenseur de contrainte résolu, on a :

$$\overline{\tau_{ij}^{sgs}} = 2\mu_t \left(\widetilde{S_{ij}} - \frac{1}{3} \delta_{ij} \widetilde{S_{ll}} \right) \quad (2.46)$$

avec $\widetilde{S_{ij}} = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial \widetilde{u_j}}{\partial x_i} + \frac{\partial \widetilde{u_i}}{\partial x_j} \right)$.

Le rôle de la viscosité turbulente est de prendre en compte les interactions entre les structures résolues et les structures de sous-maille. Le choix de modéliser les échelles de sous-maille par une viscosité est lié au fait qu'on émet l'hypothèse que les petites échelles ont un comportement plus ou moins universel et contribuent à l'écoulement de façon purement dissipative. Cette hypothèse reste valable dans le cadre de la théorie de la cascade énergétique décrite en Section 2.4. Néanmoins, cela signifie que les modèles basés sur la viscosité turbulente n'autorisent le transfert d'énergie que des grosses vers les petites structures et ne prennent pas en compte les effets d'"energy backscattering" [111].

Afin d'évaluer cette viscosité turbulente, différents modèles de turbulence, également appelés modèles de sous-maille sont disponibles et les principaux sont présentés en Section 2.7.

Fermeture des termes visqueux de sous-maille

De manière similaire, les flux d'espèces et d'enthalpie de sous-maille $\overline{J_{ik}^{sgs}} = \bar{\rho}(\widetilde{u_i Y_k} - \widetilde{u_i} \widetilde{Y_k}) = -\bar{\rho} \left(D_k^t \frac{W_k}{W} \frac{\partial \widetilde{X_k}}{\partial x_i} - \widetilde{Y_k} V_i^{c,t} \right)$ sont modélisés via une contribution diffusive basée sur une diffusivité turbulente, construite à partir de la viscosité turbulente et d'un nombre de Schmidt turbulent :

$$D_k^t = \frac{\mu_t}{\rho Sc_k^t} \quad (2.47)$$

Sc_k^t est choisi égal à 0.6. Une vitesse de correction turbulente est également introduite afin d'assurer la conservation de la masse :

$$\tilde{V}_i^{c,t} = \sum_{k=1}^N D_k^t \frac{W_k}{W} \frac{\partial \tilde{X}_k}{\partial x_i} \quad (2.48)$$

Fermeture du flux de chaleur de sous-maille

Le flux de chaleur de sous-maille $\bar{q}_i^{sgs} = \bar{\rho}(u_i \tilde{E} - \tilde{u}_i \tilde{E})$ est modélisé de façon identique en introduisant une conductivité thermique turbulente construite à partir de la viscosité turbulente μ_t et d'un nombre de Prandtl turbulent Pr^t :

$$\lambda_t = \frac{\mu_t \overline{C_p}}{Pr^t} \quad (2.49)$$

Pr^t est choisi égal à 0.6 dans toute la suite.

2.7 Modèles de sous-maille

Modèle de Smagorinsky [173]

Le modèle de Smagorinsky est le modèle de sous-maille le plus connu et le plus ancien. Il consiste à exprimer la viscosité turbulente de la façon suivante :

$$\nu_t = (C_S \Delta)^2 \sqrt{\tilde{S}_{ij} \tilde{S}_{ij}} \quad (2.50)$$

avec C_S la constante de Smagorinsky ($\simeq 0.18$ dans le cas d'une THI) et Δ la taille du filtre (généralement $\Delta = (\Delta_x \Delta_y \Delta_z)^{1/3}$) avec Δ_x , Δ_y et Δ_z la taille de la plus petite maille dans chaque direction et \tilde{S}_{ij} le tenseur de taux déformation filtré défini par :

$$\tilde{S}_{ij} = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial \tilde{u}_i}{\partial x_j} + \frac{\partial \tilde{u}_j}{\partial x_i} \right) \quad (2.51)$$

Ce modèle reproduit correctement la dissipation d'énergie dans le cas d'une turbulence homogène isotrope et est très robuste. Dès que l'écoulement devient anisotrope, il a tendance à se montrer trop dissipatif [66]. Son plus gros inconvénient réside dans le fait que la viscosité de sous-maille ne tend pas vers zéro en présence de parois où les forces visqueuses sont prépondérantes. De plus, une seule constante est utilisée pour l'ensemble du domaine, ce qui ne permet pas de prendre en compte les différences locales dans les taux de turbulence présents dans le domaine. Pour remédier à ce problème, le modèle de Smagorinsky dynamique a été développé [66]. Celui-ci permet d'évaluer localement la constante C_S de

façon automatique en utilisant l'identité de Germano entre les contraintes de sous-maillages et les contraintes résolues, pour ainsi adapter la viscosité de sous-maille à la dynamique de l'écoulement résolu [115]. Le modèle est basé sur un double filtrage : un filtre LES lié à la taille des mailles (\tilde{G}) et un filtre test ($\langle G \rangle$) plus grand (i.e., qui correspond à un maillage plus grossier que le filtre LES).

Modèle WALE (Wall Adapting Local Eddy-viscosity)

Le modèle WALE [54] a été développé dans l'optique de retrouver le bon comportement au niveau des parois, à savoir que la viscosité turbulente tende vers zéro à la paroi en $O(\Delta^3)$. La viscosité turbulente s'exprime alors :

$$\nu_t = (C_w \Delta)^2 \frac{(S_{ij}^d S_{ij}^d)^{3/2}}{(\tilde{S}_{ij} \tilde{S}_{ij})^{5/2} + (S_{ij}^d S_{ij}^d)^{5/4}} \quad (2.52)$$

avec $\tilde{S}_{ij} = \frac{1}{2}(\tilde{g}_{ij} + \tilde{g}_{ji})$, $\tilde{g}_{ji} = \frac{\partial \tilde{u}_i}{\partial x_j}$, $S_{ij}^d = \frac{1}{2}(\tilde{g}_{ij}^2 + \tilde{g}_{ji}^2) - \frac{1}{3}\tilde{g}_{kk}^2 \delta_{ij}$ et $C_w = 0.4929$.

Ce modèle est souvent préféré au modèle de Smagorinsky dans des simulations contenant des parois non glissantes traitées sans loi de parois.

Modèle SIGMA

Le modèle SIGMA proposé par Baya Toda *et al.* [131] adopte une approche différente et se base sur les valeurs propres $\sigma_1 \geq \sigma_2 \geq \sigma_3$ du tenseur de gradient de vitesse résolu \tilde{g}_{ij} pour construire la viscosité turbulente :

$$\nu_t = (C_\sigma \Delta)^2 \frac{\sigma_3(\sigma_1 - \sigma_2)(\sigma_2 - \sigma_3)}{\sigma_1^2} \quad (2.53)$$

où $C_\sigma = 1.35$ est la constante du modèle. Comme on peut le voir dans le tableau 2.3, le modèle SIGMA présente des propriétés intrinsèques meilleures que les approches décrites précédemment. Comme le modèle WALE, il permet de retrouver le comportement asymptotique correct près des parois mais possède un meilleur comportement en présence d'écoulements rotatifs, ce qui est primordial pour les écoulements swirlés où des structures purement rotationnelles apparaissent. Dans la suite, les modèles WALE ou SIGMA sont utilisés selon le type d'écoulement étudié.

Propriétés souhaitées		Smagorinsky	WALE	SIGMA
Comportement asymptotique correct près des parois		✗	✓	✓
Viscosité turb. nulle pour des écoulements bidimensionnels	Rotation pure	✗	✗	✓
	Cisaillement pur	✗	✓	✓
Viscosité turb. nulle pour de l'expansion	Isotropique	✗	✗	✓
	Axisymétrique	✗	✓	✓

Figure 2.3 – Propriétés des différents modèles de sous-maille présentés. Adapté de [131].

2.8 Modèles de combustion

La principale difficulté dans la simulation de la combustion dans le cadre de la LES réside dans le calcul du terme source de réaction. Celui-ci est très localisé et s'étale sur des zones très fines. Typiquement, à pression atmosphérique, l'épaisseur des flammes de prémélange hydrocarbures/air est de l'ordre de 0.1 à 0.5 mm. Dans le cadre d'une approche LES, résoudre complètement la flamme dans une configuration industrielle reste encore trop coûteux. D'un autre côté, les fluctuations de sous-maille ne peuvent être ignorées de par la nature fortement non linéaire des termes sources chimiques de consommation et de production d'espèce. Pour répondre à cette problématique, des modèles de combustion ont été développés afin d'approcher les taux de réaction filtrés $\bar{\omega}_k$ à partir de quantités résolues.

Une distinction est généralement faite entre les modèles de combustion pour les régimes de prémélange et les régimes non prémélangés. Une présentation détaillée des modèles RANS et LES existants est proposée dans les revues de Veynante et Vervisch [192] ou dans le livre de Poinso et Veynante [146] tandis que Pitsch [145] fait une revue des modèles de combustion spécifiques à la LES. On distingue généralement trois types d'approches : les approches "mélange", les approches géométriques (Section 2.8.1) et les approches statistiques (Section 2.8.2). Le modèle de flamme épaissie est décrit en détail en Section 2.8.3.

2.8.1 Les approches géométriques

Les approches géométriques consistent à décrire la flamme comme une surface géométrique représentant l'interface entre les gaz frais et les gaz brûlés pour des flammes prémélangées ou entre le carburant et l'oxydant pour les flammes de diffusion. La structure locale de la flamme est alors supposée similaire à une flamme laminaire. A partir de ce point, plusieurs solutions peuvent être envisagées pour étudier la propagation du front de flamme.

G-Equation [144]

Le principe du modèle G-Equation est de décrire géométriquement le front de flamme en le représentant par une iso-surface G_0 d'un champ scalaire G dont l'évolution est donnée par une équation de transport. La chimie est supposée infiniment rapide, de sorte que la réaction se produise dans une épaisseur très fine devant la plus petite échelle de longueur de l'écoulement. L'équation de transport de \tilde{G} (champ de G filtré), dérivée à l'aide de considérations cinématiques, s'écrit comme une équation de convection avec un terme supplémentaire prenant en compte la propagation turbulente S_t du front de flamme par rapport à l'écoulement.

$$\frac{\partial \bar{\rho} \tilde{G}}{\partial t} + \frac{\partial \bar{\rho} \tilde{u}_i \tilde{G}}{\partial x_i} = \rho \bar{S}_t |\nabla G| \quad (2.54)$$

Un modèle pour la vitesse de propagation turbulente \bar{S}_t est nécessaire. La fermeture est généralement réalisée à l'aide de corrélations reliant \bar{S}_t à la vitesse de flamme laminaire S_l^0 et l'intensité turbulente de sous-maille \bar{u}' [143] :

$$\frac{\bar{S}_t}{S_l^0} = 1 + \alpha \frac{\bar{u}'^n}{S_l^0} \quad (2.55)$$

α et n sont des constantes obtenues expérimentalement. La méthode G-Equation présente l'avantage d'être simple à implanter. Néanmoins, sa plus grosse faiblesse provient de la détermination de la quantité de sous-maille \bar{S}_T qui est remplacée directement par une vitesse turbulente expérimentale sans justification solide. D'autre part, même dans le cadre de la combustion parfaitement prémélangée, la vitesse de flamme turbulente n'est pas une quantité clairement bien définie sur le plan théorique et expérimental [71]. Bien que des modélisations plus fines aient été proposées [143], il n'existe pas de modèle universel pour \bar{S}_T .

Densité de surface de flamme (FSD pour Flame Surface Density)

Les approches de type "Densité de surface de flamme" se basent généralement sur le transport de la variable de densité de surface de flamme Σ représentant la surface de flamme δA par unité de volume δV . Le taux de réaction moyen de l'espèce k est alors calculé comme le produit de la densité de surface de flamme et du taux de réaction local intégré dans la direction normale à la surface de flamme $\hat{\Omega}_k$:

$$\bar{\omega}_k = \hat{\Omega}_k \Sigma \quad (2.56)$$

$\dot{\Omega}_k$ est généralement estimé à partir de calculs de flammes laminaires. Le terme Σ est calculé par le biais d'expressions algébriques [19, 20] ou alors est solution d'une équation d'équilibre [77]. L'avantage du modèle FSD par rapport au modèle G-Equation est de transporter des scalaires comme la variable d'avancement Θ et Σ qui sont physiquement définis et peuvent être extraits de DNS ou de mesures expérimentales.

2.8.2 Les approches statistiques

Les approches statistiques consistent à rassembler et analyser les statistiques des champs scalaires d'intérêt en chaque point de l'écoulement. Les valeurs moyennes et les corrélations de chaque variable sont ensuite extraites à partir d'une Fonction de Densité de Probabilité, notée PDF. Le formalisme de ces méthodes est directement dérivé des approches développées pour les études RANS. Leur concept repose sur le fait que les informations perdues lors de la procédure de filtrage peuvent alors être décrites en introduisant une fonction de densité de probabilité $P(\Phi)$ dans l'espace des phases, qui décrit l'état chimique du système $\Phi = (Y_1, Y_2, \dots, Y_N, T)$ avec N le nombre d'espèces. Connaissant cette PDF, le terme source filtré peut être reconstruit de la façon suivante :

$$\bar{\omega} = \int \dot{\omega}(\Phi) P(\Phi) d\Phi x \quad (2.57)$$

La difficulté réside alors dans l'obtention de cette PDF.

- Une première méthode consiste à résoudre une équation de conservation pour la PDF [147]. A cause de sa grande dimensionnalité, l'équation de transport de la PDF ne peut pas être résolue directement et doit faire appel à des méthodes de résolution stochastiques eulériennes [91, 92, 93, 187] ou lagrangiennes [148]. Ces deux dernières méthodes donnent des résultats très satisfaisants et peuvent être appliqués pour des régimes de combustion variés et des écoulement diphasiques. Leur inconvénient principal provient de la complexité liée à leur implémentation et à leur coût de calcul important.
- Une seconde méthode consiste à utiliser une forme présumée de PDF. Ce type d'approche est souvent combiné avec des méthodes de chimie tabulée. De nombreuses formulations de PDF existent dans la littérature [23, 27], la plus utilisée reposant sur une fonction β introduite pour la LES par Cook et Riley [44]. Dans la pratique, la construction de la PDF pour la LES peut être basée sur une librairie de flamelettes. Une limitation de ce type de modèle dans notre cas est que la distribution présumée des scalaires peut potentiellement être très différente de la réalité, notamment pour

des configurations diphasiques où z n'est plus un scalaire passif.

- Parmi les approches statistiques, on peut également mentionner l'approche CMC (Conditional Momentum Closure) proposée initialement par Klimenko et Bilger [101] pour le RANS et adaptée à la LES par Kim et Pitsch [100]. Celle-ci consiste à filtrer les équations de transport d'espèces conditionnellement à la fraction de mélange z : $(\rho Y_i|_{z=z^*})$. Cela implique ainsi de résoudre une équation de conservation pour chaque niveau de z . Ces niveaux doivent être pris en nombre suffisant pour rester précis, ce qui mène à des coûts de calcul très élevés. Des méthodes comme l'approche PCM (Presumed Conditional Momentum) [191] ont été proposées afin de réduire ce coût en introduisant une tabulation des valeurs $\rho Y_k|_{z^*}$.

Ce type de méthodes statistiques est souvent utilisé pour décrire les flammes de diffusion turbulentes pour lesquelles la description statistique du mélange est primordiale (Chapitre 6).

2.8.3 L'approche de flamme épaissie artificiellement (TFLES)

Une approche attractive pour contourner la difficulté liée à la résolution de la flamme sur un maillage plus grossier que l'épaisseur du front de flamme est d'épaissir la flamme de façon artificielle afin de résoudre le terme source réactif. Cette idée a d'abord été proposée par Butler et O'Rourke [31] pour des flammes de prémélange laminares. Par des analyses asymptotiques sur les flammes de prémélange, il est possible de montrer que la vitesse de flamme laminaire s_L^0 et l'épaisseur de flamme laminaire δ_L^0 sont contrôlées par la diffusivité thermique D_{th} et la constante pré-exponentielle A de la loi d'Arrhénius [207] :

$$s_L^0 \propto \sqrt{D_{th}A} \quad \delta_L^0 \propto \frac{D_{th}}{s_L} = \sqrt{\frac{D_{th}}{A}} \quad (2.58)$$

Dans le cas d'une flamme laminaire épaissie, les diffusivités thermique D_{th} et moléculaire D_k sont multipliées par un facteur d'épaississement F alors que le taux de dégagement de chaleur $\dot{\omega}_T$ et le taux de réaction $\dot{\omega}_k$ sont divisés par F :

$$D_{th} \quad \longrightarrow \quad F \times D_{th} \quad (2.59)$$

$$\dot{\omega}_T \quad \longrightarrow \quad \dot{\omega}_T / F \quad (2.60)$$

$$\dot{\omega}_k \quad \longrightarrow \quad \dot{\omega}_k / F \quad (2.61)$$

où $\dot{\omega}_k$ et $\dot{\omega}_T$ sont prédits par la loi d'Arrhénius du schéma cinétique. Par ce procédé, l'épaisseur de la flamme est augmentée d'un facteur F (Fig. 2.4) et la vitesse de flamme laminaire

est conservée. Si on prend l'exemple de l'équation de conservation des espèces, on obtient après épaississement :

$$\frac{\partial \rho Y_k}{\partial t} + \frac{\partial \rho(u_i + V_i^c)Y_k}{\partial x_i} = \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\rho F D_k \frac{W_k}{\bar{W}} \frac{\partial X_k}{\partial x_i} \right) + \frac{\dot{\omega}_k}{F} \quad (2.62)$$

$$\text{avec} \quad V_i^c = \sum_{k=1}^n F D_k \frac{W_k}{\bar{W}} \frac{\partial X_k}{\partial x_i} \quad (2.63)$$

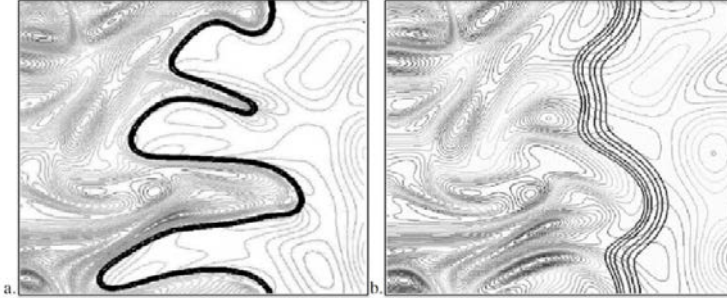


Figure 2.4 – Illustration du front de flamme épaissie ($F = 5$) (b) et du défaut de plissement par rapport à la flamme d'origine (a). Extrait de [41].

2.8.3.0.1 Fonctions d'efficacité

Lorsque la flamme est épaissie artificiellement, l'interaction entre la turbulence et la chimie, caractérisée par le nombre de Damköhler Da , est modifiée :

$$Da = \frac{l_t}{\delta_L^0} \frac{s_l^0}{u'(l_t)} \quad \longrightarrow \quad Da^{TF} = \frac{l_t}{\delta_L^0} \frac{F s_l^0}{u'(l_t)} = \frac{Da}{F} \quad (2.64)$$

Celle-ci devient ainsi moins sensible aux fluctuations de l'écoulement tandis que le plissement et la surface de flamme sont diminués. Pour prendre en compte ces effets, une fonction d'efficacité E , correspondant à un plissement de sous-maille est appliquée, ce qui a pour effet d'augmenter la vitesse de flamme sans impacter l'épaisseur de flamme :

$$D_{th} \quad \longrightarrow \quad E \times F \times D_{th} \quad (2.65)$$

$$\dot{\omega}_T \quad \longrightarrow \quad E \times \dot{\omega}_T / F \quad (2.66)$$

$$\dot{\omega}_k \quad \longrightarrow \quad E \times \dot{\omega}_k / F \quad (2.67)$$

Cette fonction d'efficacité est définie comme le rapport de plissement Ξ entre la flamme épaissie et non épaissie $E = \frac{\Xi(\delta_L^0)}{\Xi(F\delta_L^0)}$. Les fonctions d'efficacité de Colin *et al.* [41] et de Charlette *et al.* [35] permettant d'évaluer ce plissement sont présentées dans la suite. Elles reposent toutes les deux sur l'hypothèse d'équilibre entre la turbulence et la surface de flamme.

— Dans le modèle de Colin, le plissement est exprimé ainsi :

$$\Xi(\delta_l) = 1 + \alpha(Re_t)\Gamma \left(\frac{\Delta_e}{\delta_l}, \frac{u'_\Delta}{S_l} \right) \frac{u'_\Delta}{S_l} \quad (2.68)$$

où α est une fonction dépendant du nombre de Reynolds turbulent Re_t , Δ_e est la taille de filtre effective et Γ une fonction qui tient compte de l'effet d'étirement de toutes les échelles turbulentes plus petites que Δ_e .

— Le modèle de Charlette utilise une loi de puissance des modèles fractals, de la même façon que Gouldin [70]. Charlette *et al.* proposent ainsi la formulation suivante pour le plissement :

$$\Xi(\delta_l) = \left(1 + \min \left[\frac{\Delta_e}{\delta_l}, \Gamma \left(\frac{\Delta_e}{\delta_l}, \frac{u'_\Delta}{S_l}, Re_{\Delta_e} \right) \frac{u'_\Delta}{S_l} \right] \right)^\beta \quad (2.69)$$

où $\beta \simeq 0.5$ est une constante du modèle. Contrairement au modèle de Colin, il n'est pas nécessaire de fournir d'informations globales telles que l'échelle intégrale dans la mesure où le nombre de Reynolds turbulent utilisé est basé sur la taille de filtre Δ_e .

Dans les deux modèles, l'intensité turbulente caractéristique à l'échelle de la taille de filtre u'_Δ est estimée selon [41] :

$$u'_\Delta = c_2 \Delta_x^3 |\nabla^2(\nabla \times u)| \quad (2.70)$$

Cet opérateur est basé sur le rotationnel de la vitesse afin de supprimer la contribution due à la dilatation. La constante $c_2 \simeq 2$ est estimée à partir de simulations de turbulence homogène isotrope [4].

2.8.3.0.2 Améliorations et variantes de l'approche TFLES

L'approche dynamique : ajustement local du facteur d'épaississement

Appliquer un épaississement uniforme dans tout le domaine aurait pour effet une diminution des fluctuations scalaires dans les régions non réactives en raison de l'augmentation de la diffusion. Une procédure dite dynamique est donc utilisée dans la pratique afin d'appliquer F seulement dans les zones réactives [108]. Pour cela, un senseur de réaction

valant 0 en dehors des zones de réaction et croissant très rapidement vers 1 dans les zones de réaction est utilisé. L'épaissement local s'exprime ainsi :

$$F = 1 + (F_{max} - 1)S \quad (2.71)$$

où S est le senseur local et F_{max} est l'épaissement maximal déterminé localement en comparant la taille de maille et l'épaisseur de flamme laminaire :

$$\mathcal{F}_{max} = N_c \frac{\Delta_x}{\delta_l^0}. \quad (2.72)$$

où N_c désigne le nombre de points souhaité pour résoudre le front de flamme. Une valeur de 5 est généralement utilisée avec des schémas cinétiques réduits. Le senseur S peut prendre différentes formes, son but étant de localiser les zones de réaction à épaissir. Il est généralement basé sur une expression similaire à un taux de réaction d'Arrhénius :

$$\Omega = Y_F^{n_F} Y_O^{n_O} \exp\left(-0.5 \frac{E_a}{RT}\right), \quad (2.73)$$

qui est comparé à la valeur Ω_0 obtenue à partir d'une flamme prémélangée 1D. Le senseur s'exprime finalement :

$$\mathcal{S} = \tanh\left(\beta' \frac{\Omega}{\Omega_0}\right). \quad (2.74)$$

avec β' une constante arbitraire qui permet de contrôler la raideur du senseur. Une valeur usuelle est $\beta' \simeq 50$.

Adaptation du modèle TFLES pour des écoulements diphasiques

L'application du modèle TFLES pour des flammes diphasiques a été étudiée par Boileau [21] puis Paulhiac [137]. Lorsque les interactions entre la phase liquide et la flamme sont importantes et que le taux d'évaporation devient un facteur contrôlant la combustion, le modèle TFLES doit être adapté. En effet, en raison de l'épaissement de la zone de réaction, les gouttes s'évaporent sur une zone plus étalée (d'un facteur F). Par conséquent, les termes de transfert de masse et de chaleur dus à l'évaporation doivent être divisés par F . Le terme de traînée doit également subir une correction afin de conserver la vitesse de flamme dans le cas où la vitesse de glissement des gouttes est importante [21].

2.8.3.0.3 Avantages et limitations de l'approche TFLES

La méthode de flamme épaissie présente l'avantage d'être relativement simple à implanter. De plus, lorsque le maillage est raffiné, la LES tend vers une vraie DNS et l'épaississement F vaut 1 partout. Elle a été validée sur de nombreuses configurations, aussi bien académiques qu'industrielles [75, 88]. Enfin, elle ne nécessite aucune tabulation pour la chimie et peut être étendue pour des schémas cinétiques analytiques complexes [88].

Néanmoins, cette approche présente tout de même certaines limites, notamment liées au régime de combustion non prémélangée très présent dans les configurations diphasiques. En effet, même si le modèle TFLES a déjà été appliqué à des régimes partiellement prémélangés avec succès, celui-ci ne repose sur aucun socle théorique pour les flammes de diffusion pour lesquelles les vitesses de flammes et épaisseurs sont des concepts totalement différents des flammes de prémélange. De plus, les fonctions d'efficacité utilisées ont été obtenues à partir de flammes de prémélange et leur application à d'autres régimes de combustion est discutable. Les chapitres 6 et 7 décrivent les mécanismes contrôlant les flammes de diffusion laminaire et turbulente, et proposent pour ces flammes une méthode de modélisation dans le même esprit que le modèle TFLES des flammes prémélangées.

Equations et modèles pour la phase dispersée

Sommaire

3.1	Hypothèses de modélisation	69
3.2	Equations pour la phase liquide	70
3.3	Modèles macroscopiques pour la phase liquide.	71
	3.3.1 <i>Forces agissant sur une goutte isolée</i>	71
	3.3.2 <i>Evaporation d'une goutte isolée.</i>	73
3.4	Couplage avec la phase gazeuse	79

Dans cette thèse, la phase liquide est décrite selon une approche Lagrangienne déterministe aussi appelée approche DPS (Discrete Particule Simulation). Dans un premier temps, les hypothèses sur lesquelles repose l'approche DPS sont introduites (Section 3.1). Les équations décrivant l'évolution des gouttes liquides ainsi que leurs interactions avec la phase gazeuse sont ensuite présentées en Section 3.2. Les modèles utilisés pour calculer les termes sources d'évaporation et d'énergie sont décrit en Section 3.3. Le couplage avec la phase gazeuse se fait par le biais de terme sources de masse, de quantité de mouvement et d'énergie introduits dans les équations de Navier-Stokes (Section 3.4).

3.1 Hypothèses de modélisation

Dans le cadre de notre étude, les gouttes sont considérées comme des points matériels qui se déplacent dans l'espace et qui influent sur la phase gazeuse tels des termes sources de masse, quantité de mouvement et énergie. Ainsi, l'écoulement autour de la goutte et son sillage ne sont pas directement résolus. Cette hypothèse, appelée hypothèse du point source, n'est valide que sous les conditions suivantes :

- Le spray est considéré comme dilué, ce qui signifie que le fraction volumique liquide α_l est suffisamment faible ($\alpha_l < 10^{-4}$) pour négliger les collisions et les interactions

entre les gouttes voisines.

- Du fait de la petite taille des gouttes, les forces de tension superficielles sont prépondérantes devant les forces extérieures pouvant modifier la forme des gouttes. Par conséquent, celles-ci ont une forme sphérique.

Ces hypothèses restent généralement valables si l'on ne prend pas en considération les premières phases d'atomisation des films liquides où la fraction volumique liquide est très élevée et où on observe des ligaments liquides non sphériques. Une limitation supplémentaire imposée par l'hypothèse de point source est que le volume des gouttes doit être faible devant le volume des mailles de la grille Eulérienne. En effet, les conditions environnantes évaluées à la position des gouttes à partir des valeurs aux noeuds de la cellule contenant la goutte (indiquées par $f@p$), doivent en théorie correspondre à l'environnement à l'infini pour les modèles macroscopiques (Section 3.3), de façon à ne pas perturber le voisinage proche de cette goutte. L'erreur sur la traînée et l'évaporation liée à l'approximation point source est évaluée dans les travaux de Rangel [151] et Jenny [89]. Dans sa thèse, Iafrate [81] met de plus en évidence l'impact de la résolution du maillage sur les termes d'échange avec la phase gazeuse lorsque le maillage devient très fin par rapport à la taille de la goutte et propose ainsi d'appliquer les termes sources à un volume de contrôle fixe indépendant du maillage.

3.2 Equations pour la phase liquide

La méthode Lagrangienne déterministe consiste à suivre l'évolution de chaque particule dans le domaine du calcul en termes de trajectoire, masse et température. Pour ce faire, on résout les équations de la mécanique du point pour les particules soumises aux forces exercées par le fluide porteur.

$$\frac{dx_{p,i}}{dt} = u_{p,i} \quad (3.1)$$

$$\frac{dm_p u_{p,i}}{dt} = \sum F_{p,ext} \quad (3.2)$$

$$\frac{dm_p}{dt} = \dot{m}_p \quad (3.3)$$

$$\frac{dm_p h_{s,p}}{dt} = \dot{\Phi}_p \quad (3.4)$$

avec $x_{p,i}$ et $u_{p,i}$ la position et la vitesse dans la direction i de la particule p , m_p la masse de la particule et $h_{s,p}$ son enthalpie sensible. Les termes de droite $\sum F_{p,ext}$, \dot{m}_p et $\dot{\Phi}_p$ correspondent respectivement aux forces extérieures agissant sur la goutte, et à la variation de masse et d'énergie interne de la goutte, obtenues à partir des modèles macroscopiques détaillés

en Section 3.3. L'approche Lagrangienne utilisée dans cette thèse étant déterministe, ces équations sont résolues pour chaque particule physique présente dans le domaine.

3.3 Modèles macroscopiques pour la phase liquide

Le système d'équations 3.4 décrivant l'évolution du spray est non fermé et nécessite des modèles permettant de décrire l'effet du gaz sur la dynamique des gouttes $F_{p,ext}$, les flux de masse dus à l'évaporation \dot{m}_p ainsi que le changement de température des gouttes $\dot{\Phi}_p$. Les modèles utilisés par la suite sont présentés dans cette section. Il s'agit de modèles macroscopiques dérivés à partir de l'étude de l'évolution d'une goutte isolée.

3.3.1 Forces agissant sur une goutte isolée

On s'intéresse dans un premier temps à la dynamique d'une goutte isolée non évaporante. On fera l'hypothèse que les forces s'exerçant sur une goutte évaporante sont identiques. En réalité, une évaporation non uniforme de la goutte peut engendrer des forces de poussée supplémentaires qui restent néanmoins négligeables devant les autres forces modifiant la trajectoire de la goutte.

Force de traînée

La force de traînée F_D est la force agissant sur la particule induite par la différence de vitesse entre la phase porteuse et la goutte. En l'absence d'accélération relative de la particule sphérique par rapport à l'écoulement et dans un champ de pression uniforme, cette force s'exprime par :

$$\vec{F}_D = \frac{1}{2} \rho_g A C_D \|\vec{u}_g - \vec{u}_p\| (\vec{u}_g - \vec{u}_p) \quad (3.5)$$

où ρ_g est la masse volumique de la phase gazeuse, $A = \pi d_p^2/4$ est la surface projetée de la goutte, u_g et u_p sont respectivement la vitesse du gaz et de la goutte. C_D désigne le coefficient de traînée. La principale difficulté réside dans la détermination de ce coefficient qui doit être capable de rendre compte de phénomènes physiques présents pour une large gamme de Reynolds particulière $Re_p = \rho_g d_p \|\vec{u}_g - \vec{u}_p\| / \mu_g$. L'estimation la plus simple de C_D est fournie par Stokes de façon analytique [180] : $C_D = 24/Re_p$. Des estimations plus fines de C_D existent pour des gammes de Re_p plus ou moins grandes et sont répertoriées dans [126].

Dans le reste de l'étude, le coefficient de traînée est évalué par le biais de la relation empirique de Schiller & Nauman [165] :

$$C_D = \frac{24}{Re_p} (1 + 0.15Re_p^{0.687}) \quad (3.6)$$

Cette relation a été retenue car elle donne de bons résultats pour des nombres de Reynolds particuliers inférieurs à 800 représentatifs des applications aéronautiques visées.

Autres forces non prises en compte

Les gouttes peuvent également être soumises à des forces de pression liées à la poussée d'Archimède qui dépend notamment du rapport entre les masses volumiques du gaz et du liquide. Dans nos applications, $\rho_l \gg \rho_g$ ce qui implique que la force d'Archimède est négligeable devant le poids de la goutte. Des forces instationnaires liées à l'histoire de la goutte peuvent également être prises en compte dans certains cas. Parmi ces forces, la force de masse virtuelle liée à l'accélération de l'écoulement induite par la particule et la force de Basset [47] relative au développement de la couche limite autour de la goutte. Pour les écoulements ciblés dans cette thèse, dont le rapport des masses volumiques est très petit, ces deux forces instationnaires peuvent être raisonnablement négligées [48].

Equation retenue

Les forces prises en compte sur la dynamique de la particule se limitent finalement à la force de traînée et la gravité. L'équation retenue pour la quantité de mouvement de la particule s'écrit donc :

$$\frac{du_{p,i}}{dt} = -\frac{u_{p,i} - \tilde{u}_{g,i}}{\tau_p} \quad (3.7)$$

où τ_p correspond au temps de relaxation de la particule exprimé par :

$$\tau_p = \frac{4 \rho_p}{3 \rho_g} \frac{d_p}{C_D(Re_p) |u_{p,i} - \tilde{u}_{g,i}|} \quad (3.8)$$

Ce temps caractéristique particulaire peut être utilisé pour évaluer le comportement plus ou moins inertiel des particules par rapport au gaz via le nombre de Stokes $St = \frac{\tau_p}{\tau_f}$ où τ_f désigne un temps caractéristique de l'écoulement gazeux (Section 1.2.1).

3.3.2 Evaporation d'une goutte isolée

Comme pour la traînée, les termes \dot{m}_p et $\dot{\Phi}_p$ dans les équations 3.3 et 3.4 sont calculés à partir de l'analyse de l'évaporation d'une goutte isolée. Une revue des modèles théoriques applicables aux codes de mécanique des fluides proposée par Shazin [164] distingue les modèles hydrodynamiques classiques basés sur l'approche initialement proposée par Spalding [175] et les modèles multi-composants adaptés à l'évaporation de carburants réalistes comme le Diesel ou le kérosène [29, 76].

Les codes de CFD actuels privilégient aujourd'hui les modèles de type hydrodynamique pour des raisons de coût de calcul. Dans la suite, le modèle classique d'évaporation de Spalding [175] est présenté. La dérivation de ce modèle est à la base de la plupart des modèles d'évaporation plus avancés, dont certains sont rapidement présentés de manière non exhaustive.

3.3.2.1 Modèle d'évaporation de Spalding [175]

Le système d'équations décrivant l'évaporation d'une goutte peut être résolu analytiquement avec les hypothèses suivantes :

- la goutte est considérée comme sphérique et isolée, afin de négliger l'interaction avec les gouttes voisines.
- la conductivité thermique à l'intérieur de la goutte est considérée comme infinie. La température à l'intérieur de la goutte est donc uniforme. Dans une première approche, il est donc possible d'éviter la résolution de l'écoulement interne de la goutte en effectuant un bilan thermique à la surface de la goutte. A noter que des modèles existent pour prendre en compte l'écoulement à l'intérieur de la goutte [172].
- l'interface liquide/gaz est à l'équilibre thermodynamique ce qui permet d'utiliser la loi de Clausius-Clapeyron afin d'accéder à la fraction de carburant gazeux Y_F à l'interface gaz/goutte.

Grâce à ces hypothèses, les équations de la phase gazeuse peuvent être traitées sous forme quasi-statique et en coordonnées sphériques, par symétrie du problème (Fig. 3.1). Les équations de conservation de la quantité de mouvement, des espèces et de l'énergie gazeuses sont écrites entre la surface de la goutte (notée ζ) et le champ lointain (note ∞) :

$$\rho u r^2 = \text{constant} = \frac{\dot{m}_F}{4\pi} \quad (3.9)$$

$$\rho u r^2 \frac{dY_F}{dr} = \frac{d}{dr} (r^2 [\rho D_F] \frac{dY_F}{dr}) \quad (3.10)$$

$$\rho u r^2 \frac{dC_P T}{dr} = \frac{d}{dr} \left(r^2 \frac{\lambda}{C_P} \frac{dC_P T}{dr} \right) \quad (3.11)$$

où r désigne la composante radiale, \dot{m}_F le flux de vapeur de carburant à la surface, Y_F sa fraction massique, D_F la diffusivité thermique et C_p la capacité calorifique à pression constante du mélange. Dans le cadre de la dérivation analytique, ces deux dernières quantités sont considérées constantes radialement et évaluées selon les conditions à l'infini.

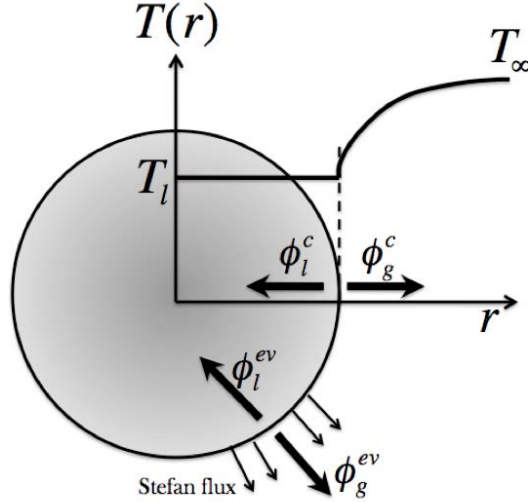


Figure 3.1 – Bilan thermique entre la surface de la goutte et l'infini.

Transfert de masse

Kuo [105] décrit comment obtenir le taux d'évaporation \dot{m}_p d'une gouttelette isolée en intégrant deux fois l'équation de conservation de la fraction massique de carburant gazeux Y_F (Eq. 3.10) entre le rayon d'interface r_ζ et un rayon infini r_∞ :

$$\dot{m}_p = \frac{dm_p}{dt} = -\pi S h d_p [\rho D_F] \ln(1 + B_M) \quad (3.12)$$

Le nombre de Sherwood Sh représente le rapport entre le transfert de masse par convection et celui par conduction. Il prend la valeur 2 dans une atmosphère au repos. B_M est le nombre

de Spalding de masse qui fait apparaître la différence de fraction massique de carburant gazeux entre l'interface et l'infini :

$$B_M = \frac{Y_{F,\zeta} - Y_{F,\infty}}{1 - Y_{F,\zeta}} \quad (3.13)$$

L'équation 3.12 montre que le taux d'évaporation quasi-statique est entièrement déterminé par les conditions à la surface de la goutte et à l'infini. Les conditions à la surface de la goutte sont obtenues en utilisant la relation de Clausius-Clapeyron :

$$X_{F,\zeta} = \frac{P_{cc}}{P} \exp \left(\frac{W_F L_v(T_{ref})}{\mathcal{R}} \left(\frac{1}{T_{cc}} - \frac{1}{T_\zeta} \right) \right) \quad (3.14)$$

où W_F désigne la masse molaire du carburant, \mathcal{R} la constante des gaz parfaits, P_{cc} et T_{cc} sont respectivement la pression et la température de référence qui correspondent à un point de la courbe de saturation du carburant. L_v est la chaleur latente massique d'évaporation qui représente la différence entre l'enthalpie gazeuse et liquide du carburant à la température de référence T_{ref} :

$$L_v = \Delta h_{s,F}(T_{ref}) = h_{s,F}(T_{ref}) - h_{s,p}(T_{ref}) \quad (3.15)$$

Dans l'Eq. 3.14, la variable manquante est la température de l'interface T_ζ que l'on suppose égale à celle de la goutte : $T_\zeta = T_p$. La condition ∞ correspond à l'état du gaz non perturbé par la présence de la goutte.

Finalement, $Y_{F,\zeta}$ peut s'écrire en fonction de la fraction molaire $X_{F,\zeta}$:

$$Y_{F,\zeta} = \frac{X_{F,\zeta} W}{X_{F,\zeta} W + (1 - X_{F,\zeta}) \overline{W}_{nF,\zeta}} \quad (3.16)$$

où $\overline{W}_{nF,\zeta}$ représente le masse molaire moyenne du pseudo-mélange constitué d'espèces autres que le carburant. En supposant que la composition de ce mélange est la même entre ζ et ∞ , on a :

$$\overline{W}_{nF,\zeta} = \overline{W}_{nF,\infty} = \frac{1 - Y_{F,\infty}}{1 - Y_{F,\infty} \frac{\overline{W}}{W_F}} \overline{W} \quad (3.17)$$

Loi du d^2 : évolution de la masse de la goutte

La décroissance du diamètre des gouttes est directement liée au taux d'évaporation \dot{m}_p qui vérifie par définition :

$$\dot{m}_p = \frac{d}{dt} \left[\frac{4}{3} \pi \rho_l r_p^3 \right] \quad (3.18)$$

Couplée à l'Eq. 3.12, on obtient la variation du carré du diamètre de la goutte :

$$d_p^2 = d_{p,0}^2 - \frac{8\rho_g D_F}{\rho_l} \ln(1 + B_M) \times t \quad (3.19)$$

où $d_{p,0}$ est le diamètre initial de la goutte. L'Eq. 3.19 permet également d'évaluer le temps d'évaporation de la goutte τ_{evap} :

$$\tau_{evap} = \frac{\rho_l d_{p,0}^2}{8\rho_g D_F \ln(1 + B_M)} \quad (3.20)$$

Transfert de chaleur : évolution de la température des gouttes

L'évolution de la température particulaire est obtenue en faisant un bilan d'enthalpie sur la goutte :

$$\frac{d}{dt} (m_p h_{s,p}(T_p)) = \Phi_l^c + \Phi_l^{ev} \quad (3.21)$$

où Φ_l^c et Φ_l^{ev} désignent respectivement le flux de chaleur par conduction et le flux d'enthalpie par changement de phase. L'hypothèse d'équilibre à l'interface permet d'écrire un bilan des flux thermiques à la surface de la goutte (Fig. 3.1) :

$$\Phi_l^{ev} + \Phi_l^c + \Phi_g^{ev} + \Phi_g^c = 0 \quad (3.22)$$

Les indices l et g correspondent respectivement aux flux de chaleur vers la goutte et vers le gaz. Les flux convectifs liquides Φ_l^{ev} et gazeux Φ_g^{ev} peuvent être exprimés en fonction de la chaleur latente de vaporisation L_v :

$$\Phi_l^{ev} + \Phi_g^{ev} = -\dot{m}_v h_{s,l}(T_\zeta) + \dot{m}_v h_{s,g}(T_\zeta) = -\dot{m}_v L_v(T_\zeta) \quad (3.23)$$

Le dernier terme à déterminer est le flux conductif Φ_g^c du côté gazeux. On peut trouver une expression du gradient de température du côté gazeux à la surface de la particule en intégrant deux fois l'équation de conservation de l'enthalpie (Eq. 3.11) entre la surface de la particule et l'infini :

$$\Phi_g^c = \pi \lambda d_p Nu(T_\zeta - T_\infty) \frac{\ln(B_T + 1)}{B_T} \quad (3.24)$$

Le nombre de Nusselt Nu représente le rapport entre les transferts de chaleur convectif et conductif, et de manière analogue au nombre de Sherwood, prend la valeur 2 dans une atmosphère gazeuse au repos. B_T est le nombre de Spalding pour la température :

$$B_T = \frac{(T_\infty - T_\zeta)\dot{m}_v C_p}{T_\zeta - T_\infty} \quad (3.25)$$

Il est possible de relier le nombre de masse de Spalding B_M et celui de température B_T :

$$B_T = (1 + B_M)^{\frac{Sh}{NuLe_v}} - 1 \quad (3.26)$$

avec Le_v le nombre de Lewis de l'espèce évaporante.

3.3.2.2 Variantes du modèle d'évaporation

Evaluation des propriétés de transport diffusif

Dans les Eq. 3.12 et 3.24, les propriétés de transport diffusif sont supposées constantes lors de l'intégration des équations de conservation. En réalité, les coefficients ρD_F et λ varient du fait du changement de composition et de température entre r_ζ et l'infini. Cette variation peut être prise en compte en choisissant judicieusement les valeurs de référence pour le calcul de ces coefficients. La règle du 1/3 est classiquement utilisée [80] :

$$T_i = \frac{2}{3}T_\zeta + \frac{1}{3}T_\infty \quad (3.27)$$

$$Y_{F,i} = \frac{2}{3}Y_{F,\zeta} + \frac{1}{3}(Y_{F,\infty}) \quad (3.28)$$

D'autres modèles de complexité croissante existent pour prendre en compte l'influence de la température sur les coefficients de transport [186], ou sur la variation radiale de masse volumique qui devient non négligeable lorsque la température environnante est très élevée [183]. Durant sa thèse, Sierra [75] propose de calculer les coefficients de transport à l'aide de solveurs dédiés du type CANTERA. Dans ce cas, le calcul de la viscosité gazeuse prend également en compte le mélange (Approximation de Wilke [204]).

Relaxation de l'hypothèse de milieu au repos

Dans le modèle de Spalding, la goutte est considérée dans un écoulement au repos. En présence d'un écoulement relatif par rapport à la goutte, des phénomènes physiques supplémentaires doivent être pris en compte afin de bien estimer l'évaporation :

- L'écoulement relatif autour de la goutte induit la formation d'une couche limite responsable d'une augmentation du mélange et donc des transferts de masse et de chaleur par rapport au cas au repos.

- Le cisaillement introduit par cette vitesse relative crée des mouvements à l'intérieur même de la goutte tendant ainsi à homogénéiser sa température. Ces deux phénomènes augmentent l'évaporation de la goutte et dépendent principalement de l'intensité de la vitesse relative entre la goutte et l'écoulement gazeux et donc du nombre de Reynolds particulaire Re_p défini en Section 3.3.1.

Pour prendre en compte cette augmentation, l'approche la plus répandue consiste à corriger les taux d'évaporation et de transfert de chaleur obtenus au repos en modifiant les nombres de Sherwood et de Nusselt avec la corrélation de Ranz-Marshall [153] :

$$Sh = 2 + 0.55Re_p^{1/2}Sc_v^{1/3} \quad (3.29)$$

$$Nu = 2 + 0.55Re_p^{1/2}Pr_v^{1/3} \quad (3.30)$$

Modèle d'Abramzon et Sirignano [2]

Abramzon et Sirignano [2] proposent une amélioration du modèle pour prendre en compte la présence de la couche limite convective dans la dérivation du modèle d'évaporation. En utilisant la théorie du 'film' [20], qui permet de définir une épaisseur massique et thermique de la couche limite, les auteurs introduisent deux facteurs de correction F_M et F_T tels que :

$$F_k = (1 + B_k)^{0.7} \left(\frac{\ln(1 + B_k)}{B_k} \right) \quad \text{avec} \quad k = T \text{ ou } M \quad (3.31)$$

Les nombres de Sherwood et de Nusselt corrigés s'écrivent :

$$Sh^* = 2 + (Sh - 2)/F_M \quad (3.32)$$

$$Nu^* = 2 + (Nu - 2)/F_T \quad (3.33)$$

avec Sh et Nu obtenus à partir des corrélations précédentes (Eq. 3.30). Ainsi, lorsque $F \rightarrow 1$, on a $Sh^* \rightarrow Sh$ et $Nu^* \rightarrow Nu$ ce qui conduit au modèle de Spalding classique.

Relaxation de l'hypothèse de goutte isolée

La dérivation du modèle de Spalding est réalisée pour une goutte isolée. Cette hypothèse reste acceptable dans le cadre de sprays dilués. Néanmoins, il existe des zones dans une chambre de combustion où le spray n'est que modérément dilué, notamment proche de l'injection. Afin de prendre en compte l'interaction entre gouttes voisines dans le calcul du taux d'évaporation, Chiu et Su [38, 40] proposent de corriger le taux d'évaporation de la

goutte isolée en fonction de la densité locale du spray. Cette dernière est évaluée de façon stochastique en mesurant la probabilité pour une goutte de trouver une autre goutte à une certaine distance. Dans le cadre de cette thèse, l'hypothèse de goutte isolée est conservée.

3.4 Couplage avec la phase gazeuse

Le couplage entre la phase gazeuse et la phase liquide se fait dans les deux sens ("two-way coupling") : l'effet du gaz est naturellement pris en compte dans les équations 3.2, 3.3 et 3.4 présentées précédemment. Afin de prendre en compte l'effet du liquide sur la phase gazeuse, les flux de masses \dot{m}_p , de quantité de mouvement $F_{p,ext}$ et d'énergie $\dot{\Phi}_p$ de chaque goutte n sont transférés à la phase gazeuse en introduisant des termes sources supplémentaires dans les équations de Navier-Stokes. Ces termes sources sont respectivement notés $S_m^{l \rightarrow g}$, $S_{qdm,i}^{l \rightarrow g}$ et $S_E^{l \rightarrow g}$ pour la masse, la quantité de mouvement et l'énergie.

$$S_m^{l \rightarrow g} = \frac{1}{\Delta V} \sum_{n=1}^N \Psi_n(x_{p,n}) \dot{m}_{p,n} \quad (3.34)$$

$$S_{qdm,i}^{l \rightarrow g} = \frac{1}{\Delta V} \sum_{n=1}^N \Psi_n(x_{p,n}) (-m_{p,n} F_{i,p,n}^{ext} + \dot{m}_{p,n} u_{p,n,i}) \quad (3.35)$$

$$S_E^{l \rightarrow g} = \frac{1}{\Delta V} \sum_{n=1}^N \Psi_n(x_{p,n}) \left(-m_{p,n} \vec{F}_{p,n}^{ext} \cdot \vec{u}_{p,n} + \frac{1}{2} \dot{m}_{p,n} \|\vec{u}_{p,n}\|^2 - \dot{\Phi}_{p,n} \right) \quad (3.36)$$

$$(3.37)$$

où ΔV est le volume de la maille, N le nombre de gouttes présentes dans ce volume et $\Psi_n(x_p)$ une fonction d'interpolation dépendante du maillage. Dans le cas d'AVBP, cette fonction d'interpolation est une fonction d'inverse distance :

$$\Psi_{n,j}(x_p) = \frac{1/d_j}{\sum_{k'=1, N_v} 1/d_{k'}} \quad (3.38)$$

où j est l'indice du sommet de l'élément et N_v le nombre de sommets.

Troisième partie

LES du mono-brûleur diphasique KIAI

Configuration non swirlée et non confinée

Sommaire

4.1	Présentation du banc expérimental KIAI	84
4.1.1	<i>Point de fonctionnement</i>	85
4.1.2	<i>Techniques de mesures employées</i>	86
4.2	Méthode numérique	87
4.2.1	<i>Domaine de calcul et maillage</i>	87
4.2.2	<i>Conditions limites et modèles utilisés</i>	88
4.2.3	<i>Cinétique chimique utilisée</i>	90
4.2.4	<i>Interaction flamme-turbulence</i>	91
4.2.5	<i>Méthodologie de calcul</i>	92
4.3	Structure et validation de l'écoulement diphasique non réactif	93
4.4	Validation de l'écoulement diphasique réactif	97
4.5	Analyse de la structure de flamme	102
4.5.1	<i>Zone de réaction interne (B1)</i>	104
4.5.2	<i>Zone de réaction externe (B2)</i>	105
4.5.3	<i>Régimes de combustion</i>	106
4.5.4	<i>Stabilisation de la flamme</i>	110
4.6	Influence du modèle d'évaporation	114
4.7	Influence de la cinétique chimique	117
4.7.1	<i>Validation sur flammes prémélangées 1D</i>	117
4.7.2	<i>Résultats sur la configuration KIAI et comparaison avec la chimie 2S</i>	117
4.7.3	<i>Stabilisation</i>	120
4.8	Conclusion	122

Comme vu à la Section 1.2, les interactions entre la turbulence, la dispersion et l'évaporation du spray, ainsi que le dégagement de chaleur issu de la combustion, peuvent conduire à des structures de flamme complexes et variées. Si les méthodes numériques actuelles permettent de simuler ces interactions et de reproduire les flammes de spray de façon qualitative, il est aujourd'hui nécessaire d'apporter des validations quantitatives précises et complètes, simultanément sur la turbulence gazeuse, la description du spray et la structure de flamme. Le développement des diagnostics expérimentaux permet de disposer de grandes

quantités de données simultanément sur la phase gazeuse et liquide. Aussi, dans ce chapitre, on propose d’effectuer une validation quantitative complète de la méthode LES-DPS ainsi qu’une analyse de la structure d’une flamme jet diphasique turbulente obtenue avec un brûleur non confiné et sans swirl. Cette dernière repose à la fois sur des diagnostics expérimentaux fournis par le CORIA et sur des résultats issus de simulations numériques réalisées avec le code AVBP. Des comparaisons quantitatives entre les expériences et la LES-DPS permettent de valider l’approche utilisée. La configuration est le brûleur KIAI diphasique du CORIA, pour laquelle de nombreuses mesures à la fois pour la phase gazeuse et la phase liquide ont été réalisées, en non réactif et avec combustion. Le banc expérimental KIAI diphasique est globalement semblable à son homologue monophasique conçu initialement durant les travaux de Frenillot [64] et Cordier [46] en vue d’étudier les différentes phases d’allumage de la flamme dans un environnement semblable à ce qu’on trouve dans les foyers aéronautiques. Une étude détaillée de ce point de fonctionnement monophasique est disponible dans la thèse d’Esclapez [57].

Le chapitre s’articule de la façon suivante :

- Présentation du banc KIAI, du point de fonctionnement étudié et des paramètres de la simulation numérique.
- Validation des résultats pour le cas diphasique non réactif.
- Validation des résultats pour le cas diphasique réactif.
- Analyse de la structure de flamme.

Ce travail a donné lieu à une publication présentée lors du 36th Symposium International de Combustion à Séoul.

4.1 Présentation du banc expérimental KIAI

Le banc expérimental KIAI diphasique est installé au CORIA à Rouen et est décrit dans les travaux de Verdier *et al.* [163, 188, 189, 190]. Celui-ci est très similaire à la configuration monophasique à l’exception du système d’injection de carburant. Dans l’étude de Barré [11], l’écoulement complet était constitué d’un prémélange de carburant et d’air. Le cas non prémélangé monophasique a ensuite été traité durant les travaux d’Esclapez [57] où l’écoulement principal était constitué d’air tandis que le tube central était alimenté par du méthane pur. Dans le cas présent, l’écoulement principal est également constitué d’air mais le carburant injecté est de l’*n*-heptane liquide. La figure 4.1 montre une photographie illustrant les principaux éléments du dispositif expérimental tandis que la Fig. 4.2 fournit un schéma de la configuration. Celle-ci est composée des éléments suivants :

- Un **plénum**, localisé en amont du système d’injection, permet de diminuer la turbulence générée par les tuyaux d’injection d’air. Une grille avec des billes est placée à travers le plénum afin de détruire les grosses structures.

- Un **système d'injection liquide** de type simplex générant un spray en forme de cône creux avec un angle de 80° .
- Un **tourbillonneur radial** composé de 18 vanes dont l'inclinaison peut être modifiée. Dans le cas présenté dans ce chapitre, les vanes sont disposées avec une inclinaison nulle de sorte à obtenir un écoulement non swirlé.

La configuration est non confinée et l'écoulement débouche directement dans l'atmosphère.

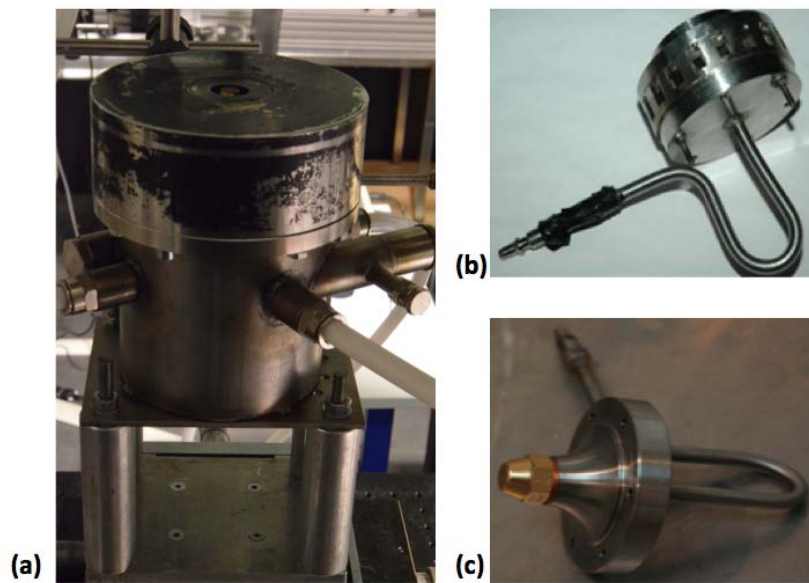


Figure 4.1 – (a) Plénum et tuyaux d'injections d'air (b) Tourbillonneur et tuyau d'injection liquide (c) Système d'injection liquide.

4.1.1 Point de fonctionnement

Les expériences sont conduites à pression atmosphérique et à température ambiante (298 K). Le carburant utilisé est de l'*n*-heptane. Le système d'injection est composé d'un injecteur de carburant liquide de type simplex (Danfoss, 1.35 kg/h, 80° cône creux) et d'un écoulement d'air co-courant annulaire externe non swirlé de diamètre interne et externe de 9 et 20 mm respectivement. Les débits d'air et de carburant liquide sont respectivement fixés à 6 g/s ($T = 298 \text{ K} \pm 2 \text{ K}$) et 0.28 g/s résultant en une vitesse débitante pour l'air de 19.9 m/s. Le point de fonctionnement est résumé dans le Tableau 4.1.

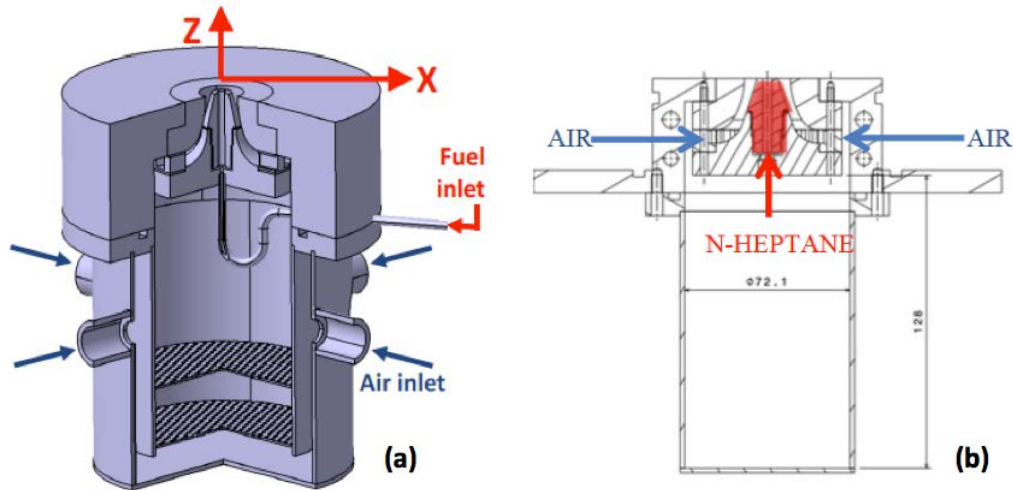


Figure 4.2 – (a) Représentation 3D du brûleur, (b) Coupe schématique avec en bleu l'écoulement d'air co-courant et en rouge l'injection de carburant liquide.

Débit air	Débit liquide (<i>n</i> -heptane)	Angle du spray	Température air et liquide	Pression	Richesse globale
6 g/s	0.28 g/s	80°	298 K	1 bar	0.71

Tableau 4.1 – Point de fonctionnement de la configuration diphasique KIAI.

4.1.2 Techniques de mesures employées

Différents diagnostics optiques ont été mis en place afin de rassembler des données pertinentes à la fois sur l'écoulement gazeux et la phase dispersée. Une photographie ainsi qu'un schéma du dispositif de mesures sont représentés en Fig. 4.3. Parmi les données disponibles, on trouve :

- Des visualisations de l'atomisation du spray par ombroscopie (Fig. 4.4).
- Les distributions en taille et vitesse des gouttes de carburant par Anémométrie Phase Doppler (PDA). En plus de la caractérisation du spray, la vitesse du gaz est également mesurée en ensemencant l'écoulement d'air co-courant avec des gouttes d'huile d'olive de diamètre 2.5 μm .
- La température moyenne locale des gouttes par le biais de la technique de Thermométrie arc-en-ciel globale (GRT).
- Des visualisations de la flamme par fluorescence OH planaire induite par laser (PLIF-OH).

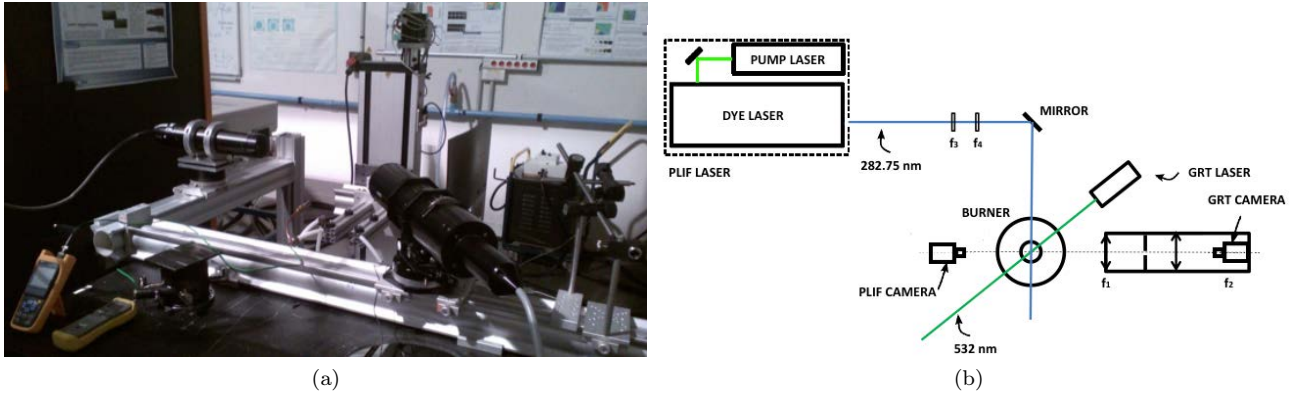


Figure 4.3 – (a) Photographie du dispositif de mesures et (b) représentation schématique de la double technique de mesure (OH-PLIF + GRT) [189].

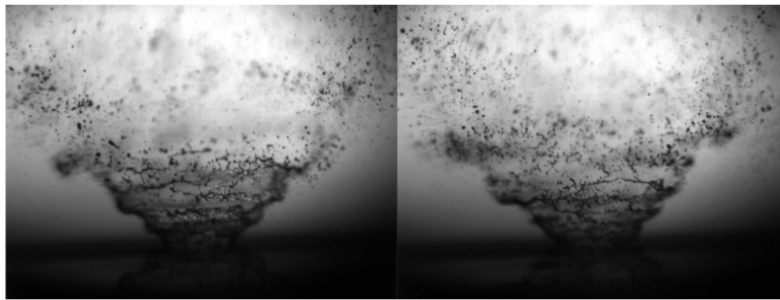


Figure 4.4 – Visualisation du spray par ombroscopie fournie par les expérimentateurs [188].

4.2 Méthode numérique

4.2.1 Domaine de calcul et maillage

La Fig. 4.5 présente le domaine de calcul utilisé pour les simulations LES. Celui-ci comprend le plénum ainsi que le système d'injection conduisant à une large boîte cylindrique de rayon $R_{atm} = 200$ mm et longueur $Z_{atm} = 300$ mm représentant l'atmosphère. La grille placée dans le plénum du banc expérimental a été remplacée par une injection d'air laminaire à l'entrée de celui-ci. Une étude réalisée dans la thèse d'Esclapez [57] a montré que ce changement n'a pas d'incidence sur le reste de l'écoulement. La direction axiale correspond à l'axe Z tandis que les axes X et Y désignent les directions transverses. Le diamètre externe de la sortie d'air est de $D_{ext} = 20$ mm. La géométrie est maillée entièrement avec des tétraèdres. Le maillage contient au total 53 millions de mailles, ce qui représente 9

millions de points. Le maillage est raffiné dans la région proche de l'injection de carburant et dans les zones où sont localisés les jets d'air co-courants. La taille caractéristique des plus petites cellules est de 0.1 mm.

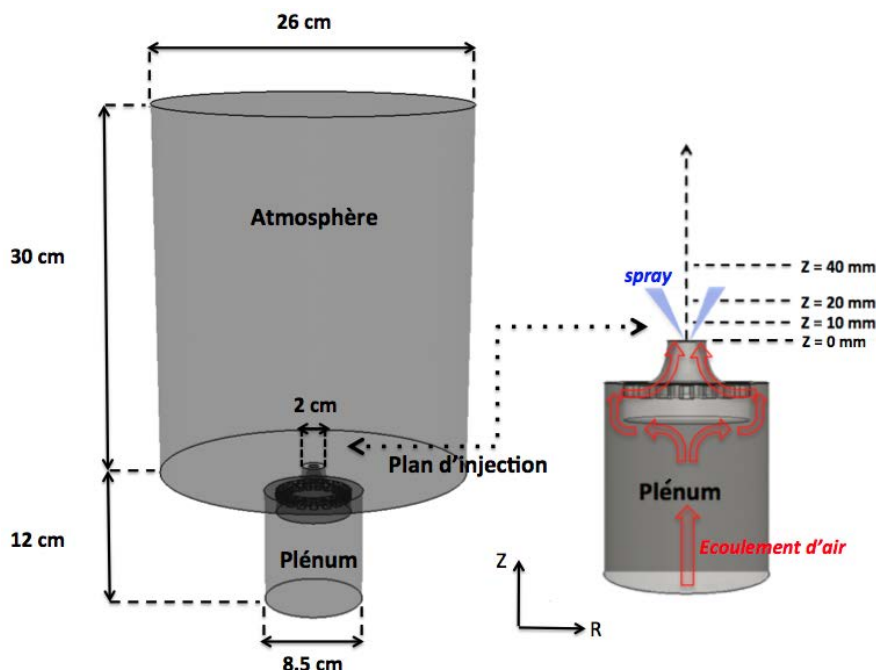


Figure 4.5 – *Domaine de calcul.*

4.2.2 Conditions limites et modèles utilisés

Les principaux paramètres numériques sont répertoriés dans le Tableau 4.2.

	Paramètres numériques
Schéma convectif	TTGC : $\mathcal{O}(3)$ en espace et en temps [41]
Schéma diffusif	Opérateur 2Δ
Modèle de sous-maille	WALE [54]
Viscosité artificielle	Modèle de Colin : $\epsilon^{(2)} = 0.01$, $\epsilon^{(4)} = 0.005$

Tableau 4.2 – Paramètres numériques pour AVBP.

L'injection liquide est modélisée avec l'approche FIMUR (Fuel Injection Method by Upstream Reconstruction) développée durant des travaux antérieurs de Sanjosé et Jaegle [86, 162]. Cette méthode permet de modéliser l'injection d'un spray à partir des caractéristiques de l'injecteur, diamètre de l'injecteur et angle du spray, ainsi que du débit liquide à injecter. Ces données suffisent à déterminer des profils de vitesse liquide du modèle FIMUR.

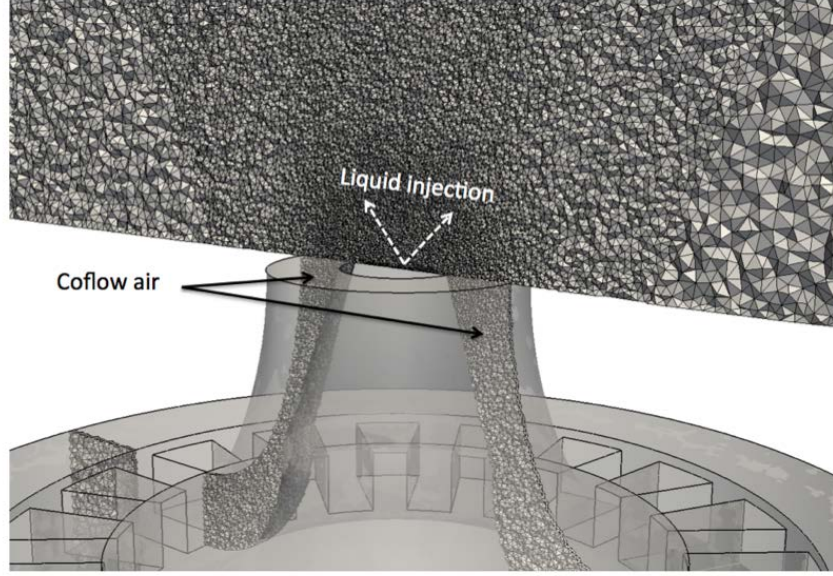


Figure 4.6 – Visualisation du maillage sur une coupe longitudinale.

La vitesse axiale est supposée constante dans le plan d'injection. Du fait du mouvement de rotation, la vitesse orthoradiale est linéaire selon le rayon et prend son maximum en proche paroi de l'injecteur. Enfin, le liquide tournant dans la cavité est considéré comme un corps solide, ce qui implique une vitesse radiale nulle en tout point. La polydispersion du spray est prise en compte lors de l'injection et se fait selon une distribution de taille de gouttes de type Rosin-Rammler (Eq. 4.1), qui s'étend de quelques microns à environ 70 μm de diamètre, avec un paramètre d'étalement q de 2.5 et un diamètre moyen de Sauter (SMD) de $d_p^{SMD} = 30 \mu\text{m}$ (Fig. 4.7), construite à partir des données expérimentales :

$$RR(d_p) = q \frac{d_p^{q-1}}{X^q} \exp \left[- \left(\frac{d_p}{X} \right)^q \right] \quad (4.1)$$

avec

$$X = \frac{\Gamma(1 + 2/q)}{\Gamma(1 + 3/q)} d_p^{SMD} \quad (4.2)$$

où Γ est la fonction gamma usuelle.

Le modèle d'évaporation utilisé est celui d'Abramzon et Sirignano (AS) [2] avec des propriétés de transport simplifiées présenté au Chapitre 3.

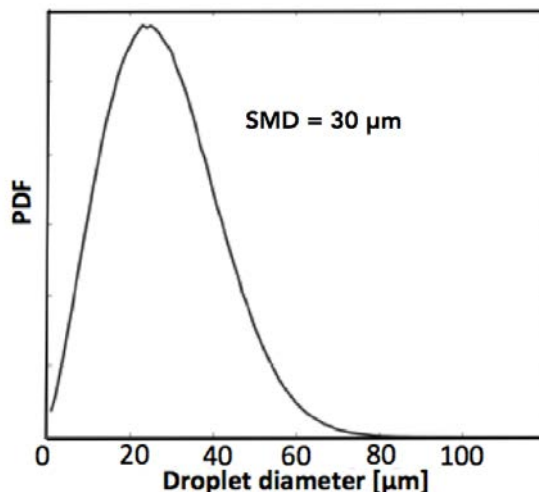
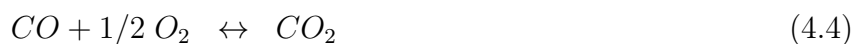
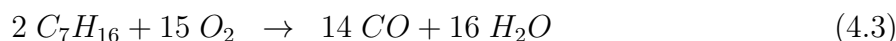


Figure 4.7 – Distribution de taille de gouttes de type Rosin-Rammler à l'injection ($d_p^{SMD} = 30 \mu\text{m}$, $q = 2.5$).

4.2.3 Cinétique chimique utilisée

La cinétique chimique employée pour la combustion du n -heptane est décrite par un schéma réduit à 2 étapes ($2S_C7H16_DP$) [137] construit suivant la méthodologie proposée par Franzelli [63] afin de reproduire correctement la vitesse de flamme laminaire ainsi que la température adiabatique de fin de combustion pour une large gamme de conditions opératoires. Le schéma comprend six espèces et deux réactions : la réaction d'oxydation irréversible du n -heptane en CO (1) et la réaction d'équilibre $CO - CO_2$ (2).



Le taux de réaction des équations 4.3 et 4.4 s'écrivent selon la loi classique d'Arrhenius :

$$k_{f,1} = A_1 f_1(\Phi) \exp(-T_{a1}/T) [C_7H_{16}]^{n_f} [O_2]^{n_{O_2,1}}, \quad (4.5)$$

$$k_{f,2} = A_2 f_2(\Phi) \exp(-T_{a2}/T) [C_0]^{n_{CO}} [O_2]^{n_{O_2,2}}. \quad (4.6)$$

où A_i sont les facteurs pré-exponentiels, $T_{a,i}$ les températures d'activation, et n_i les ordres de réactions, fournis dans le tableau 4.3. La réaction 2 inverse est obtenue à travers la loi d'action des masses.

	Réaction 1	Réaction 2
Facteur pré-exponentiel A_j	1.4×10^{11}	5.0×10^9
Energie d'activation E_{a_j}	29000 cal/mol	21000 cal/mol
Ordres de réaction	$n_f = 0.6$	$n_{CO} = 1$
	$n_{O_2,1} = 0.9$	$n_{O_2,2} = 0.5$

Tableau 4.3 – Coefficients chimiques ajustés du schéma réduit $2S_C_7H_{16}_DP$.

Les fonctions de correction des facteurs pré-exponentiels (PEA), qui permettent d'obtenir une prédiction correcte de la vitesse de flamme laminaire pour les mélanges riches [60], prennent la forme suivante :

$$f_1(\Phi) = \frac{2}{[1 + \tanh(\frac{\Phi_{0,1} - \Phi}{\sigma_{0,1}})] + B_1[1 + \tanh(\frac{\Phi - \Phi_{1,1}}{\sigma_{1,1}})] + C_1[1 + \tanh(\frac{\Phi - \Phi_{2,1}}{\sigma_{2,1}})]} \quad (4.7)$$

$$f_2(\Phi) = \frac{1}{2}[1 + \tanh(\frac{\Phi_{0,2} - \Phi}{\sigma_{0,2}})] + \frac{B_2}{2}[1 + \tanh(\frac{\Phi - \Phi_{1,1}}{\sigma_{1,1}})] + \quad (4.8)$$

$$\frac{C_2}{2}[1 + \tanh(\frac{\Phi - \Phi_{2,2}}{\sigma_{2,2}})] \times [1 + \tanh(\frac{\Phi_{3,2} - \Phi}{\sigma_{3,2}})] \quad (4.9)$$

avec les paramètres d'ajustement fournis dans le tableau 4.4 :

	$\Phi_{0,j}$	$\sigma_{0,j}$	B_j	$\Phi_{1,j}$	$\sigma_{1,j}$	C_j	$\Phi_{2,j}$	$\sigma_{2,j}$	$\Phi_{3,j}$	$\sigma_{3,j}$
$j = 1$	1.1635	0.0518	1.131	1.243	0.101	$1.2e^4$	1.494	0.0082	-	-
$j = 2$	1.146	0.045	$1.5e^{-4}$	1.2	0.04	0.035	1.215	0.03	1.32	0.09

Tableau 4.4 – Coefficient des fonctions de correction PEA (Eqs. 4.7 et 4.9) pour $2S_C_7H_{16}_DP$.

Le schéma a été validé par comparaison avec un mécanisme détaillé [174] pour des flammes laminaires prémélangées dans des conditions ambiantes de pression et température. Un bon accord en termes de vitesse de flamme laminaire et de température adiabatique de fin de combustion (Fig. 4.8) est obtenu sur la plage de richesse $\phi = 0.5 - 1.5$, les erreurs relatives moyennes étant respectivement de 3% et 4%.

4.2.4 Interaction flamme-turbulence

L'échelle de Kolmogorov, estimée a priori comme $\eta_k \sim l_t Re_t^{-3/4}$ [149], où Re_t désigne le nombre de Reynolds turbulent et l_t l'échelle intégrale vaut $\eta_k \simeq 60 - 80 \mu\text{m}$ avec l_t basé sur le diamètre du jet et u' basé sur la vitesse RMS à la sortie du jet. Dans la région de la flamme, le rapport entre la taille de maille et l'échelle de Kolmogorov est de l'ordre de $\Delta_x/\eta_k \simeq 1.25 - 3$. Ainsi, les échelles non résolues ne représentent qu'une part minime de

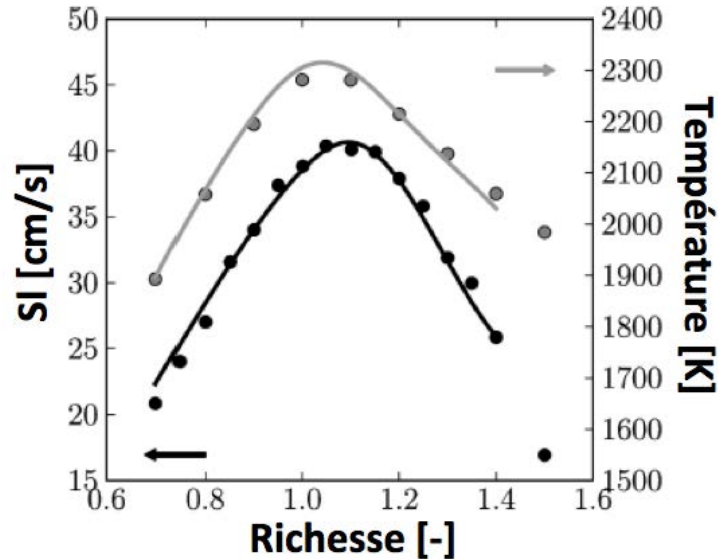


Figure 4.8 – Vitesse de flamme laminaire (noir) et température adiabatique de fin de combustion (gris) en fonction de la richesse à pression et température ambiantes. Symboles : chimie détaillée [174]. Ligne : $2S_C7H16_DP$. [137]

l'énergie fluctuante totale. Cette hypothèse est confirmée par les faibles valeurs de viscosité turbulente calculées avec le modèle WALE dans la région de la flamme. D'autre part, l'épaisseur d'une flamme laminaire heptane-air purement gazeuse à pression atmosphérique est de l'ordre 0.4 mm , c'est-à-dire $4\Delta_x$ dans la région la plus raffinée du maillage. Ayant été observé que la présence de gouttes a pour effet d'augmenter l'épaisseur de flamme [198], le maillage est donc ici suffisamment fin pour résoudre le front de flamme. A partir de ces considérations, les interactions flamme-turbulence de sous-maille sont négligeables et la simulation ne nécessite pas d'utiliser un modèle de combustion.

4.2.5 Méthodologie de calcul

La première étape consiste à effectuer une simulation LES monophasique (écoulement d'air seul) avec le schéma numérique Lax-Wendroff (2^{nd} ordre en espace et en temps) jusqu'à atteindre un état stationnaire. On peut alors passer au schéma numérique TTGC [42] puis commencer à injecter des gouttes. Ce calcul permet l'étude de l'écoulement diphasique non réactif (Section 4.3). Parallèlement à cela, la simulation du cas réactif est initiée en déposant des gaz brûlés chauds en aval de l'injecteur. Une fois la flamme stabilisée, le calcul est convergé et les statistiques peuvent être rassemblées. Les différentes étapes sont répertoriées en Fig. 4.9. Le coût total de la simulation est d'environ 175 000 heures CPU sur le calculateur Lenovo Némo du CERFACS.

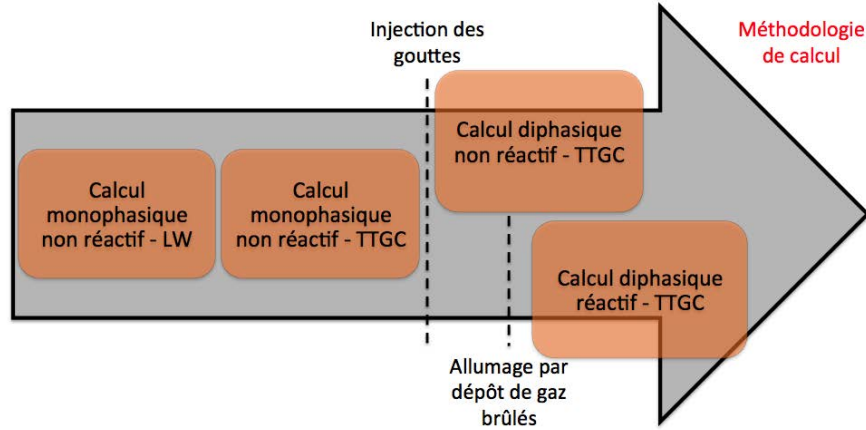


Figure 4.9 – Méthodologie de calcul.

4.3 Structure et validation de l'écoulement diphasique non réactif

La structure de l'écoulement non réactif est décrite à partir des Fig. 4.10, 4.11 et 4.12 qui représentent respectivement des champs moyens de vitesse, vitesse axiale et radiale ainsi que les champs RMS correspondants. L'air est injecté à l'entrée du plénum, puis est dévié et accéléré à travers les veines du système d'injection. Les jets d'air co-courant se rejoignent au niveau du plan d'injection pour former un jet unique qui présente les caractéristiques classiques d'un jet turbulent. On peut voir sur les champs moyens en Fig. 4.11 que l'écoulement est principalement axial et présente une légère expansion radiale plus en aval. Les champs de RMS montrent que l'intensité turbulente est maximale au niveau de la couche de mélange externe formée entre l'air au repos et le jet d'air ainsi qu'au niveau de la jonction des jets d'air co-courant à la sortie du plan d'injection.

Les résultats numériques obtenus sont tout d'abord évalués par comparaison avec les données expérimentales en terme de dynamique de l'écoulement gazeux. La figure 4.13 montre des profils radiaux de la vitesse axiale moyenne et RMS du gaz à cinq distances axiales de l'injecteur, représentées sur les Fig. 4.11 et 4.12. Les valeurs moyennes se révèlent être en très bon accord (Fig. 4.13a) et permettent notamment de retrouver le pics de vitesse à $R = 6$ mm correspondant au jet d'air co-courant. La vitesse axiale négative à $R = 0$ mm dénote l'existence d'une petite zone de recirculation centrale juste derrière l'injecteur, également visible sur la Fig. 4.10. Lorsqu'on s'éloigne du plan d'injection, les jets d'air co-courant se rejoignent pour n'en former plus qu'un large avec un profil de vitesse axial plat. Les niveaux de RMS obtenus avec la LES sont également en bon accord avec ceux fournis par les expérimentateurs (Fig. 4.13b). Les fluctuations sont maximales

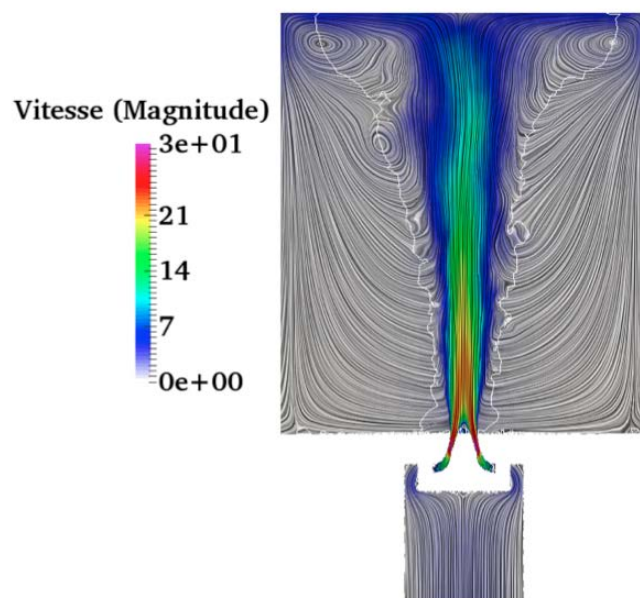


Figure 4.10 – Champ moyen de vitesse pour la phase gazeuse avec les lignes de courants et un isocontour de vitesse axiale nulle. Cas non réactif.

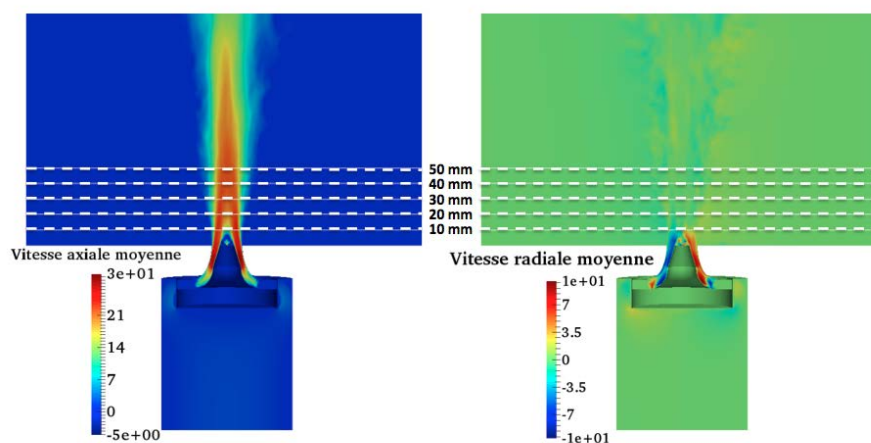


Figure 4.11 – Champs moyens de vitesse axiale et radiale pour la phase gazeuse. Cas non réactif.

au niveau des couches de mélange des jets d'air avec une intensité maximale de 30%. On peut toutefois noter que les niveaux de RMS relevés dans les simulations sont toujours légèrement inférieurs aux expériences, ce qui peut s'expliquer par le fait que la contribution de sous-maille n'est pas incluse dans les résultats numériques.

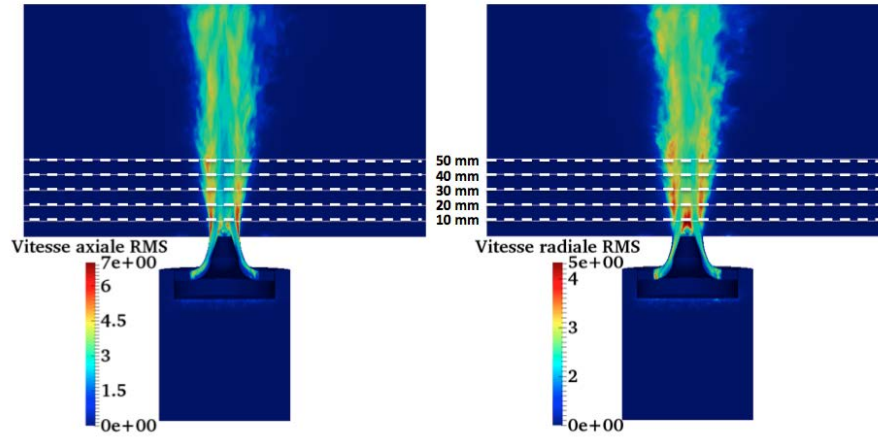


Figure 4.12 – Champs de vitesse axiale RMS et de vitesse radiale RMS pour la phase gazeuse. Cas non réactif.

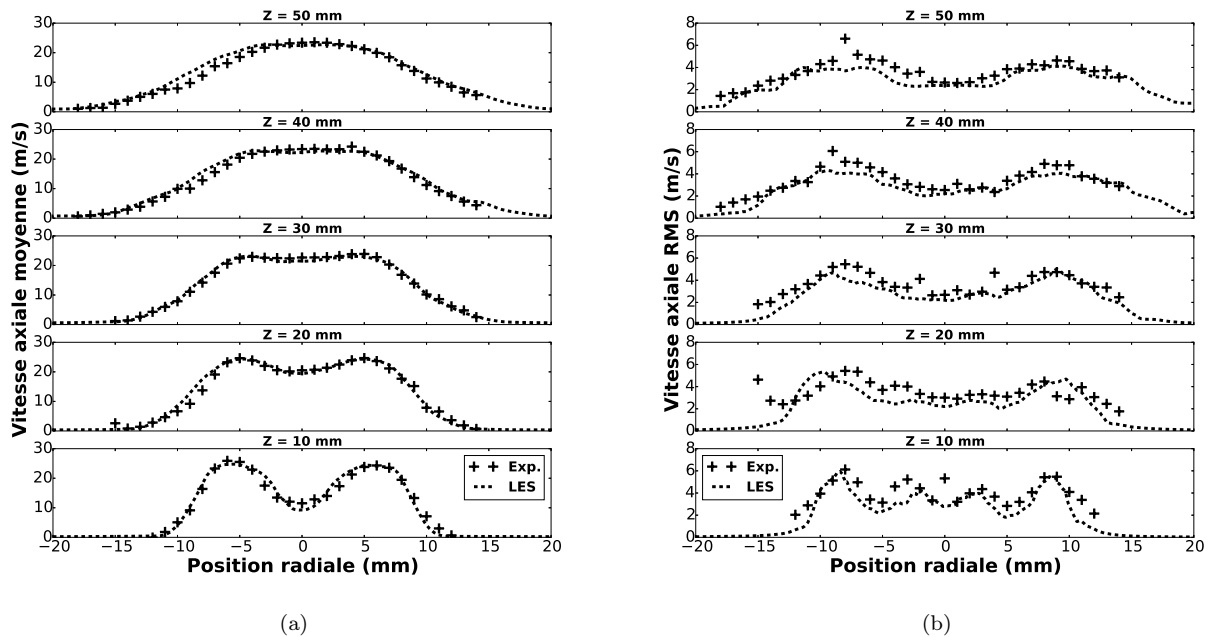


Figure 4.13 – Profils radiaux de vitesse axiale (a) moyenne et (b) RMS pour la phase gazeuse à différentes positions axiales; (+) Exp.; (- -) LES. Cas non réactif.

Le jet d'air co-courant génère également des vitesses radiales (Fig. 4.14) environ 10 fois inférieures aux vitesses axiales à $Z = 10$ mm et qui deviennent très vite quasiment nulles

($Z = 40$ mm). Comme pour la vitesse axiale, l'accord entre la LES et les expériences pour la vitesse radiale moyenne (Fig. 4.14a) et RMS (Fig 4.14b) est très bon. Il est à noter que contrairement aux valeurs moyennes, les fluctuations de vitesse radiale et axiale sont du même ordre de grandeur car elles résultent toutes les deux de la turbulence générée par le jet d'air.

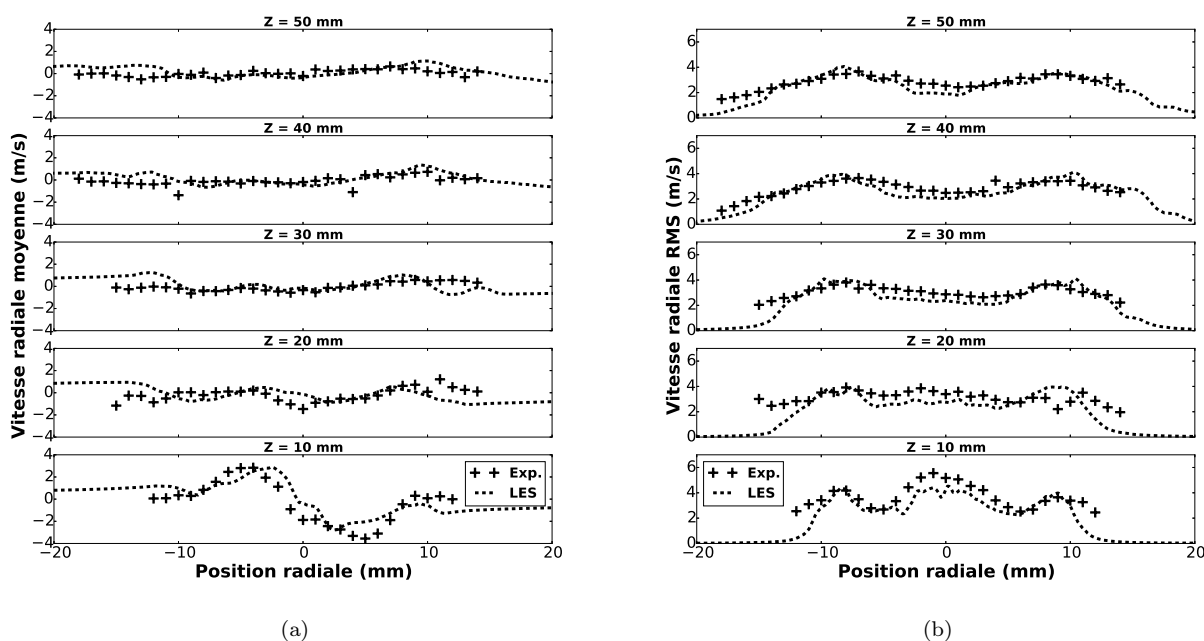


Figure 4.14 – Profils radiaux de vitesse radiale (a) moyenne et (b) RMS pour la phase gazeuse à différentes positions axiales ; (+) Exp. ; (- -) LES. Cas non réactif.

Le même type de comparaison est effectué pour la phase dispersée, visible sur la Fig. 4.15 où les gouttes sont colorées par leur taille. Comme attendu, le spray a bien une forme conique avec un demi-angle de 40° . La distribution des gouttes est quant à elle particulière, les grosses gouttes se trouvant majoritairement sur les bords du spray et les petites gouttes étant concentrées dans le centre du jet. Afin de vérifier quantitativement la bonne reproductibilité du spray, des profils de vitesse de gouttes conditionnées par leur taille sont tracés en Fig. 4.16. Pour rendre les résultats statistiquement comparables, le volume de contrôle utilisé dans la simulation LES pour suivre les gouttes est de la même taille que pour les mesures PDA ($100 \mu\text{m} \times 120 \mu\text{m}$) [189]. La Fig. 4.16 montre des profils de vitesse axiale et radiale des gouttes en fonction de leur position radiale à différentes distances axiales de l'injecteur. Les points expérimentaux représentent des valeurs moyennes avec leur incertitude alors que les points numériques correspondent aux gouttes repérées dans le volume de contrôle durant la simulation. Les gouttes sont classées par groupe de taille : 0-15 μm ,

15-35 μm et 35-60 μm . Un accord satisfaisant est observé entre les expériences et la LES, démontrant ainsi la bonne reproduction du spray. Les profils de vitesse des gouttes sont relativement similaires aux profils gazeux. Les grosses gouttes inertielles se trouvent sur la partie externe du spray tandis que les petites gouttes se comportent comme des traceurs et sont entraînées par le jet d'air expliquant ainsi leur forte concentration proche de l'axe du spray. Cela est d'autant plus visible sur la Fig. 4.17 qui montre la distribution radiale de la taille des gouttes aux mêmes positions axiales, ainsi que sur la Fig. 4.18 qui représente des distributions de taille de goutte locales. La plupart des écarts avec les expériences sont observés pour les plus grosses gouttes sur la partie externe du jet. Ces écarts peuvent être dus à un manque de convergence statistique résultant du faible nombre de grosses gouttes dans la simulation.

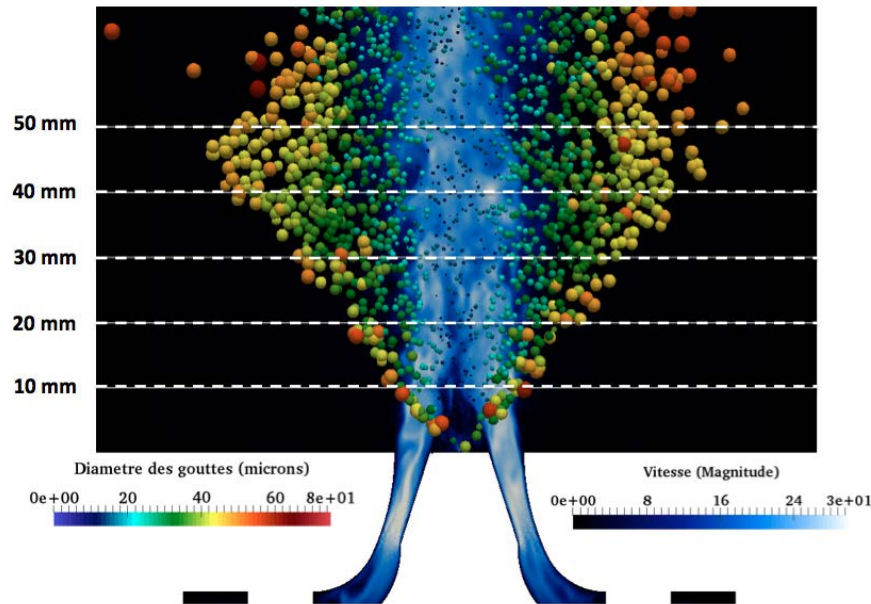


Figure 4.15 – Visualisation du spray en LES-DPS superposé au champ de vitesse de la phase gazeuse. Les gouttes sont colorées selon leur taille.

4.4 Validation de l'écoulement diphasique réactif

On s'intéresse maintenant au cas réactif pour lequel on réalise le même type de validations. La flamme de spray obtenue expérimentalement est visible sur la photographie en Fig. 4.19. Sur cette photographie, on peut voir, de gauche à droite, le spray seul par diffusion de Mie, le spray avec la flamme, et enfin la flamme sans traitement spécifique. La flamme de spray expérimentale est détachée du plan d'injection et exhibe une première

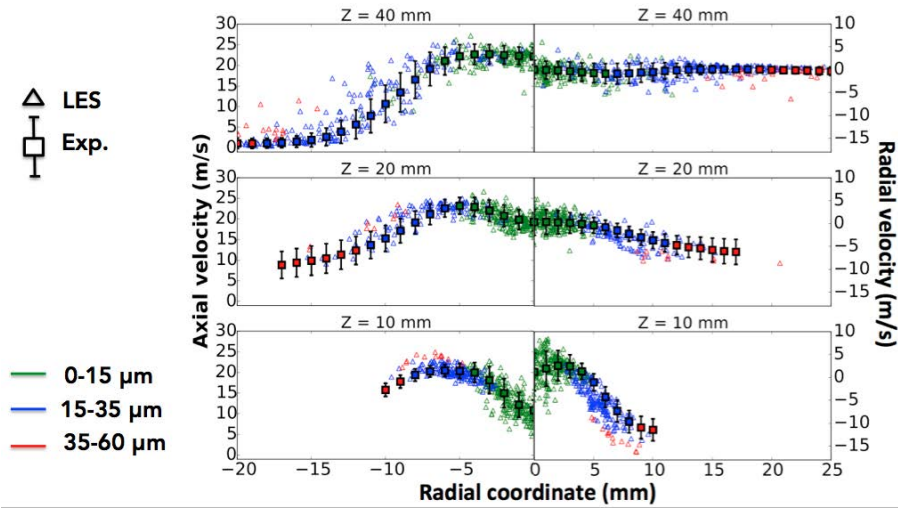


Figure 4.16 – Profils radiaux de vitesse axiale (gauche) et radiale (droite) des gouttes (vert : 0-15 μm ; bleu : 15-35 μm ; rouge : 35-60 μm) à $Z = 10$ mm, $Z = 20$ mm et $Z = 40$ mm ; (\square) Exp. ; (\triangle) LES. Les barres d'erreur sont proportionnelles aux valeurs de RMS mesurées. Cas non réactif.

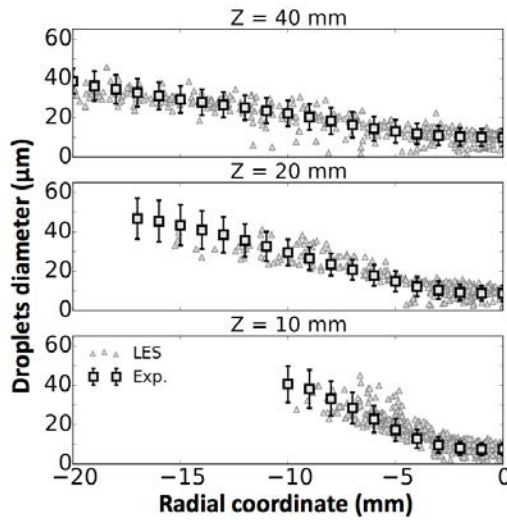


Figure 4.17 – Profils radiaux de diamètre de gouttes à $Z = 10$ mm, $Z = 20$ mm et $Z = 40$ mm. (\square) Exp. ; (\triangle) LES. Les barres d'erreur sont proportionnelles aux valeurs de RMS mesurées. Cas non réactif.

zone de réaction de faible luminosité bleue, puis une zone de réaction jaune très lumineuse en aval.

La figure 4.20 montre une visualisation instantanée de la flamme dans une section verticale à la fois pour l'expérience (OH-PLIF) et la LES. La forme globale de la flamme est très similaire dans les deux cas : la flamme diphasique est détachée et stabilisée ap-

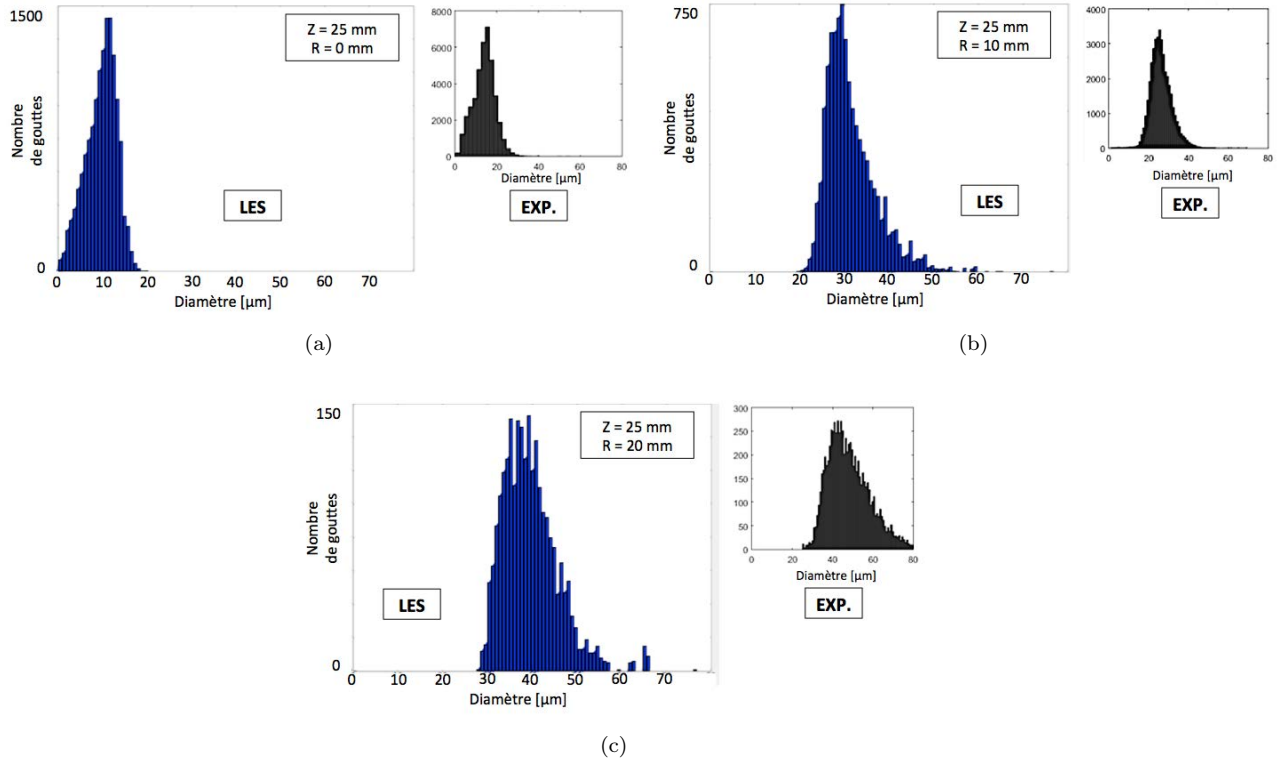


Figure 4.18 – Histogrammes de taille goutte à $Z = 25$ mm pour différentes positions radiales. Cas non réactif.

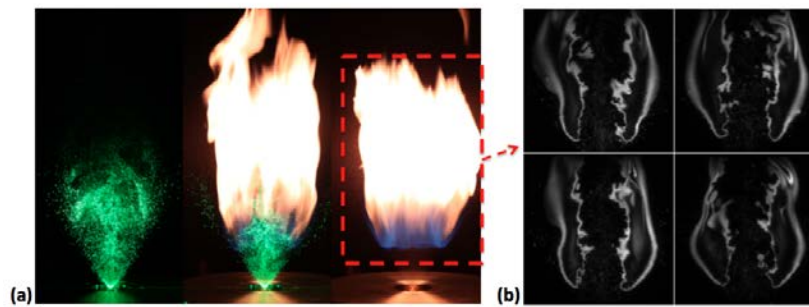


Figure 4.19 – (a) De gauche à droite : spray seul par diffusion de Mie, spray avec flamme, flamme seule (b) Images OH-PLIF instantanées à 4 instants différents [189]

proximativement 25 ± 3 mm en aval de l'injecteur dans l'expérience. Dans le cas de la LES, la hauteur de décollement de la flamme est plus courte à 20 ± 1 mm. Cette différence peut être due à la chimie simplifiée utilisée et/ou aux transferts thermiques aux parois qui

ne sont pas pris en compte dans la simulation. Le processus de stabilisation de la flamme est discuté plus en détail en Section 4.5.4 et 4.7.3. Il est possible de définir des zones bien distinctes représentées sur la Fig. 4.20. La flamme possède deux branches correspondant à une zone de réaction interne (B1) et une zone de réaction externe (B2). On observe que la zone (B1) est davantage plissée que la zone (B2). Les deux branches se rejoignent au pied de flamme (S). Il est important de préciser que la longueur de détachement de la flamme dans le cas de la LES est de 20 mm et est donc plus courte que celle mesurée expérimentalement. La structure de la flamme de spray est analysée en détail en Section 4.5.

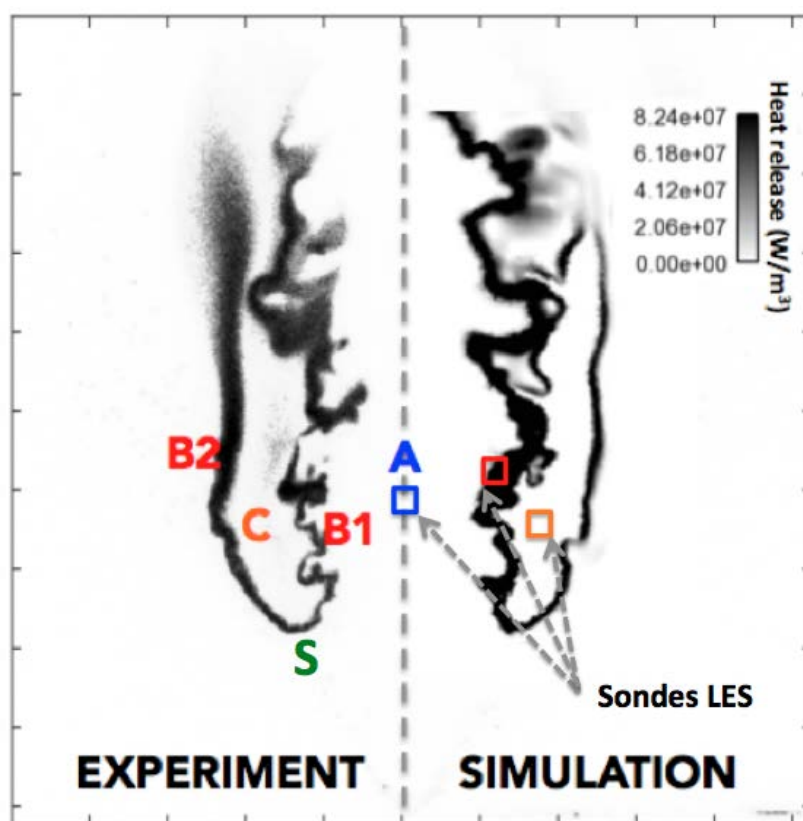


Figure 4.20 – Visualisations instantanées de la flamme : (a) image OH-PLIF, (b) Champ de dégagement de chaleur en LES.

La dynamique de l'écoulement dans le cas réactif reste très similaire au cas non réactif (Fig. 4.21 et 4.22). On peut néanmoins noter que le jet est globalement plus large par rapport au cas non réactif en raison de l'accélération due à l'expansion des gaz chauds issus de la combustion. Les fluctuations turbulentes sont quant à elles maximales au niveau de la couche de mélange externe comme dans le cas non réactif. Comme on peut le voir sur les

Fig. 4.23 et 4.24, les comparaisons entre les expériences et la LES sont très satisfaisantes, aussi bien pour les valeurs moyennes que pour les RMS. A noter que pour être consistant, la position axiale des profils comparés a été adaptée de 5 mm pour prendre en compte la différence de hauteur de détachement de la flamme observée entre expérience et LES. Concernant la phase dispersée, l'accord entre expériences et simulation est également satisfaisant (Fig. 4.25). Les mêmes observations que pour le cas non réactif peuvent être faites en termes de distribution de gouttes en vitesse et en taille. Des profils de température de gouttes sont tracés en Fig. 4.26. Cette température moyenne est calculée de façon identique dans les expériences et la simulation, par pondération avec la taille des gouttes selon une loi en $d^{7/3}$: $\langle \overline{T_p} \rangle = \langle \sum_p T_p d_p^{7/3} \rangle / \langle \sum_p d_p^{7/3} \rangle$ (i.e plus le diamètre des gouttes est important, plus leur contribution à la température moyenne est importante). Ces profils exhibent les mêmes tendances dans les deux cas malgré des différences dans les températures maximales atteintes par les gouttes à travers la flamme. Pour $Z < 20$ mm, les gouttes sont toujours au-dessous de la flamme et leur température est similaire à la température d'injection de 298 K. A l'approche de la position axiale du front de flamme, la température des gouttes reste relativement stable au centre tandis qu'elle augmente rapidement à partir de $r = 8$ mm. Dans le cas de la LES, les gouttes chauffent jusqu'à la température humide qui est d'environ $T_w = 370$ K dans ces conditions particulières alors que la température maximale mesurée expérimentalement est de 337 K. La cause de ces écarts n'a pas été déterminée et nécessite des investigations supplémentaires, aussi bien du côté de la technique GRT utilisée pour les mesures qui est relativement récente que de la simulation numérique.

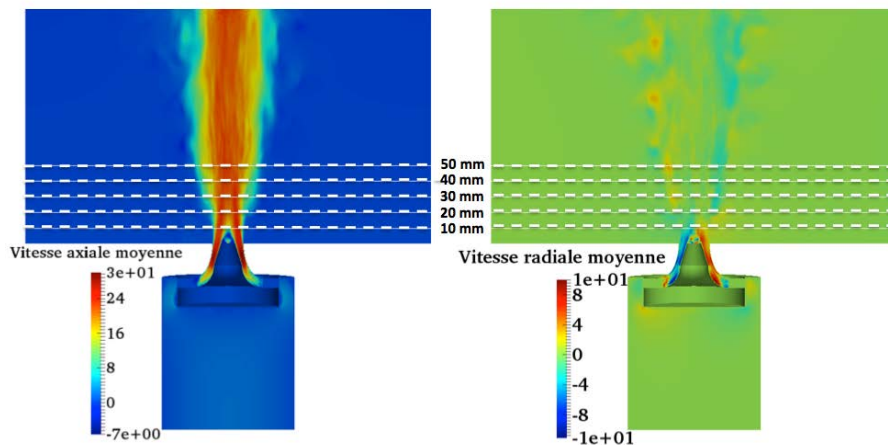


Figure 4.21 – Champs moyens de vitesse axiale et radiale pour la phase gazeuse. Cas réactif.

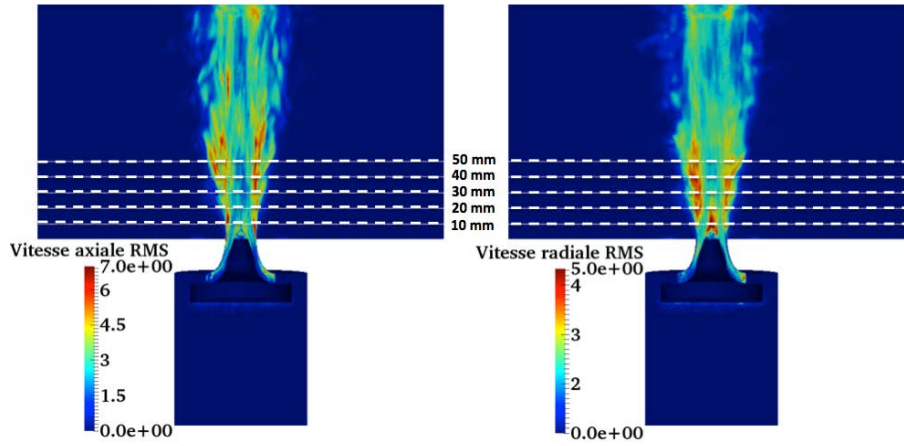


Figure 4.22 – Champs de vitesse axiale RMS et de vitesse radiale RMS pour la phase gazeuse. Cas réactif.

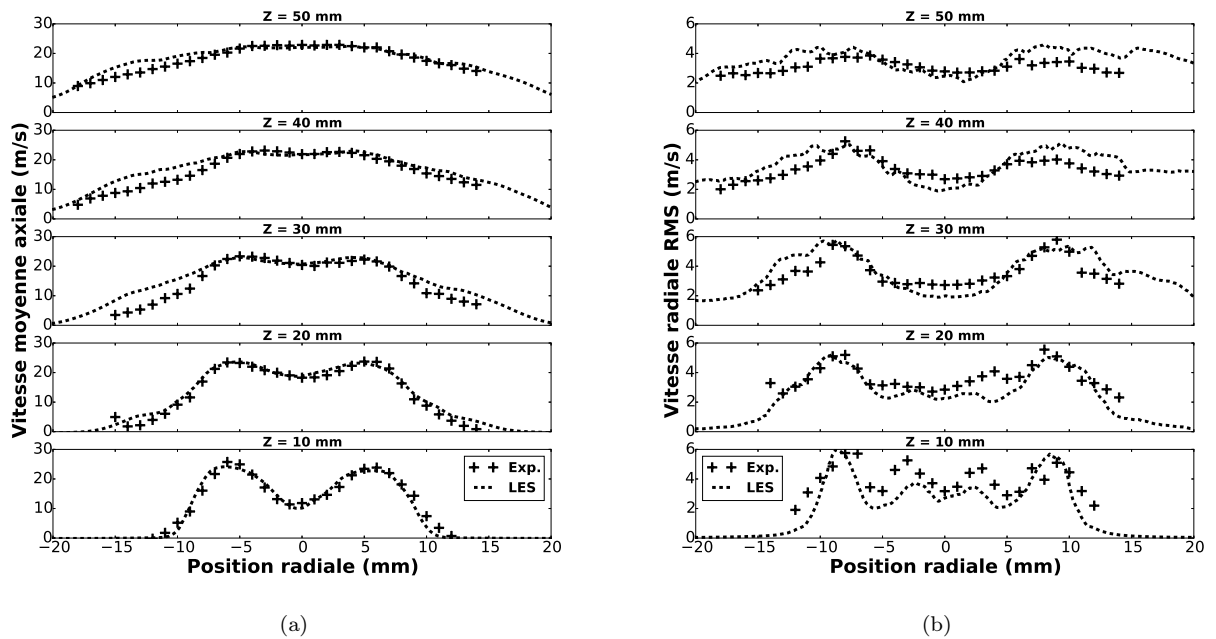


Figure 4.23 – Profils radiaux de vitesse axiale (a) moyenne et (b) RMS pour la phase gazeuse à différentes positions axiales ; (+) Exp. ; (- -) LES. Cas réactif.

4.5 Analyse de la structure de flamme

Les validations entre LES et expériences étant satisfaisantes, cette section est consacrée à l'analyse de la structure de la flamme de spray.

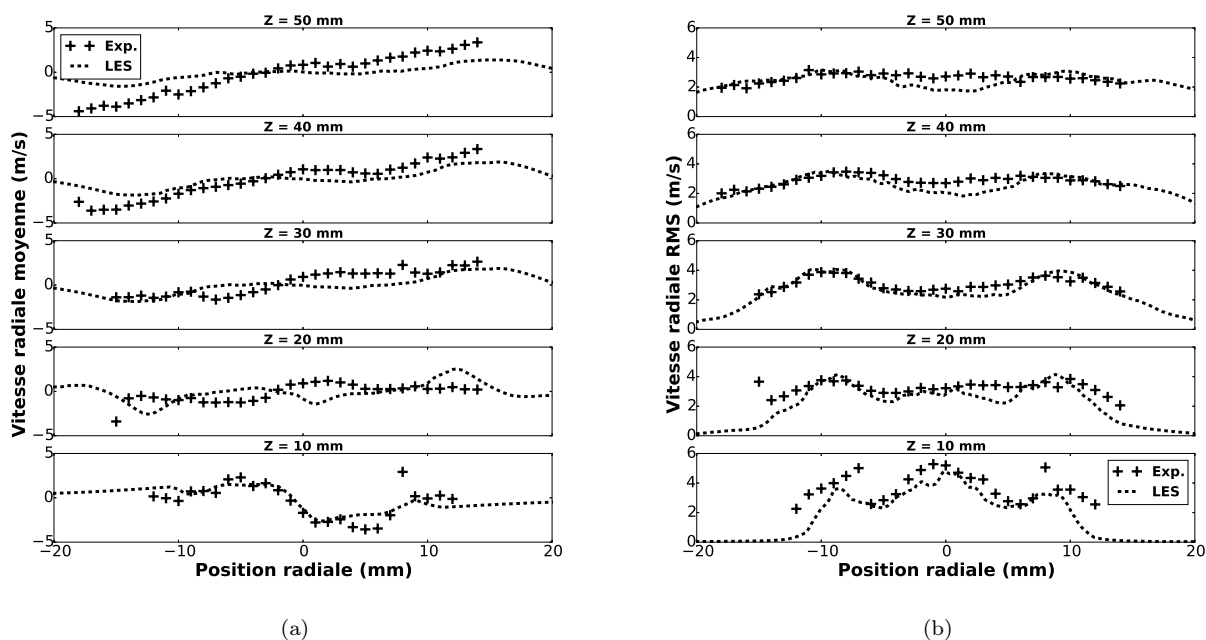


Figure 4.24 – Profils radiaux de vitesse radiale (a) moyenne et (b) RMS pour la phase gazeuse à différentes positions axiales; (+) Exp.; (-) LES. Cas réactif.

La région (C) entre les deux fronts de flamme (B1) et (B2) contient un mélange principalement constitué de gaz brûlés et de vapeur de carburant comme on peut le voir sur des champs de fraction massique d'espèces et de fraction de mélange (Fig. 4.27 et 4.28) tandis que la région centrale (A) délimitée par la zone de réaction interne (B1) est composée d'air frais et de petites gouttes. Pour expliquer la forme particulière de cette flamme, on s'intéresse à la distribution des gouttes et à leur trajectoire par rapport à la position de la flamme en Fig. 4.29. Sur cette figure sont représentées, d'une part les trajectoires des gouttes colorées par leur taille avec la flamme identifiée par l'image OH-PLIF obtenue expérimentalement et d'autre part, la même chose pour la LES avec la flamme identifiée par un champ de dégagement de chaleur. Comme on l'a déjà vu dans la partie précédente de validation, les petites gouttes restent principalement dans la zone centrale froide où elles s'évaporent lentement et ne traversent jamais la flamme. Les grosses gouttes se concentrent quant à elles en bordure du spray, traversent le pied de flamme (S) et atteignent la région chaude (C) où elles continuent à produire de la vapeur de carburant. La structure des flammes internes et externes résulte ainsi en grande partie de cette distribution de gouttes de carburant. Dans la suite, chacune des zones (B1), (B2) et (S) est analysée en détail.

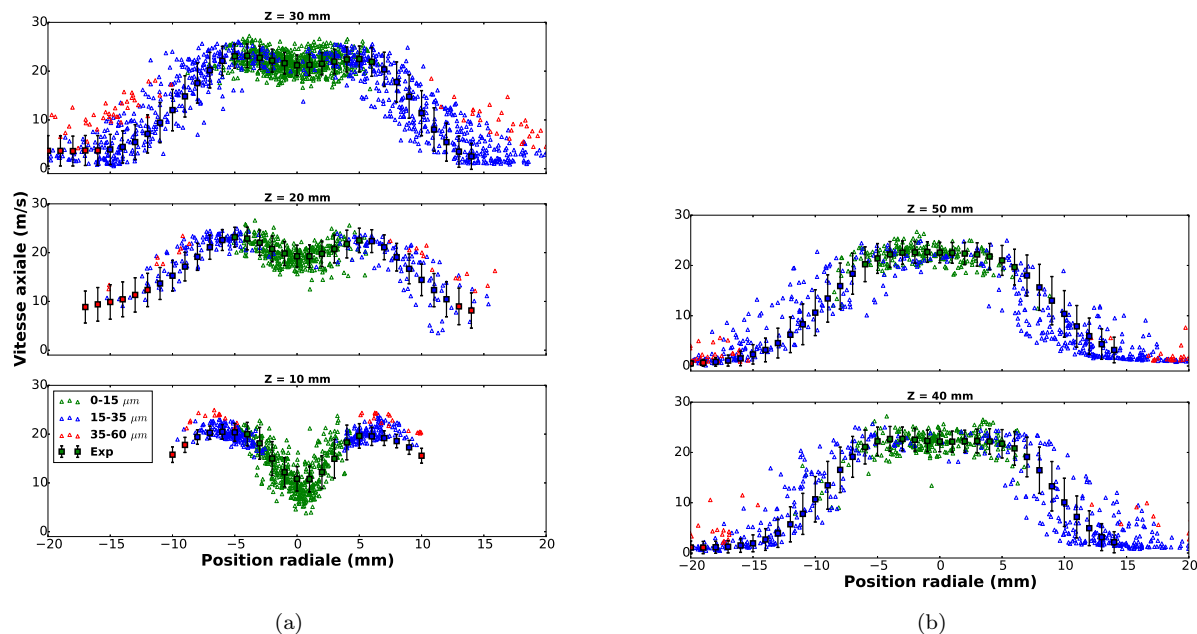


Figure 4.25 – Profils radiaux de vitesse axiale des gouttes (vert : 0-15 μm ; bleu : 15-35 μm ; rouge : 35-60 μm) à différentes positions axiales; (\square) Exp.; (\triangle) LES. Les barres d'erreur sont proportionnelles aux valeurs de RMS mesurées. Cas réactif.

4.5.1 Zone de réaction interne (B1)

Pour prendre en compte la présence de carburant liquide, on définit la fraction massique de carburant équivalente que représentent les gouttes $Y_{F_l} = \rho_l \alpha_l / [\rho_l \alpha_l + \rho(1 - \alpha_l)]$ où ρ_l et α_l sont respectivement la masse volumique du liquide et la fraction volumique. La zone de réaction interne (B1) est située entre la zone centrale (A) et la région de gaz brûlés (C). Des PDFs de la richesse gazeuse pour ces trois régions sont représentées en Fig. 4.30. On peut voir que la vapeur de carburant est principalement présente dans la région (C), où les moyennes et grosses gouttes (20-60 μm), qui représentent la majeure partie de la masse liquide injectée, s'évaporent rapidement et conduisent à un mélange trop riche pour brûler. Au contraire, les petites gouttes présentes dans la région froide centrale (A) ne constituent qu'une petite partie de la masse de liquide injectée et subissent une évaporation lente, ce qui résulte en un mélange trop pauvre pour brûler. Cette observation est corrélée par le champ de taux d'évaporation de la Fig. 4.31 qui montre une évaporation intense dans la région (C) et une évaporation plus faible dans la région centrale (A). Entre ces deux régions, une flamme (B1) s'établit à $r = 10$ mm, c'est-à-dire au niveau de la couche de mélange externe du jet d'air (Fig. 4.29), entre la vapeur de la zone (C) et l'air de la zone (A). A cet endroit, la température est assez élevée pour permettre une évaporation rapide des gouttes.

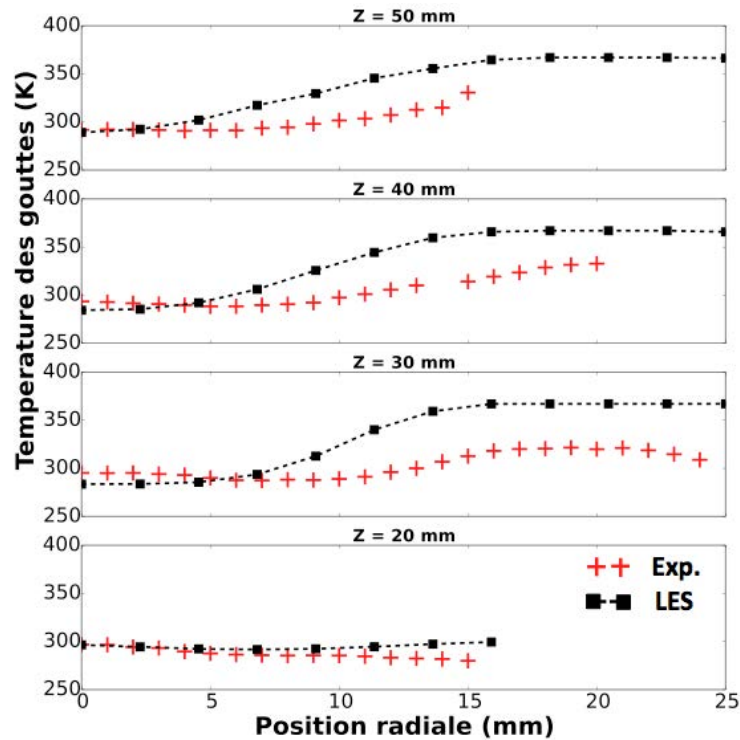


Figure 4.26 – Profils radiaux de température des gouttes à plusieurs positions axiales. Cas réactif.

De plus, l'augmentation de la richesse par évaporation est renforcée par la masse volumique du gaz plus faible à température élevée. L'apparence très plissée et fluctuante de la flamme (B1) provient de la forte turbulence induite par la couche de mélange externe du jet comme l'illustre la Fig. 4.32 avec le champ d'énergie cinétique turbulente à la fois pour l'expérience et la LES. Sur cette figure, on peut voir en effet que la zone de réaction interne est située exactement dans les zones où l'énergie cinétique turbulente est la plus importante.

4.5.2 Zone de réaction externe (B2)

La zone de réaction externe (B2) est principalement due à la présence des grosses gouttes situées sur la partie externe du spray comme on peut le voir sur la Fig. 4.29. A la sortie de l'injecteur, ces gouttes interagissent en premier lieu avec le jet d'air froid et commencent à s'évaporer lentement. Lorsqu'elles sont suffisamment proches du pied de flamme (S), leur température augmente brusquement, donnant lieu à une évaporation très rapide ce qui donne lieu à une augmentation significative de la fraction massique de carburant (Fig. 4.27). Ces gouttes alimentent d'abord le pied de flamme (S), puis celles qui subsistent après l'avoir traversé continuent à s'évaporer dans la région de gaz brûlés (C). La vapeur de carburant

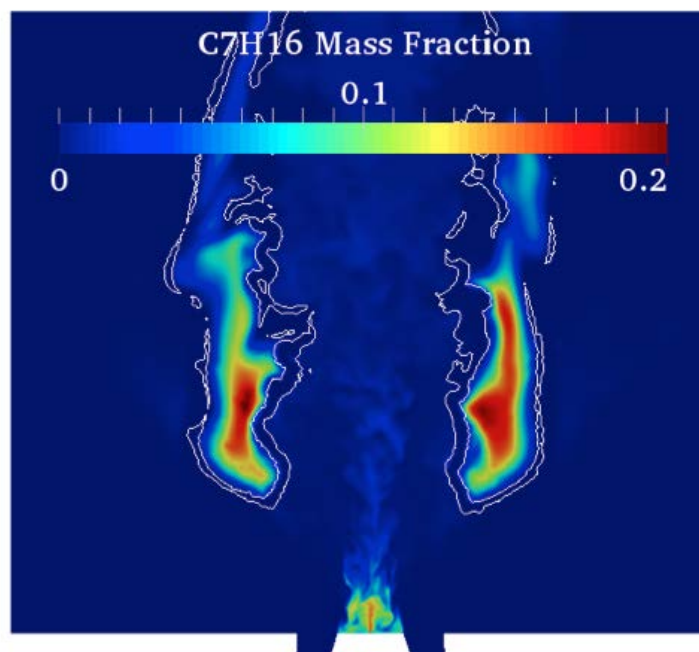


Figure 4.27 – Champ instantané de carburant gazeux avec un isocontour de dégagement de chaleur. (LES)

ainsi générée dans cette zone très riche va pouvoir brûler avec l'air extérieur, permettant ainsi la formation d'une zone de réaction externe (B2). Il est à noter que la branche externe de la flamme (B2) n'est pratiquement pas plissée car elle est située à une distance radiale supérieure à 25 mm, c'est-à-dire en dehors du jet, et où l'air est quasiment au repos (Fig. 4.32).

4.5.3 Régimes de combustion

Comme on peut s'y attendre, l'évaporation des gouttes conduit non seulement à des inhomogénéités dans le champ de fraction massique de carburant mais induit également des modes de combustion prémélangés et non prémélangés. Il est possible de caractériser le régime de combustion avec l'indice de Takeno [208] défini comme :

$$Takeno = \frac{\nabla Y_F \cdot \nabla Y_O}{|\nabla Y_F \cdot \nabla Y_O|} \quad (4.10)$$

où Y_F et Y_O désignent respectivement les fractions massiques de carburant gazeux et d'oxydant. Les valeurs positives de l'indice de Takeno (respectivement négatives) indiquent une combustion prémélangée (respectivement non prémélangée). La figure 4.33 montre un

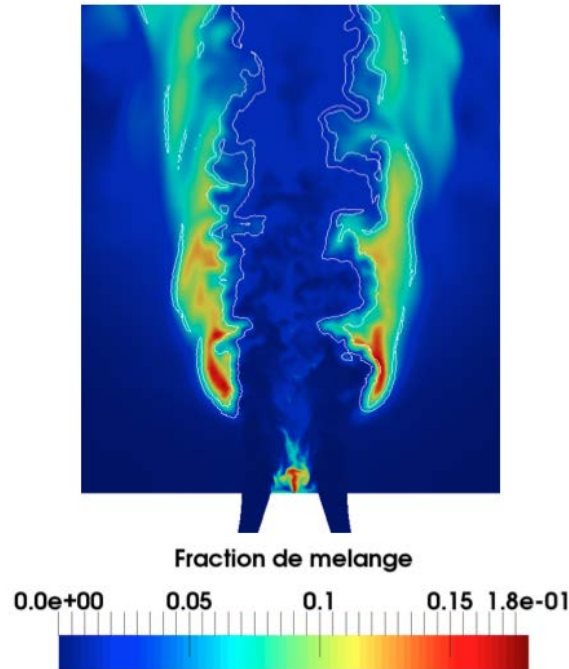


Figure 4.28 – Champ instantané de fraction de mélange avec un isocontour de dégagement de chaleur. (LES)

champ d'indice de Takeno. Celle-ci révèle une structure de flamme relativement complexe qui combine flamme de prémélange et de diffusion. En particulier, la zone de réaction interne (B1) exhibe une double structure. En effet, on note une flamme de prémélange qui brûle la vapeur mélangée à l'air de la région (A), mais aussi une flamme de diffusion très proche du côté de la région (C). Ce type de structure double est caractéristique des flammes de spray [43] et sa structure est détaillée dans la suite de cette section. La zone de réaction externe (B2) se révèle quant à elle être une flamme de diffusion pure.

Afin de compléter l'analyse de la structure de flamme, un scatterplot de la température en fonction de la fraction de mélange dans un plan vertical est montré en Fig. 4.34. La fraction de mélange est celle définie par Bilger [16] rappelée en Section 6.1.1, et ne prend pas en compte la phase liquide. Les points sont différenciés par leur localisation pour distinguer (B1) et (B2) ainsi que par leur indice de Takeno. Enfin, seuls les points des zones de réaction sont représentés. Sur cette figure, on distingue la flamme de diffusion attachée à la zone de réaction interne (B1) de la flamme de diffusion externe (B2). Comme il était attendu, les flammes de diffusion et la température maximale se situent au niveau de la fraction de mélange stoechiométrique ($z_{st} = 0.062$). La flamme de diffusion interne semble avoir la même structure que la flamme de diffusion externe. On peut néanmoins remarquer que les

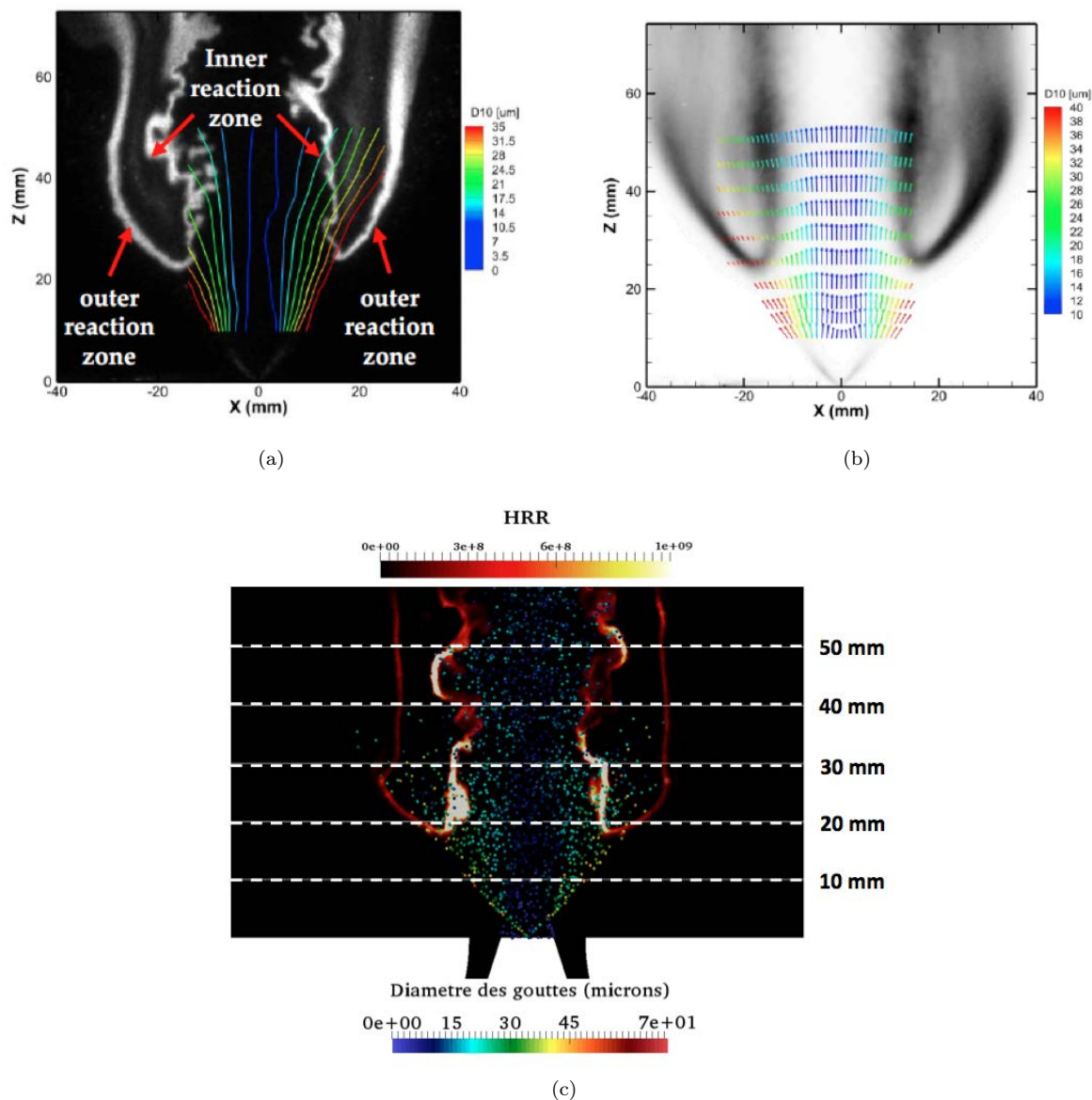


Figure 4.29 – (a) Image OH-PLIF instantanée avec des isolignes de diamètre de gouttes (EXP), (b) Image OH-PLIF moyenne avec la vitesse des gouttes colorée par leur diamètre (EXP) [189], (c) Champ instantané de taux de dégagement de chaleur avec le spray coloré par le diamètre des gouttes (LES).

points de la flamme de diffusion externe sont concentrés sur les lignes de mélange, ce qui est cohérent avec l'étirement et l'intensité de turbulence très faibles à cet endroit (Fig 4.32). En comparaison, la dispersion des points de la flamme de diffusion derrière la flamme de prémélange (B1) est plus forte. Cette dispersion est la conséquence de l'étirement fluctuant subi localement par le front de flamme, dans cette zone turbulente de fort cisaillement

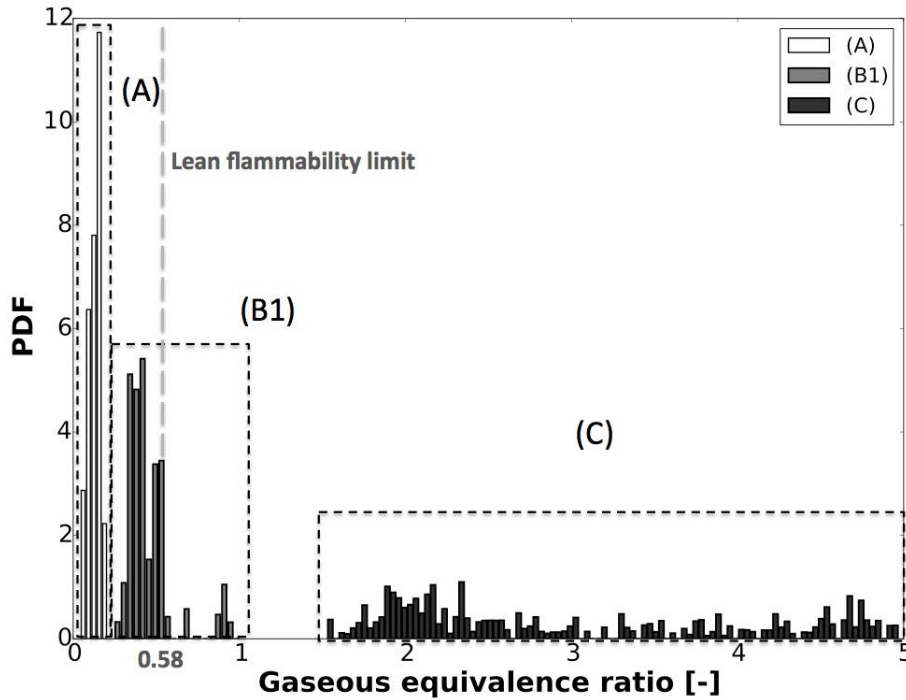


Figure 4.30 – PDF de richesse gazeuse Φ_g pour les régions (A), (B1) et (C) (Les positions des sondes sont en indiquées en Fig. 4.20).

(Fig. 4.32). La branche interne de prémélange (B1) brûle pour sa part principalement dans des conditions pauvres et résulte du mélange partiel de l'air avec la faible masse de carburant que produit l'évaporation des petites gouttes de la zone (A) comme en attestent les points situés proches de la ligne de mélange air-carburant.

Pour mieux comprendre la structure de la flamme, la Fig. 4.35 montre les profils radiaux instantanés (à $Z = 30$ mm) de fraction massique de carburant gazeux et d'oxydant, la fraction massique totale de carburant (gaz et liquide) et le taux de dégagement de chaleur normalisé par sa valeur maximale sur le profil. En partant du centre du jet, le mélange d'air froid et de carburant avec des gouttes s'évapore lentement (A) et alimente la flamme de prémélange pauvre (B1) qui consomme tout l'*n*-heptane gazeux disponible. Cependant, d'autres gouttes arrivent dans la zone (B1) où elles s'évaporent très rapidement, ce qui a pour effet d'augmenter localement la richesse totale au-delà de la limite de flammabilité pauvre ($\phi_g \simeq 0.58$). L'oxydant en surplus réagit ensuite avec le carburant gazeux provenant de la zone riche et chaude (C) donnant lieu à une flamme de diffusion très proche de la flamme (B1). Presque toutes les gouttes sont évaporées dans la région (C), où il n'y a quasiment plus du tout d'oxygène, ce qui explique qu'aucune réaction n'a lieu dans cette zone. La vapeur de carburant contenue dans (C) brûle également avec l'air extérieur sous

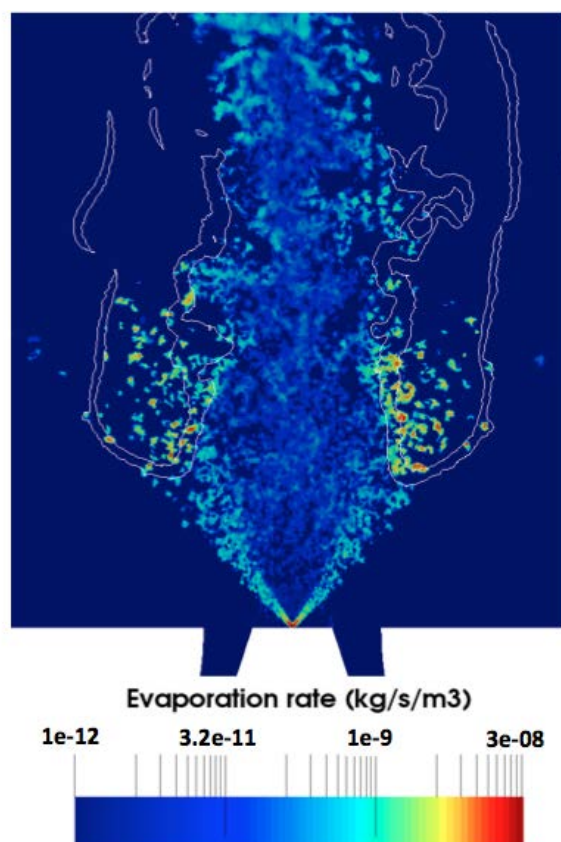


Figure 4.31 – Champ instantané du taux d'évaporation avec un isocontour de dégagement de chaleur représentant la flamme. (LES)

la forme d'une flamme de diffusion pure (B2).

4.5.4 Stabilisation de la flamme

Cette section vise à mieux comprendre les phénomènes liés à la stabilisation de la flamme diphasique. La stabilisation de la flamme semble s'apparenter à une sorte de flamme triple représentée en Fig. 4.36 et est donc le résultat d'un processus de propagation de flamme. Dans le cas d'une flamme triple classique, celle-ci comporte une branche de prémélange riche et une branche de prémélange pauvre. Une flamme de prémélange se propage le plus vite le long de la ligne stoechiométrique. Le bord le plus rapide, appelé point triple, se propage le long de la surface stoechiométrique. Une flamme de prémélange pauvre (du côté pauvre de cette surface) et une flamme de prémélange riche (du côté riche) se propagent avec une vitesse plus faible. Dans le cas étudié, le point triple est différent dans la mesure où

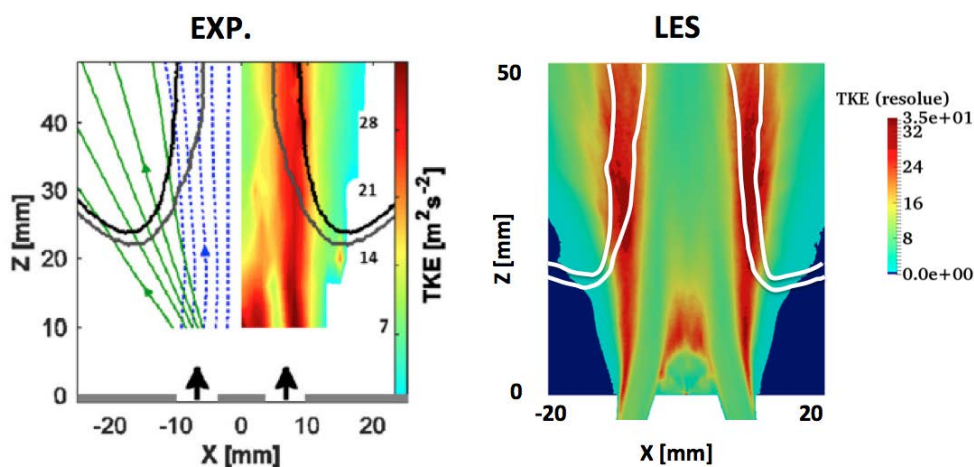


Figure 4.32 – Gauche : Champ expérimental d'énergie cinétique turbulente dans un plan vertical. Les lignes grises et noires indiquent l'isoligne de variable de progrès $c = 0.5$. Les tirets bleus représentent les lignes de courant moyennes du jet et les lignes vertes représentent les trajectoires moyennes des grosses gouttes ($d > 40 \mu\text{m}$); Droite : Champ LES d'énergie cinétique turbulente avec la même isoligne de variable de progrès.

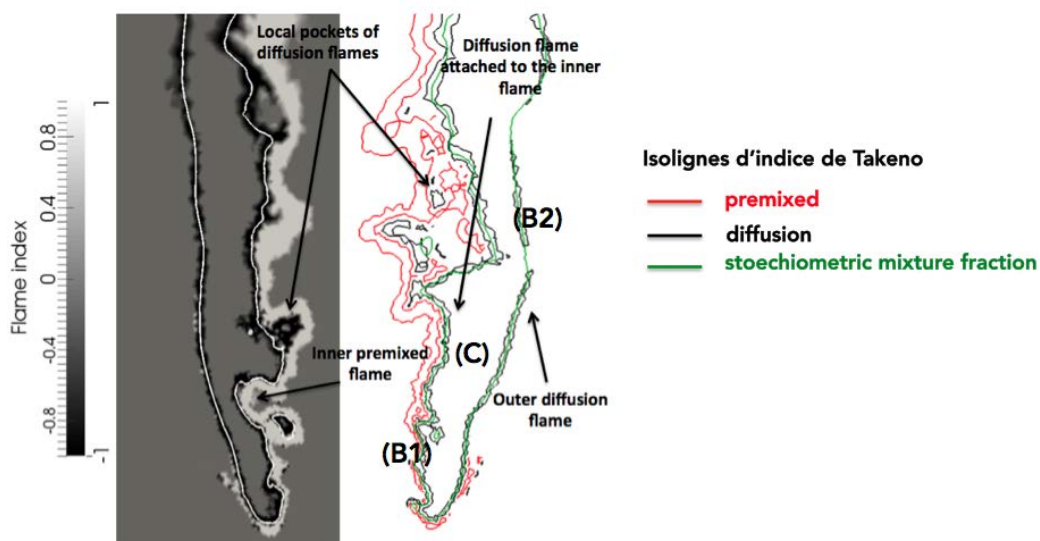


Figure 4.33 – Champ d'indice de Takeno avec l'isoligne stoechiométrique (vert), une isoligne d'indice de Takeno correspondant à un mode de prémélange (rouge, Takeno=1) et une isoligne d'indice de Takeno correspondant à un mode de diffusion (noir, Takeno=-1).

la répartition du carburant est inhomogène en raison de l'évaporation du spray, expliquant ainsi l'absence de branche prémélangée riche.

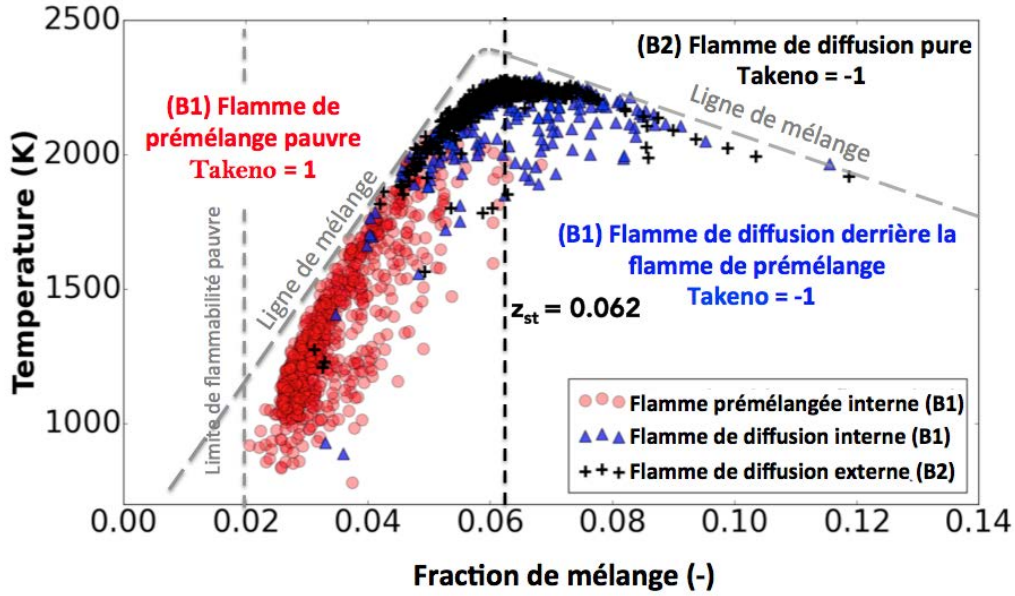


Figure 4.34 – Scatterplot de température en fonction de la fraction de mélange dans un plan longitudinal.

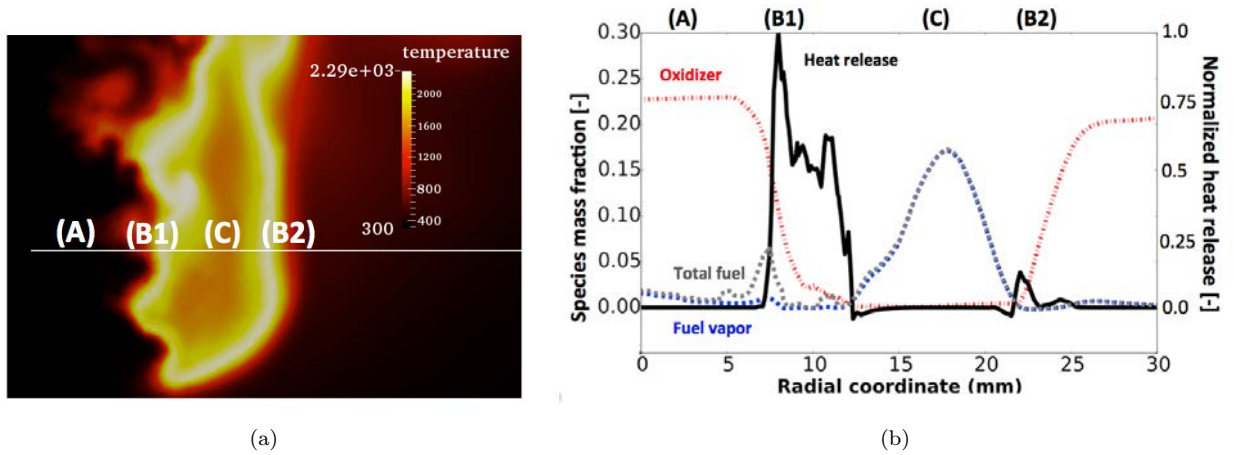


Figure 4.35 – (a) Position du profil $Z = 30$ mm à travers la flamme, (b) Profils radiaux instantanés à travers la flamme à $Z = 30$ mm : (ligne noire) Dégagement de chaleur normalisé; (tirets noirs) Fraction massique de carburant gazeux et (tirets gris) et de fraction massique totale de carburant (gaz + liquide); (pointillés) Fraction massique d'oxydant.

La figure 4.37a montre un champ instantané de richesse gazeuse proche du point de stabilisation avec un isocontour de vitesse absolue de flamme $S_a = \vec{u} \cdot \vec{n} + S_d$ [146] nulle, où $\vec{u} \cdot \vec{n}$ représente la vitesse de l'écoulement normale au front de flamme et S_d la vitesse de déplacement de la flamme :

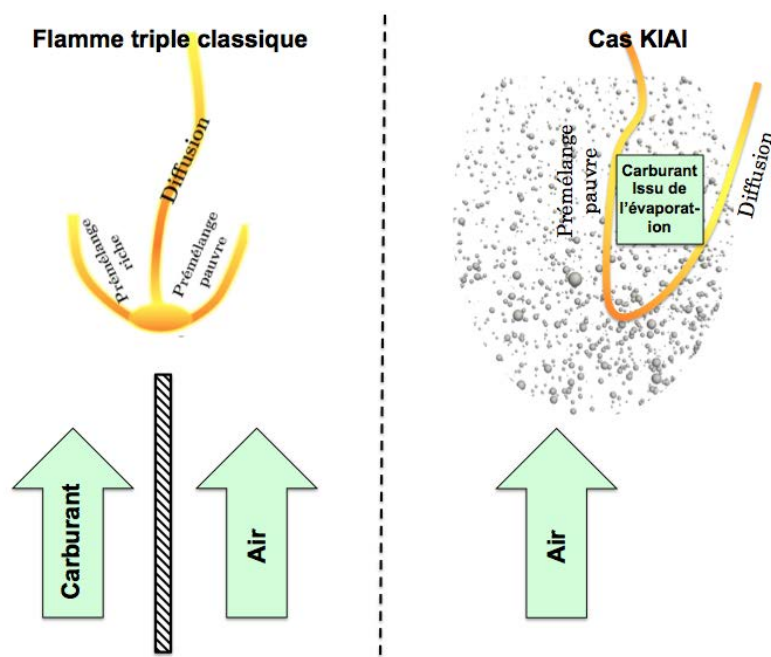


Figure 4.36 – Analogie du processus de stabilisation avec une flamme triple gazeuse.

$$S_d = \frac{1}{|\nabla c|} \frac{D_c}{D_t} \quad (4.11)$$

calculée à partir de l'équation de l'énergie (c désigne la variable de progrès). Une vitesse de flamme absolue nulle indique un équilibre entre la vitesse de flamme la vitesse de l'écoulement et permet donc de caractériser la stabilisation de la flamme. Au pied de flamme, il apparaît que l'isocontour de vitesse absolue corresponde parfaitement avec les régions où la richesse gazeuse est très proche de 1, suggérant une corrélation entre la position du pied de flamme et la richesse locale. Cette observation est confirmée par la Fig. 4.37b qui montre les PDFs de richesse au point de stabilisation (notée S sur la Fig. 4.37a) et 1 mm en amont (S'). Au niveau du point de stabilisation, la richesse gazeuse varie entre 0.4 et 1.4 alors que juste en dessous, le mélange est clairement trop pauvre pour permettre la propagation de la flamme. Cela signifie que pour cette configuration de flamme avec un spray, la stabilisation est principalement contrôlée par la quantité de carburant gazeux disponible et donc du taux d'évaporation des gouttes. Néanmoins, cela ne permet pas d'expliquer la position de la flamme et d'autres facteurs comme la vitesse du jet et l'angle du spray décrits ci-après doivent être pris en compte.

La figure 4.39 représente un scatterplot de la vitesse en fonction de la coordonnée axiale pour la région comprise dans le cône d'injection du spray colorée en rouge sur la Fig. 4.38.

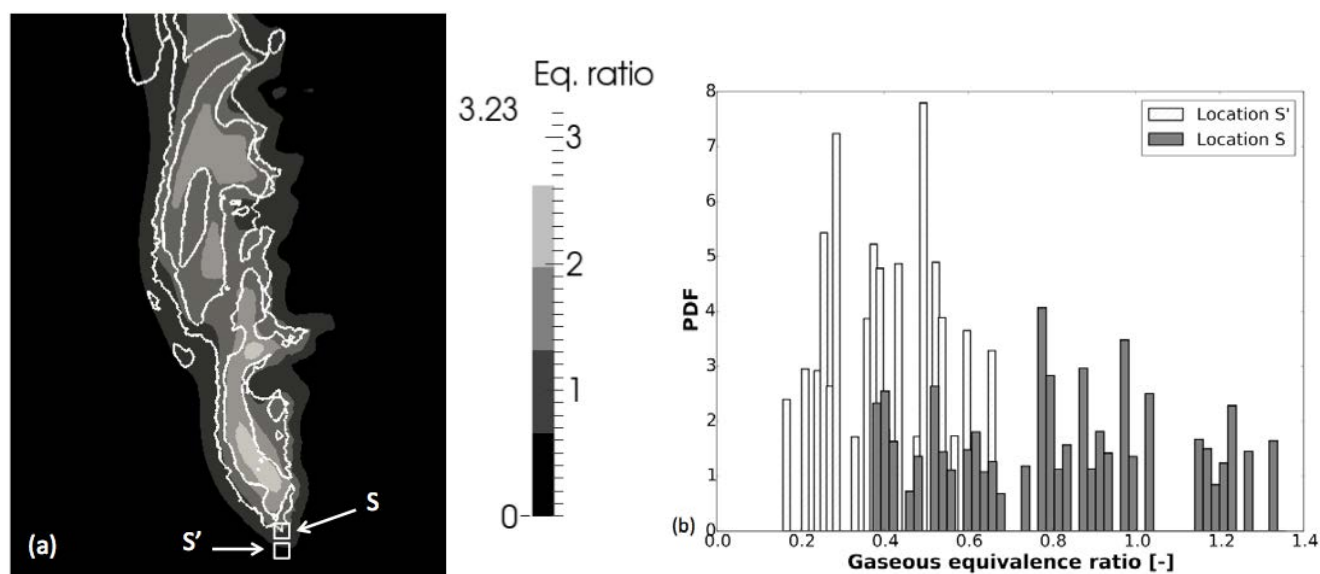


Figure 4.37 – (a) Champ instantané de richesse gazeuse avec un isocontour de vitesse de déplacement de flamme nulle sur une coupe longitudinale; (b) PDF de richesse gazeuse à deux positions (S) et (S').

Les points sont colorés par la richesse gazeuse. Cette figure permet de distinguer une délimitation nette de la coordonnée axiale à partir de laquelle la vitesse de l'écoulement est suffisamment faible pour permettre la stabilisation de la flamme. Une transition apparaît à $Z = 20$ mm et correspond à la hauteur de flamme observée dans la simulation. Cette transition sépare la zone de vitesse élevée liée au jet et une zone de faible vitesse en dehors du jet. De plus, cette transition correspond également à une zone où la richesse devient suffisante pour l'établissement de la flamme. Les conditions nécessaires à la stabilisation de la flamme résultent donc simultanément du champ de vitesse suffisamment faible et de la richesse gazeuse comprise dans l'intervalle d'inflammabilité, cette dernière étant également liée à la flamme et au taux d'évaporation du spray. Dans cette région propice à la stabilisation de la flamme, celle-ci se positionne au point le plus amont, à $Z = 20$ mm, là où la richesse est unitaire et la flamme est la plus rapide.

4.6 Influence du modèle d'évaporation

Un test a été effectué en changeant le modèle d'évaporation afin de voir l'influence de celui-ci sur la hauteur de stabilisation. Le modèle d'Abramzon-Sirignano a ainsi été remplacé par sa variante complexe (Section 3.3.2.2) qui consiste à évaluer les coefficients de transport diffusif à l'aide de solveurs dédiés du type CANTERA. Des études précédentes ont montré que cela peut avoir un effet non négligeable sur l'évaporation des gouttes [75] et l'utilisation de ce modèle a généralement pour effet de ralentir l'évaporation. La figure 4.40

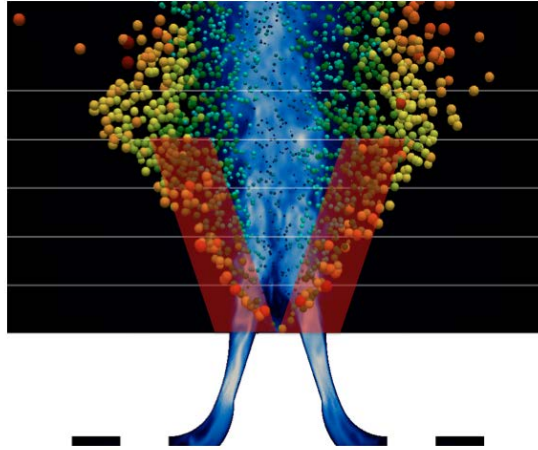


Figure 4.38 – Zone d'intérêt (en rouge) pour l'étude de la stabilisation.

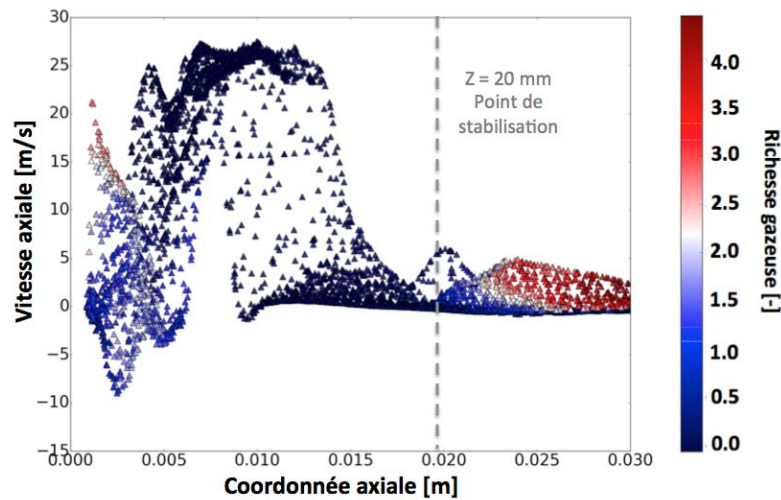


Figure 4.39 – Scatterplot de vitesse en fonction de la coordonnée axiale dans la zone conique formée par le spray pour le cas réactif. Les points sont colorés par la richesse gazeuse.

montre les profils radiaux de taille de goutte pour différentes positions axiales. Ceux-ci sont très similaires au cas avec le modèle d'évaporation simple. L'accord avec les expériences est très bon et on observe même une amélioration au niveau des positions radiales plus élevées où la taille des gouttes est légèrement plus grande et se rapproche plus des mesures. Néanmoins, ces légères différences n'ont pas une grande influence sur la hauteur de stabilisation de la flamme comme on peut le voir sur la Fig. 4.41. Cette figure montre des champs

de dégagement de chaleur dans les deux cas. La hauteur de stabilisation avec le modèle d'évaporation AS complexe est de $Z = 21 \pm 1$ mm.

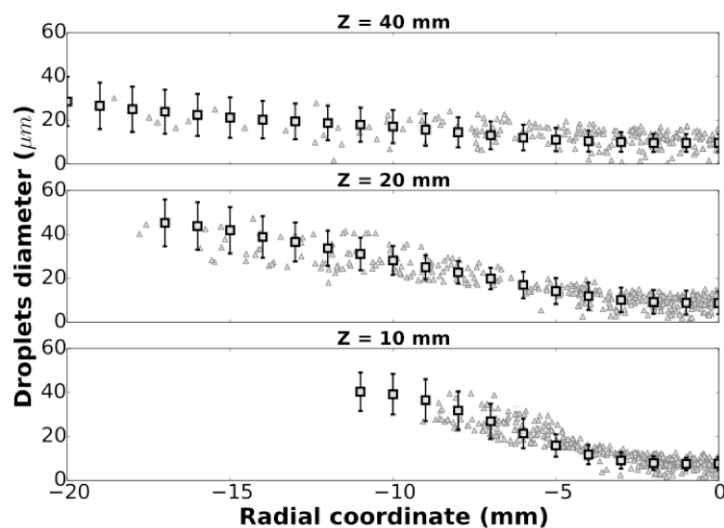


Figure 4.40 – Profils radiaux de diamètre de gouttes à $Z = 10$ mm, $Z = 20$ mm et $Z = 40$ mm. (\square) Exp. ; (\triangle) LES. Les barres d'erreur sont proportionnelles aux valeurs de RMS mesurées. Modèle d'évaporation AS complexe.

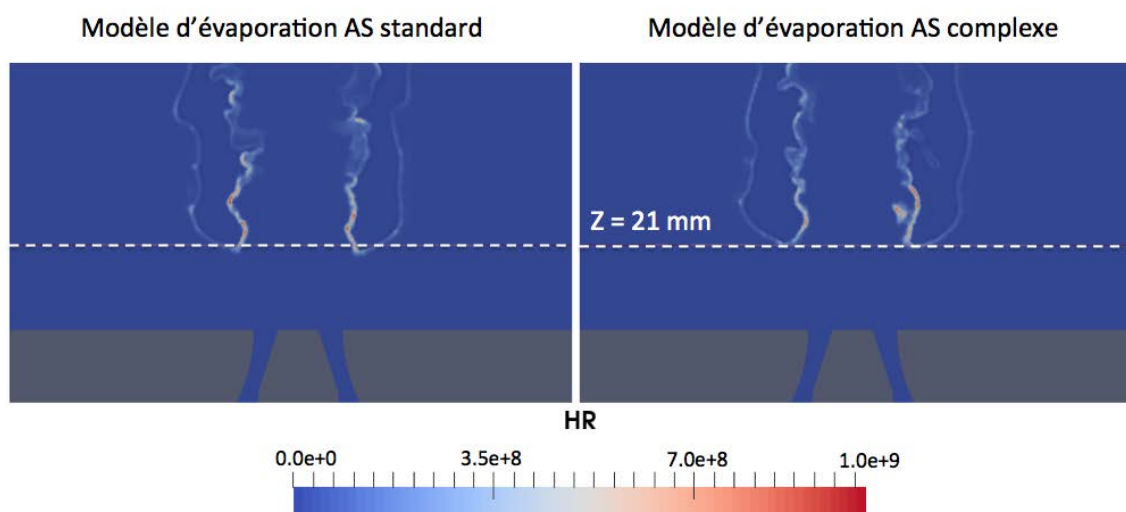


Figure 4.41 – Comparaison de la hauteur de stabilisation pour les deux modèles d'évaporation.

4.7 Influence de la cinétique chimique

Afin d’investiguer plus en détail la structure de flamme ainsi que son processus de stabilisation, notamment la hauteur de stabilisation, le même calcul est effectué avec une chimie plus détaillée. Pour cela, la méthodologie ARC (Analytically Reduced Chemistry), initialement développée par Pepiot [139] et adaptée à la LES dans le cadre du code AVBP durant la thèse de Jaravel [87] et Felden [59], est utilisée pour construire un schéma cinétique plus détaillé que le schéma 2S utilisé précédemment pour la combustion de l’heptane avec de l’air. Cette méthodologie a été utilisée avec succès pour la combustion méthane/air ou dodécane/air, mais toujours pour des simulations monophasiques.

Le schéma est construit à partir de la cinétique de Jerzembeck *et al.* [90], basé sur un schéma détaillé du LLNL [50]. Le schéma analytique final contient 24 espèces transportées, 32 espèces en état quasi stationnaires (QSS pour Quasi Steady State) et 217 réactions.

4.7.1 Validation sur flammes prémélangées 1D

La précision du schéma cinétique analytique est évaluée pour des flammes prémélangées 1D, grâce au logiciel CANTERA. Les résultats sont comparés aux résultats expérimentaux de Kumar [103], au schéma réduit à 2 étapes utilisé précédemment et au schéma de référence de Jerzembeck *et al.* [90] dont il est issu. Les figures 4.42 et 4.43 montrent que le schéma analytique reproduit convenablement la vitesse de flamme laminaire et la température adiabatique de fin de combustion, pour des richesses allant de 0.7 à 1.4, à pression et température ambiantes. La structure de la flamme obtenue à richesse unitaire avec le schéma ARC est représentée en Fig. 4.44 où seule une partie des espèces a été représentée. Sur cette figure, la température est normalisée par la température de fin de combustion $T_{ad} = 2219 \text{ K}$.

4.7.2 Résultats sur la configuration KIAI et comparaison avec la chimie 2S

La Fig. 4.45 montre des champs instantanés de température, dégagement de chaleur et de fraction massique de OH pour le cas avec chimie analytique. La structure globale de la flamme est similaire au cas 2S avec la double zone de réaction. En particulier, la hauteur de stabilisation reste inchangée ($Z = 20 \pm 1 \text{ mm}$).

Aucune différence notable sur les champs de vitesse n’est observée entre les cas avec chimie réduite 2S et chimie analytique comme on peut le voir sur la Fig. 4.46 qui montre des profils de vitesse axiale. De façon générale, les profils de vitesse sont très similaires pour les deux cas. On peut toutefois remarquer que la vitesse axiale correspondant au cas analytique est très légèrement supérieure notamment pour les positions axiales $Z > 20 \text{ mm}$. Cette

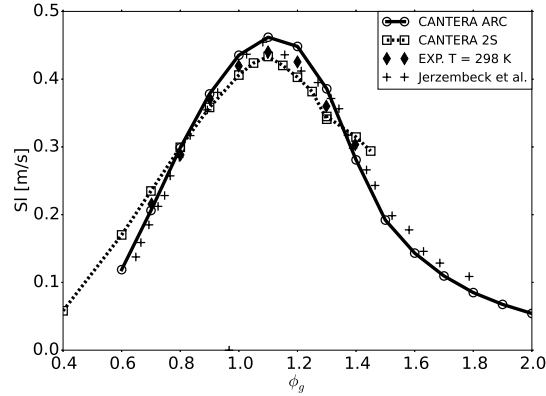


Figure 4.42 – Comparaison des vitesses de flamme laminaire obtenues avec le schéma analytique, le schéma réduit 2S, Le schéma de référence de Jerzembek et al. [90] et les expériences de Kumar [103].

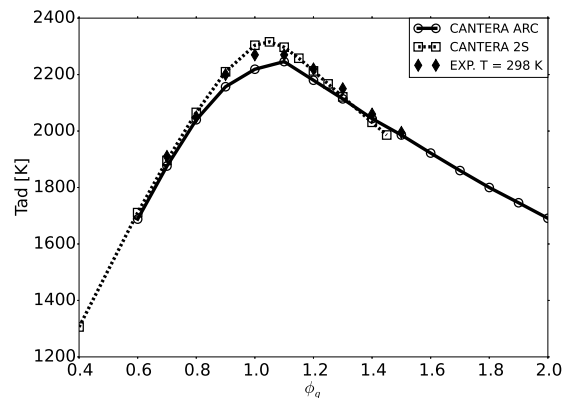


Figure 4.43 – Comparaison de la température adiabatique de flamme laminaire obtenues avec le schéma analytique, le schéma réduit 2S et les expériences de Kumar [103].

petite différence peut s'expliquer à l'aide des différences observées dans les températures obtenues dans les deux cas. En effet, les profils radiaux de température représentés en Fig. 4.47 montrent des comportements relativement distincts. En effet, dans le cas de la chimie analytique, les courbes de température exhibent deux pics avec un creux entre les deux branches de réaction. La séparation entre les deux flammes (B1) et (B2) est plus nette et la flamme (B2) est positionnée plus à l'extérieur (Fig. 4.45). La diminution de température entre les flammes (B1) et (B2) peut être corrélée avec la composition des gaz contenus dans cette zone. En effet, la Fig. 4.48 montre que cette zone contient des espèces intermédiaires telles que le C_2H_6 , CH_4 , C_4H_6 , etc... La diminution de température de la région (C) est donc due aux effets de dissociations endothermiques de l'heptane en espèces

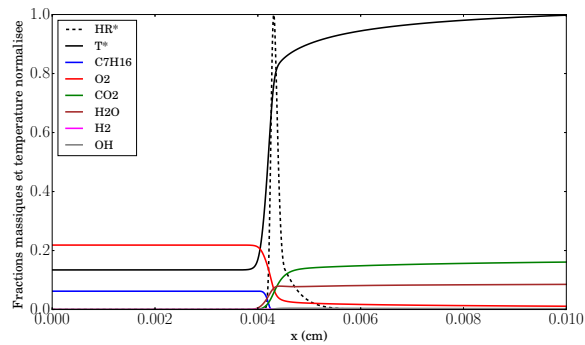


Figure 4.44 – Structure de flamme laminaire prémélangée obtenue pour $\Phi = 1$ à pression atmosphérique avec le schéma ARC. La température est normalisée par la température adiabatique de fin de combustion $T^* = T/T_{ad}$.

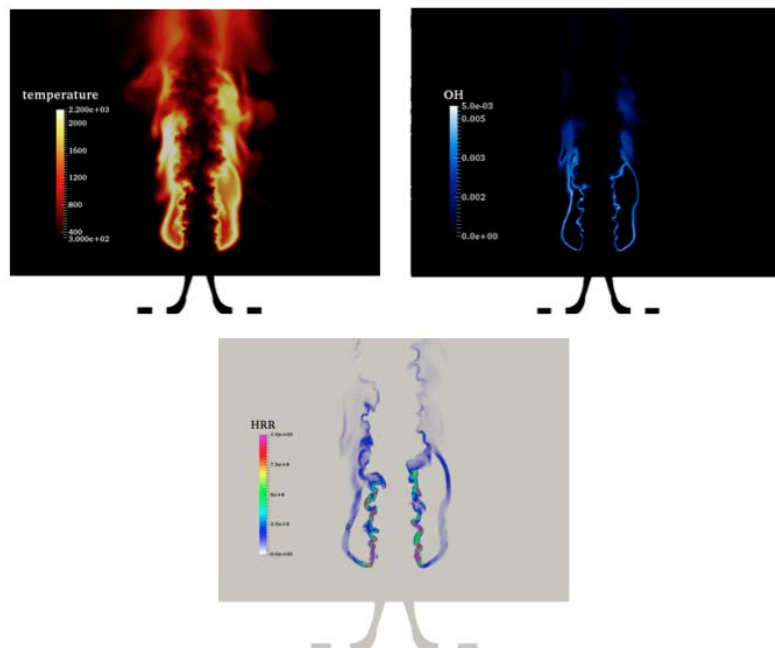


Figure 4.45 – Champs instantanés de température, dégagement de chaleur et de fraction massique de OH . Chimie analytique.

carbonées plus légères. Ces dernières ne sont pas prises en compte dans le cas de la chimie réduite, ce qui explique qu'on ne retrouve pas ce creux dans le cas 2S.

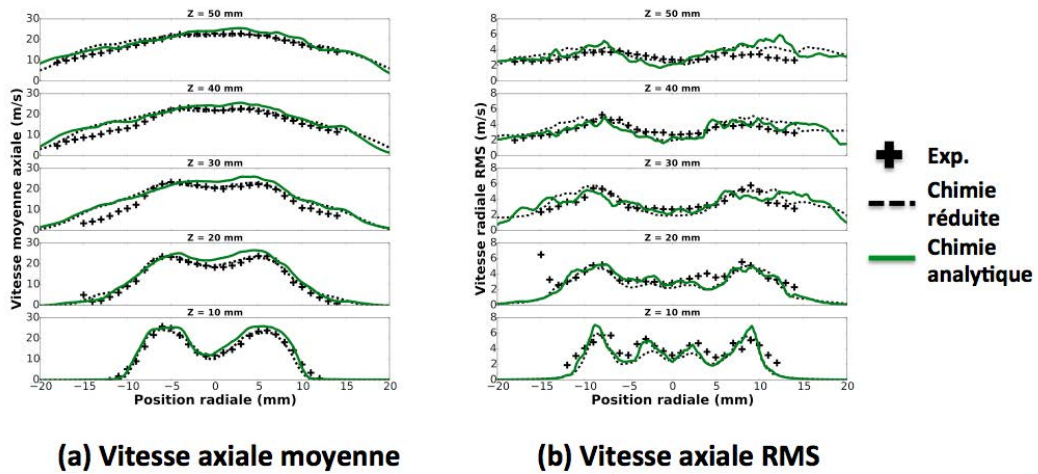


Figure 4.46 – Profils radiaux de vitesse axiale (a) moyenne et (b) RMS pour la phase porteuse à différentes positions axiales. Comparaison de la chimie réduite 2S et de la chimie analytique.

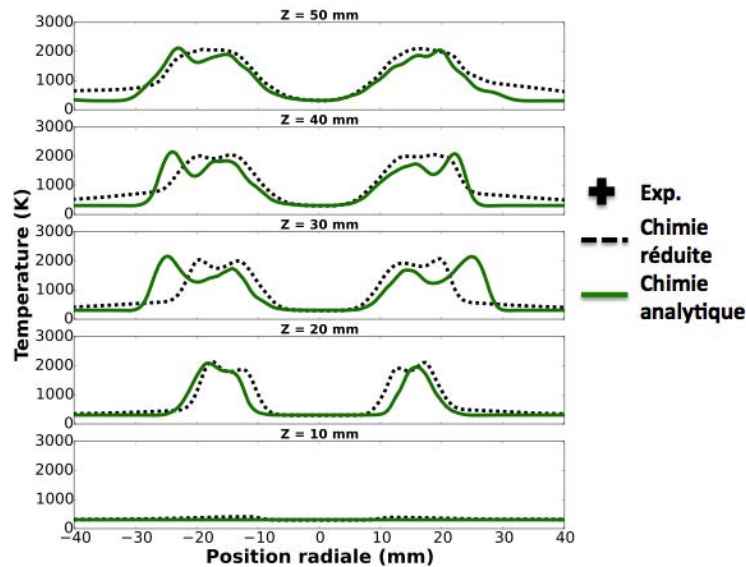


Figure 4.47 – Profils radiaux de température à différentes positions axiales. Comparaison de la chimie réduite 2S et de la chimie analytique.

4.7.3 Stabilisation

Dans cette section, on s'intéresse plus particulièrement à certains aspects liés à la chimie pour les flammes de spray afin de caractériser le processus de stabilisation. En particulier,

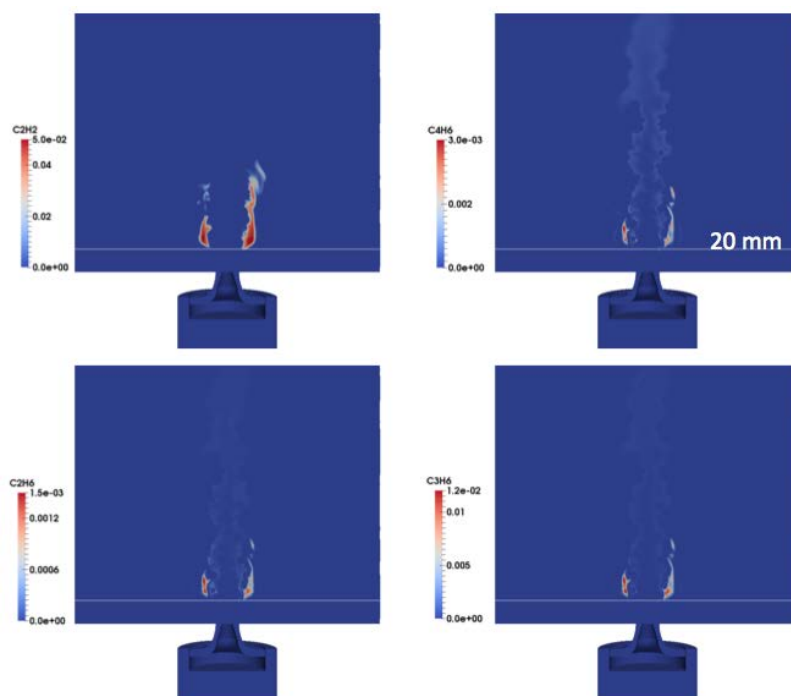


Figure 4.48 – Champs d'espèces intermédiaires. Chimie analytique.

la chimie analytique permet de s'intéresser aux espèces intermédiaires et de détecter d'éventuelles réactions en amont de la flamme. Celles-ci sont d'autant plus importantes qu'elles peuvent être la trace de présence de chimie froide pouvant influencer la stabilisation de la flamme.

On observe dans un premier temps qu'il y a très peu d'activité chimique en amont de la flamme. En outre, les espèces intermédiaires (Fig. 4.48) et radicaux ne sont pas formés en amont de la flamme. Cela tend à confirmer le fait que la stabilisation de la flamme est le résultat d'un phénomène propagatif et non d'auto-allumage. Ensuite, le champ d'espèce CH_2O en Fig. 4.49 indique que la combustion a lieu sur une grande distance dans une zone où les gouttes brûlent. En effet, la fraction massique de CH_2O est maximale dans la direction du spray, notamment au niveau de la branche externe qui est traversée par les gouttes les plus grosses. Dans la région (C), celle-ci est quasiment inexistante en raison de la quantité très faible, voire nulle, d'oxydant restant. Les seules réactions non négligeables dans cette région sont les réactions de pyrolyse permettant la formation des espèces carbonées intermédiaires (Fig. 4.48). La formation de ces espèces s'effectue sur de longues distances car une partie des gouttes traverse le premier front de flamme et continue d'évaporer. Les courbes de température présentées en Fig. 4.47 sont consistantes avec la

nature endothermique des réactions de pyrolyse et expliquent la baisse de température marquée derrière le premier front de flamme.

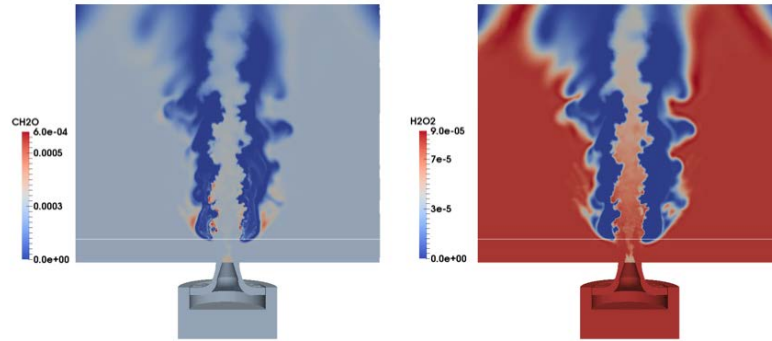


Figure 4.49 – Champs de CH_2O et H_2O_2 . Chimie analytique.

4.8 Conclusion

Une étude du brûleur diphasique KIAI non swirlée et non confinée a été réalisée à l'aide de la méthodologie LES-DPS. La flamme jet obtenue est liftée et présente une structure avec deux zones de réactions distinctes, directement liée à la distribution en taille du spray. La réaction interne est alimentée par les gouttes de petite taille entraînées par jet d'air et présente les caractéristiques d'une flamme partiellement prémélangée pauvre tandis que la réaction externe est une flamme de diffusion pure alimentée par le carburant issu de l'évaporation des plus grosses gouttes. Les résultats obtenus ont été comparés avec les données expérimentales et ont montré de bons accords aussi bien pour la phase gazeuse que la phase liquide en termes de vitesse, taille et température. Une analyse du point de stabilisation de la flamme montre que ce dernier est situé dans une région proche de la stœchiométrie et où la vitesse de l'écoulement est suffisamment faible. La stabilisation de la flamme est ainsi le résultat d'un phénomène propagatif comme pour une flamme jet gazeuse, à la différence qu'elle est également contrôlée par la distribution spatiale des gouttes et leur évaporation. Plusieurs pistes ont été étudiées afin d'expliquer la différence de hauteur de détachement observée. Parmi celles-ci, la complexité de la chimie utilisée a été investiguée mais n'a pas montré de réelles différences. La prise en compte des pertes thermiques ne semble pas primordiale dans la mesure où la flamme est relativement éloignée de l'injecteur. Une autre hypothèse concerne l'hypothèse de point source. En effet, dans les expériences, de nombreuses extinctions locales sont observées proches de la base de la

flamme et sont corrélées avec la traversée de la flamme par certaines gouttes [189]. Ces instabilités non observées dans la simulation peuvent expliquer le fait que la hauteur de détachement fluctue sensiblement dans l'expérience tandis qu'elle reste quasiment constante dans la simulation.

Configuration swirlée et confinée

Sommaire

5.1	Présentation de la configuration expérimentale	125
5.2	Méthode numérique	126
5.2.1	<i>Domaine de calcul et maillage</i>	126
5.2.2	<i>Conditions limites et modèles utilisés</i>	127
5.3	Topologie et validation de l'écoulement diphasique non réactif	127
5.4	Validation de l'écoulement diphasique réactif	131
5.5	Analyse de la structure de flamme	131
5.5.1	<i>Distribution de richesse</i>	132
5.5.2	<i>Régimes de combustion</i>	136
5.6	Conclusion et perspectives	137

Afin de se rapprocher des applications réelles, ce chapitre présente une étude du brûleur KIAI diphasique similaire à celle du Chapitre 4 dans une configuration swirlée et confinée.

5.1 Présentation de la configuration expérimentale

La configuration swirlée confinée est illustrée en Fig. 5.1. Celle-ci est composée des mêmes éléments que celle du Chapitre 4., plus une chambre de combustion de section carrée (10 cm de côté) dont les parois latérales en quartz permettent un accès optique pour les mesures, ainsi qu'une tuyère de sortie. Les 18 vanes du tourbillonneur radial sont cette fois-ci inclinées à 45° correspondant à un nombre de swirl de 0.76.

Le point de fonctionnement est quelque peu modifié par rapport à la configuration non swirlée. La température de l'air a notamment été augmentée de 298 K à 413 K afin d'éviter la formation de film liquide sur les parois. Comme le tube d'injection liquide est entouré par cet air chaud (Fig. 5.1), la température des gouttes à l'injection a également été augmentée

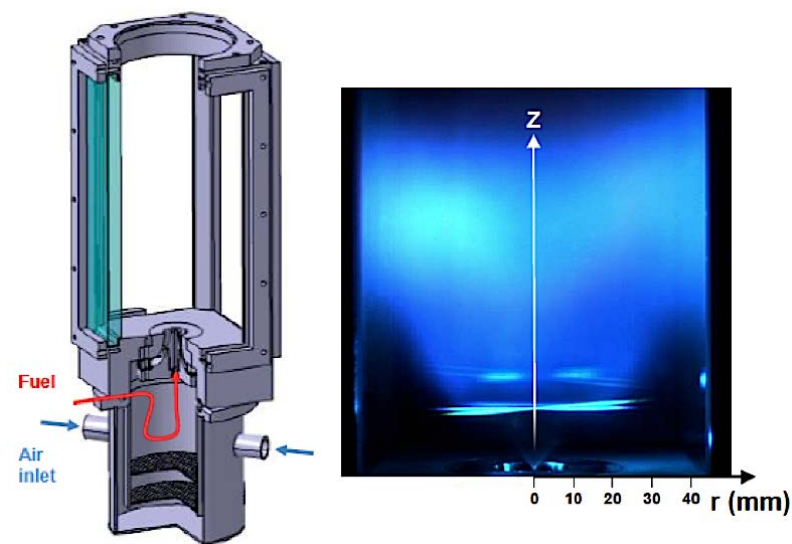


Figure 5.1 – Schéma de la configuration confinée et image de la flamme par laser PDA. Le spray est visible à la sortie de l'injecteur. Extrait de [163]

Débit air	Débit liquide (<i>n</i> -heptane)	Angle du spray	Température air/liquide	Pression
8.2 g/s	0.28 g/s	80°	413 K / 353 K	1 bar

Tableau 5.1 – Rappel du point de fonctionnement.

et a été évaluée expérimentalement à environ 353 K. Le point de fonctionnement est résumé dans le tableau 5.1.

5.2 Méthode numérique

5.2.1 Domaine de calcul et maillage

La figure 5.2 présente le domaine de calcul utilisé pour les simulations LES. Il comprend l'arrivée d'air avec le plénum, le swirler, la chambre de combustion et enfin la tuyère en sortie. Le maillage retenu est très similaire au cas précédent et comporte 63 millions de mailles correspondant à 11 millions de noeuds. Il est raffiné dans la région proche de l'injection de carburant et dans toute la zone d'expansion du jet swirlé. La taille caractéristique des plus petites mailles est de l'ordre de 0.08 mm.

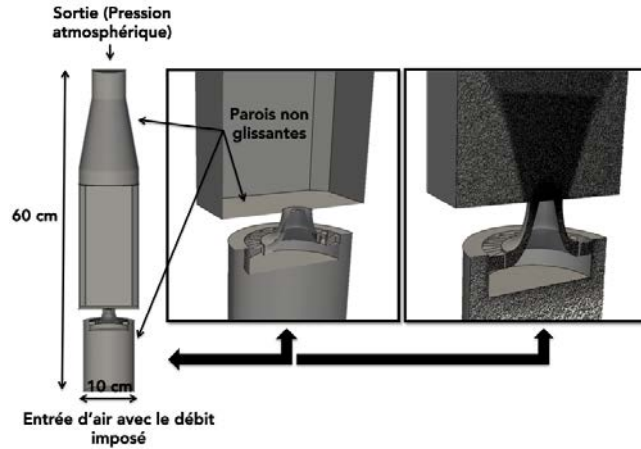


Figure 5.2 – Visualisation du domaine de calcul et du maillage.

5.2.2 Conditions limites et modèles utilisés

Les conditions limites sont quasiment identiques au cas précédent et sont détaillées en Fig. 5.2. Les parois de la chambre de combustion et le plan d'injection sont traitées avec des conditions de murs non glissants sans loi de paroi. Le schéma numérique utilisé ainsi que la méthode d'injection sont également similaires à ceux employés pour la configuration non swirlée (Section 4.2.2). Le modèle de sous-maille SIGMA est utilisé en raison du mouvement de rotation de l'écoulement (Section 2.7).

Enfin, la cinétique chimique employée pour la combustion du *n*-heptane est la chimie réduite à 2 étapes et 6 espèces (*2S_C7H16_DP*) décrite en Section 4.2.3. Les principaux paramètres numériques sont répertoriés dans le Tableau 5.2.

	Paramètres numériques
Schéma convectif	TTGC : $\mathcal{O}(3)$ en espace et en temps [41]
Schéma diffusif	Opérateur 2Δ
Modèle de sous-maille	SIGMA [131]
Viscosité artificielle	Modèle de Colin : $\epsilon^{(2)} = 0.01$, $\epsilon^{(4)} = 0.005$

Tableau 5.2 – Paramètres numériques pour AVBP.

5.3 Topologie et validation de l'écoulement diphasique non réactif

La topologie de l'écoulement à froid est décrite sur la Fig. 5.3 qui montre les lignes de courant du champ de vitesse moyenne dans une coupe longitudinale. Des champs moyens de vitesse sont également représentés en Fig. 5.4. On retrouve les éléments caractéristiques

des écoulements swirlés : le jet swirlé génère une zone de recirculation centrale (IRZ) le long de l'axe longitudinal, des recirculations externes (RZ) et des recirculations de coin (CRZ). La présence de l'IRZ est due à un gradient de pression adverse dans la direction axiale. La majeure partie de l'énergie cinétique turbulente est concentrée à l'entrée de la chambre de combustion à la sortie du swirler (Fig. 5.5) laissant apparaître une zone centrale peu agitée due à l'IRZ.



Figure 5.3 – Topologie de l'écoulement non réactif.

La figure 5.6 montre des profils de la vitesse axiale moyenne du gaz par rapport à la position radiale à quatre distances différentes de l'injecteur (indiquées sur la Fig. 5.4). Les valeurs moyennes se révèlent en très bon accord (Fig. 5.6a) tout comme les valeurs RMS présentées en Fig. 5.6b. Les profils de vitesse axiale sont typiques d'un jet annulaire swirlé et exhibent deux pics qui s'écartent radialement lorsque Z augmente. Des vitesses axiales négatives à $Z = 0$ mm attestent de la présence d'une zone de recirculation interne créée par l'effet du swirl. Le maximum est situé pour $Z = 10$ mm à $R = 10$ mm (45 m/s) et diminue jusqu'à 32 m/s pour $Z = 20$ mm à $R = 12$ mm. Le minimum est situé au centre avec des valeurs de -23 m/s à $Z = 10$ mm. Les profils de vitesse radiale sont présentés en Fig. 5.7. Ces dernières restent faibles (inférieures à 10 m/s) par rapport aux vitesses axiales

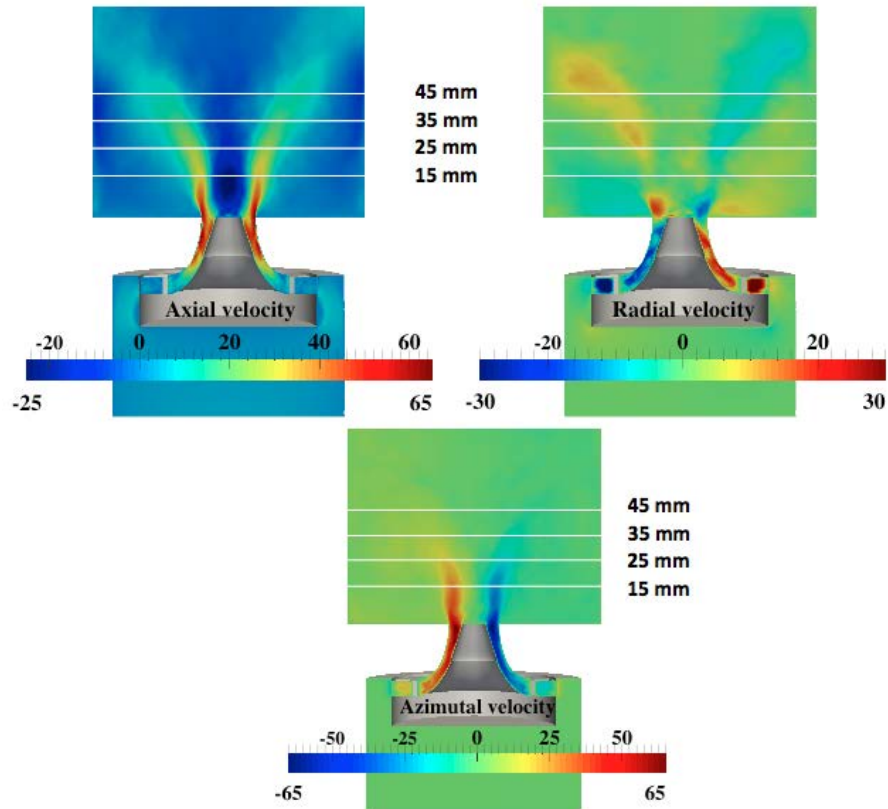


Figure 5.4 – Champs moyens de vitesse axiale, radiale et azimutale pour la phase porteuse. Cas non réactif.

(de l'ordre de 40 m/s). Elles deviennent plus importantes pour les positions axiales proches de l'injecteur. Pour $R < 10$ mm, les vitesses demeurent très faibles et sont générées par des zones de basse pression dans la zone de recirculation interne. En dessous de $Z = 25$ mm, les vitesses radiales à l'extérieur du jet ($R > 15$ mm) augmentent à nouveau et dénotent la présence de la zone de recirculation externe, caractéristique de ce type d'écoulement. L'accord entre la LES et les expériences reste une fois encore satisfaisant pour les valeurs moyennes et RMS même si on peut noter une légère dissymétrie dans les expériences qu'on ne retrouve pas dans la simulation.

La phase dispersée est validée par comparaison avec les expériences en terme de vitesse et de taille de goutte. Les figures 5.8 et 5.9 montrent ainsi les profils de vitesse axiale et radiale de goutte classées par taille. Comme pour le cas précédent, trois classes de gouttes sont différenciées selon leur diamètre : 0-20 μm ; 20-40 μm ; 40-70 μm . Un accord satisfaisant est observé entre les expériences et la LES. Contrairement au cas non swirlé, on observe que la distribution en terme de taille de goutte est assez uniforme, c'est pourquoi chaque classe

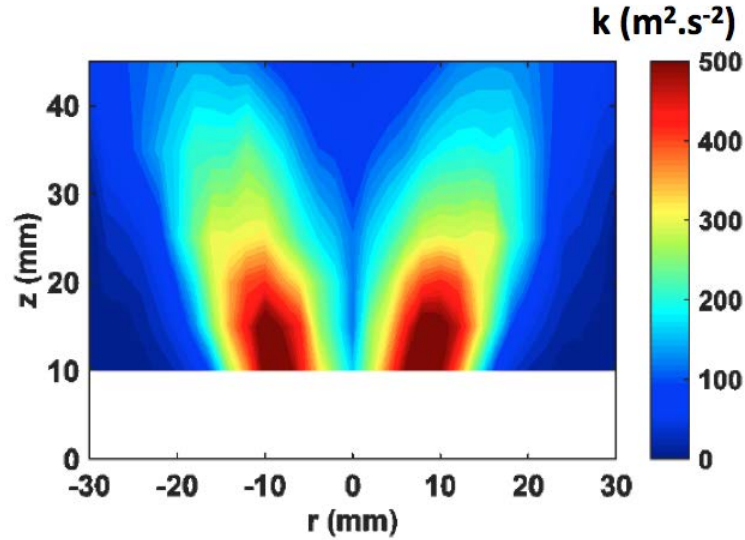


Figure 5.5 – Champ d'énergie cinétique turbulente dans un plan vertical. (Exp.)

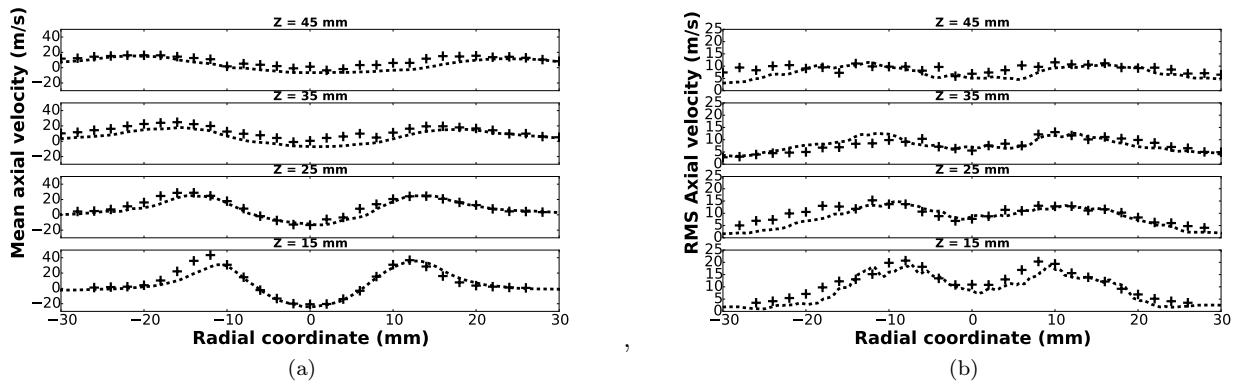


Figure 5.6 – Profils radiaux de vitesse axiale (a) moyenne et (b) RMS à $Z = 15$ mm, $Z = 25$ mm, $Z = 35$ mm et $Z = 45$ mm pour la phase porteuse; (+) Exp.; (- -) LES. Cas non réactif.

de goutte est représentée sur un graphe différent. Les gouttes de petites tailles (Fig. 5.8a) présentent une vitesse axiale plus élevée car elles se comportent comme des traceurs et sont entraînées par le jet d'air. On observe la tendance inverse pour la vitesse radiale, à savoir que la vitesse radiale des grosses gouttes est plus importante que pour les gouttes de petite taille. Cela s'explique par le fait que celles-ci sont peu influencées par le jet d'air swirlé qui présente des vitesses radiales faibles en comparaison de la vitesse des gouttes à la sortie de l'injecteur. La distribution en taille de goutte est également correctement reproduite comme le montrent les histogrammes de taille de goutte à diverses positions montrés en Fig. 5.10.

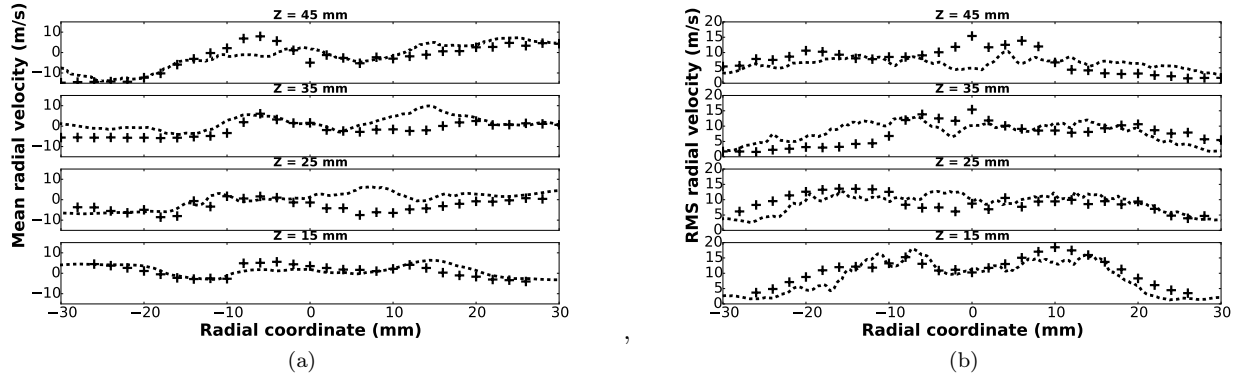


Figure 5.7 – Profils radiaux de vitesse radiale (a) moyenne et (b) RMS à $Z = 15$ mm, $Z = 25$ mm, $Z = 35$ mm et $Z = 45$ mm pour la phase porteuse; (+) Exp.; (- -) LES. Cas non réactif.

5.4 Validation de l'écoulement diphasique réactif

Dans cette section, l'écoulement réactif gazeux ainsi que le spray sont décrits et validés en vue de l'analyse de la structure de la flamme. Comme on peut le voir sur les Fig. 5.11 et 5.12, les comparaisons des vitesses entre les expériences et la LES sont encore très satisfaisantes, aussi bien pour les valeurs moyennes que pour les RMS. L'impact de la flamme sur la vitesse de la phase porteuse est important sur les deux composantes radiale et axiale. En effet, même si les profils possèdent la même forme que pour le cas non réactif, l'expansion des gaz chauds entraîne une augmentation significative de la vitesse axiale qui conserve des pics supérieurs à 40 m/s en aval de l'injecteur. De même, les vitesses radiales sont augmentées avec des valeurs maximales pouvant atteindre 20 m/s.

5.5 Analyse de la structure de flamme

Cette section est consacrée à l'analyse de la structure de flamme et sa stabilisation. La figure 5.13 montre une comparaison qualitative des expériences avec la LES. Dans les deux cas, la flamme possède une forme caractéristique en "M" typique de ce genre de brûleur aéronautique [137]. Elle peut être décomposée en deux régions relativement distinctes du front de flamme : une branche extérieure du M (B), de forme conique, fortement plissée et stabilisée à une distance fluctuante et non nulle du plan d'injection (Fig. 5.13), et une branche interne en forme de V (C), située au cœur de la zone de recirculation interne. La zone (A) correspond à la région non réactive en amont de la zone réactive (B). La branche (B) est détachée à environ $Z = 20$ mm en aval de l'injecteur tandis que la branche centrale (C) est positionnée à environ $Z = 35$ mm). Dans la LES, cette hauteur est légèrement

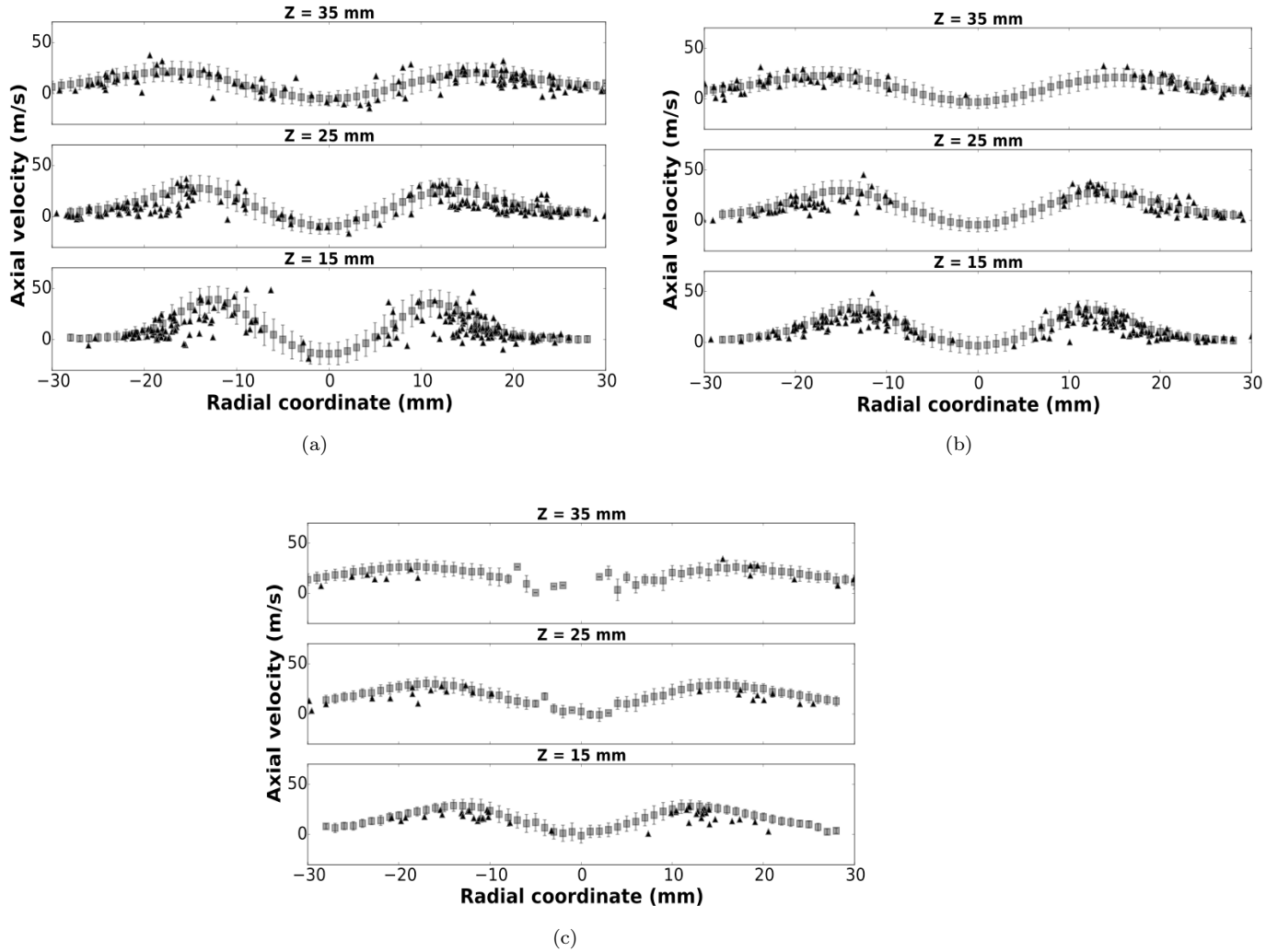


Figure 5.8 – Profils radiaux de vitesse axiale des gouttes (a) 0-20 μm ; (b) 20-40 μm ; (c) 40-70 μm à $Z = 15$ mm, $Z = 25$ mm et $Z = 35$ mm; (\square) Exp.; (\triangle) LES. Les barres d'erreur sont proportionnelles aux valeurs de RMS mesurées. Cas non réactif.

sous-estimée d'environ 5 mm pour les deux zones réactives, ce qui est cohérent avec les différences déjà observées pour le cas non swirlé.

5.5.1 Distribution de richesse

Un champ de vapeur de carburant (Fig. 5.14) montre que le carburant gazeux est principalement présent dès la sortie de l'injecteur et atteint des valeurs relativement importantes correspondant à une richesse maximale d'environ 6. Cela est dû au fait que la température

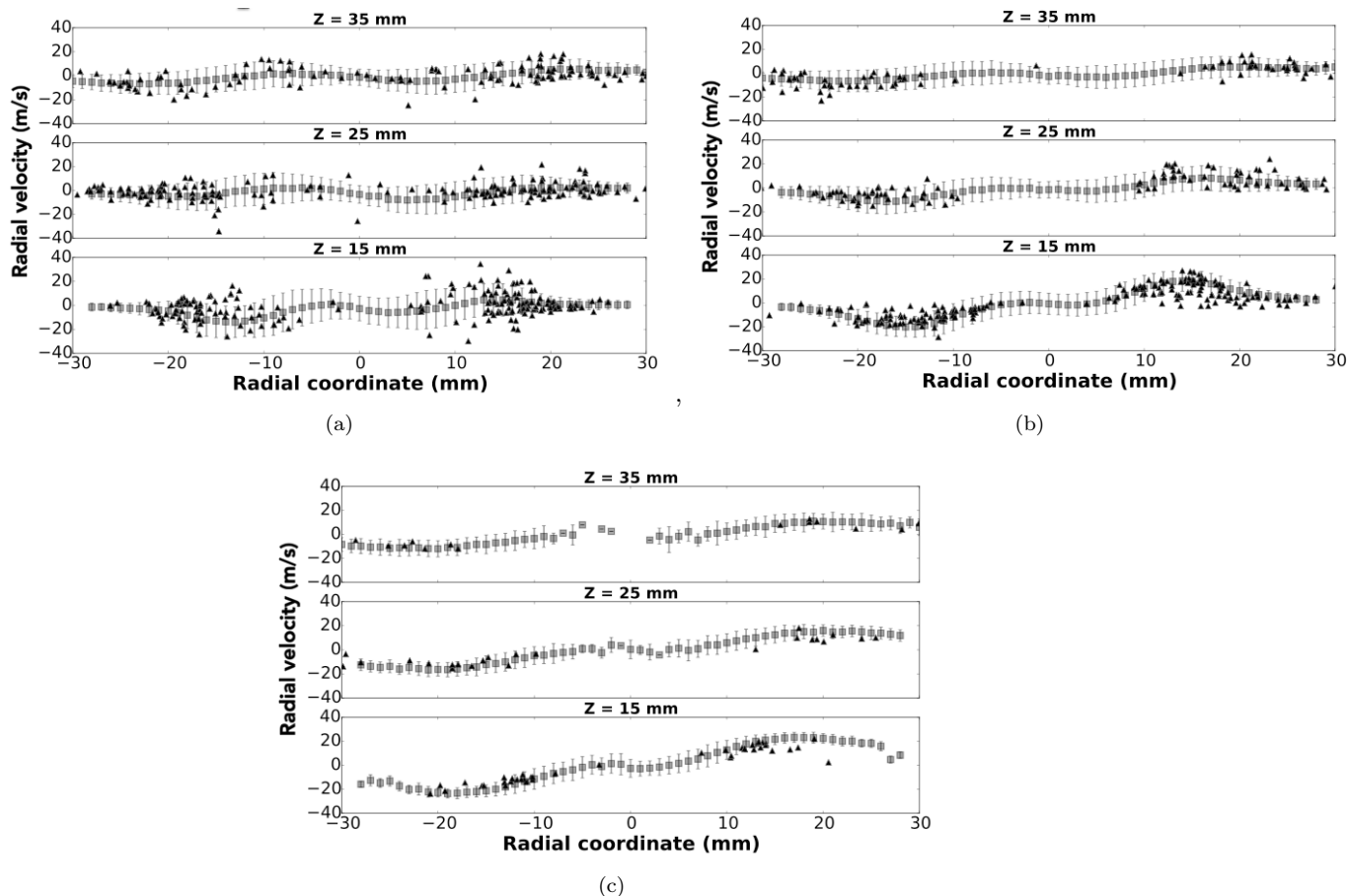


Figure 5.9 – Profils radiaux de vitesse radiale des gouttes (a) $0-20 \mu\text{m}$; (b) $20-40 \mu\text{m}$; (c) $40-70 \mu\text{m}$ à $Z = 15$ mm, $Z = 25$ mm et $Z = 35$ mm; (\square) Exp.; (\triangle) LES. Les barres d'erreur sont proportionnelles aux valeurs de RMS mesurées. Cas non réactif.

initiale des gouttes est de 353 K, proche de la température humide de 370 K pour ces conditions, ce qui conduit à leur évaporation très rapide dès la sortie de l'injecteur. Plus en aval, la vapeur de carburant a déjà été majoritairement consommée et laisse place aux gaz brûlés comme on peut le voir sur la Fig. 5.15. La pré-évaporation peut être quantifiée avec des histogrammes normalisés de la richesse gazeuse pour les régions (A), (B) et (C) représentées en Fig. 5.16. La Fig. 5.13 montre la localisation des sondes utilisées pour les histogrammes. Comme déjà observé, la richesse atteint des valeurs très élevées et clairement au-dessus de la limite d'inflammabilité riche ($\phi_g \simeq 4$) dans la région (A), expliquant ainsi le détachement de la flamme. Au niveau du point de stabilisation de la branche externe (B), la richesse diminue et prend des valeurs plus proches de l'unité. A cet endroit se mélangent également des gaz brûlés issus de la zone de recirculation interne et de l'air froid expliquant ainsi le second pic présent à $\phi = 0.4$. Enfin, dans la région (C), la distribution de richesse présente

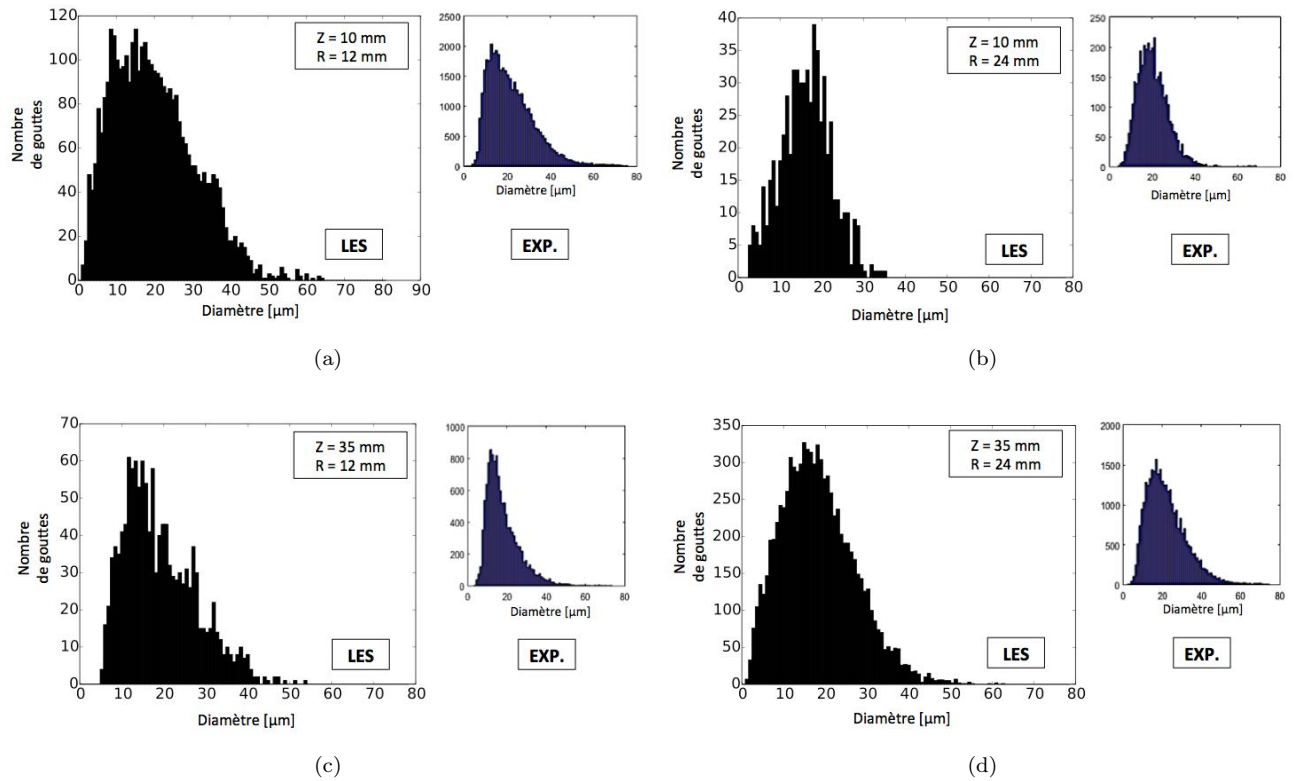


Figure 5.10 – Histogrammes de taille goutte à $Z = 10$ mm et $Z = 35$ mm pour différentes positions radiales.

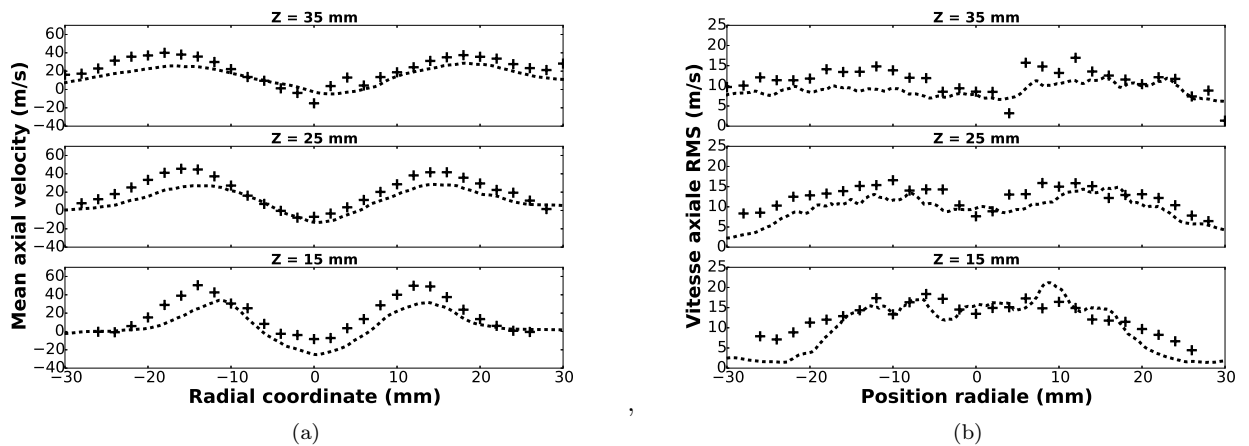


Figure 5.11 – Profils radiaux de vitesse axiale (a) moyenne et (b) RMS à $Z = 15$ mm, $Z = 25$ mm et $Z = 35$ mm pour la phase porteuse; (+) Exp.; (- -) LES. Cas réactif.

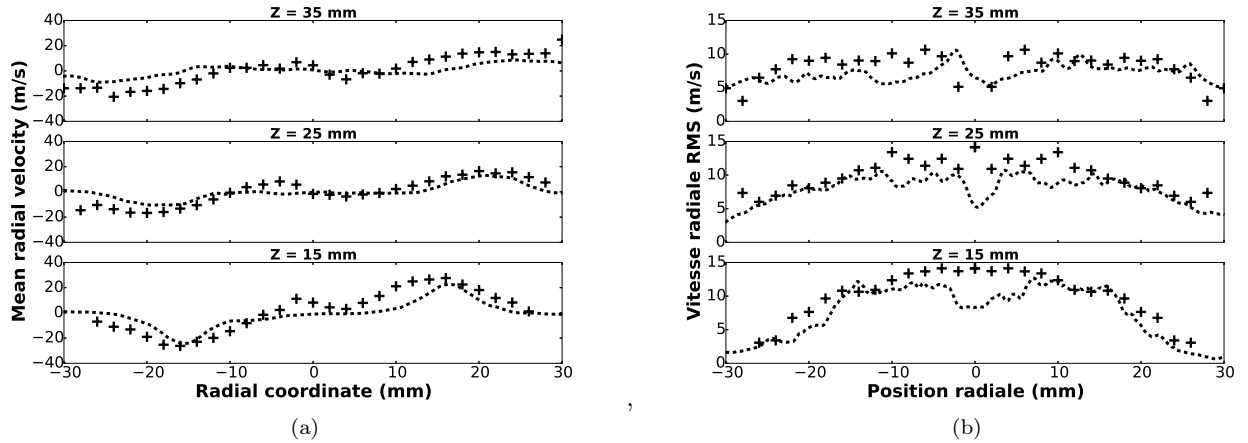


Figure 5.12 – Profils radiaux de vitesse axiale (a) moyenne et (b) RMS à $Z = 15$ mm, $Z = 25$ mm et $Z = 35$ mm pour la phase porteuse; (+) Exp.; (- -) LES. Cas réactif.

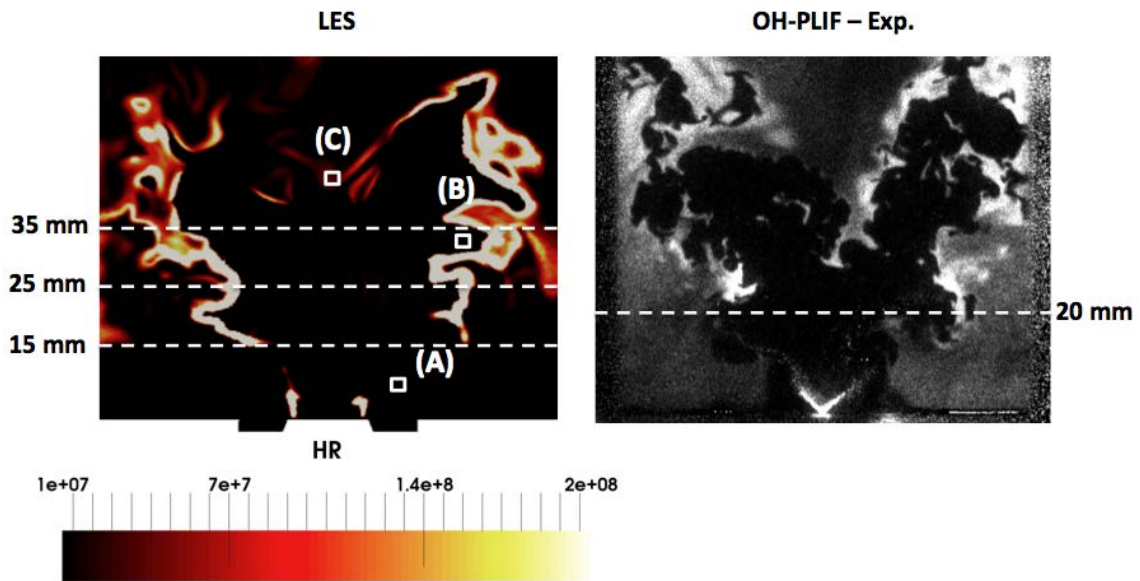


Figure 5.13 – Champ instantané LES de température (gauche) et image OH-PLIF obtenue expérimentalement (droite). Les carrés blancs représentent la position de sondes utilisées dans la LES.

un premier pic situé à environ $\phi = 0.3$ et un second pic situé autour de l'unité. Le premier est dû à la présence de gaz brûlés piégés dans la zone de recirculation interne. Le second pic est lié à la vapeur de carburant non consommée par la flamme externe (B), capturée dans la zone de recirculation interne qui permet la formation de la flamme centrale.

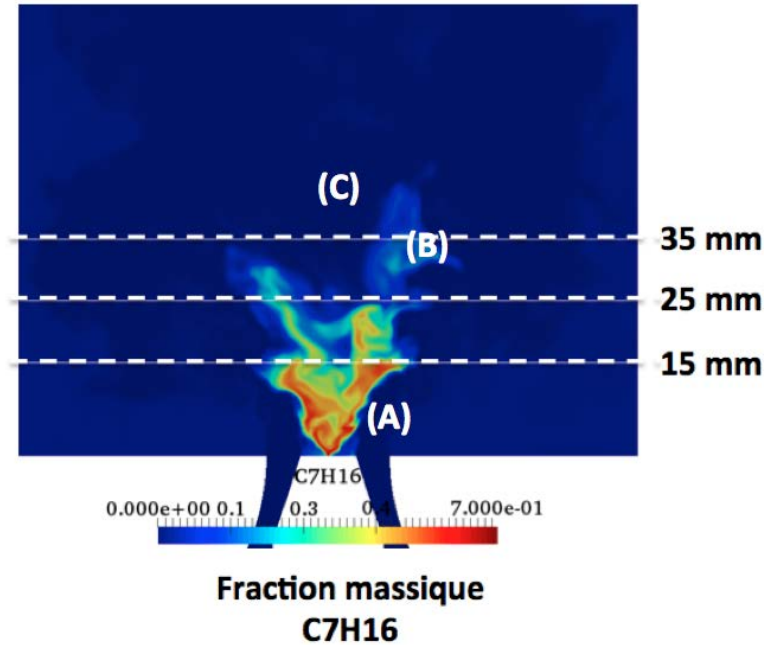


Figure 5.14 – Champ instantané LES de fraction massique de vapeur de carburant.

5.5.2 Régimes de combustion

La figure 5.17 montre un champ d'indice de Takeno défini comme au Chapitre précédent (Section 4.5.3 Eq. 4.10) avec deux isocontours de richesse ($\phi = 1$ et $\phi = 10$). Celui-ci révèle une structure de flamme dominée principalement par de la combustion non-prémélangée. Une zone de flamme prémélangée, moins puissante, est aussi visible coté air de la flamme non-prémélangée. Ce front est dû à la vapeur de carburant présente à l'extérieur de la flamme, issue des gouttes l'ayant traversé, mais qui reste en faible concentration. Comme il a été évoqué précédemment, l'isocontour de richesse $\phi = 10$ est situé juste en aval de l'injecteur. Cette richesse excessive par rapport à la limite d'inflammabilité haute qui est de $\phi \simeq 4$ délimite le point de stabilisation des branches externes (B). Selon l'indice de Takeno, la branche interne (C) consiste en une flamme de diffusion brûlant à la stoechiométrie. Un scatterplot de la température en fonction de la fraction de mélange dans les deux zones réactives est représenté en Fig. 5.18a et 5.18b. Les points sont différenciés suivant l'indice de Takeno. Dans la zone (B), la combustion est partiellement prémélangée comme l'atteste le grand nombre d'états représentés dans l'espace de phase. La part de combustion non prémélangée est nettement plus significative dans la zone (C). Dans les deux cas, la température maximale est observée au niveau de la fraction de mélange stoechiométrique ($z_{st} = 0.062$).

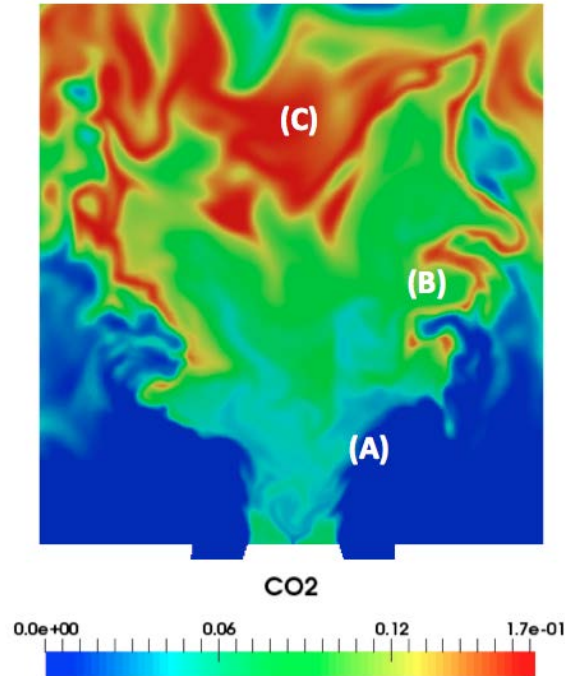


Figure 5.15 – Champ instantané LES de fraction massique de CO_2 .

5.6 Conclusion et perspectives

Les deux études réalisées d'une part sur les configurations de flamme jet et d'autre part sur la flamme swirlée diphasique, ont permis une meilleure compréhension de la structure de flamme diphasique. Le rôle prépondérant de la phase liquide et de son évaporation sur la structure de flamme a été mis en évidence, notamment au niveau des différents régimes de combustion présents. Contrairement aux flammes purement gazeuses, le régime de combustion non prémélangée est beaucoup plus représenté dans ce type de brûleur diphasique, caractéristique des brûleurs aéronautiques. Ce genre de calcul a pu être réalisé sans modèle de combustion turbulente pour des configurations à l'échelle de laboratoire, néanmoins il est nécessaire de pouvoir modéliser ce type de flammes avec des maillages moins raffinés. Aujourd'hui, les flammes de diffusion sont en général modélisées avec des approches tabulées en LES. En effet, l'approche de "flamme épaissie" développée pour les flammes prémélangées n'est pas directement applicable pour les flammes de diffusion. Cependant, il serait très utile de disposer de cette approche, qui présente des nombreux avantages (Section 1.2.3), pour les flammes diphasiques. C'est pourquoi, la dernière partie de ce manuscrit est consacrée au développement d'un modèle de combustion turbulente pour les flammes de diffusion en LES, compatible avec l'approche TFLES décrite en Section 2.8.3.

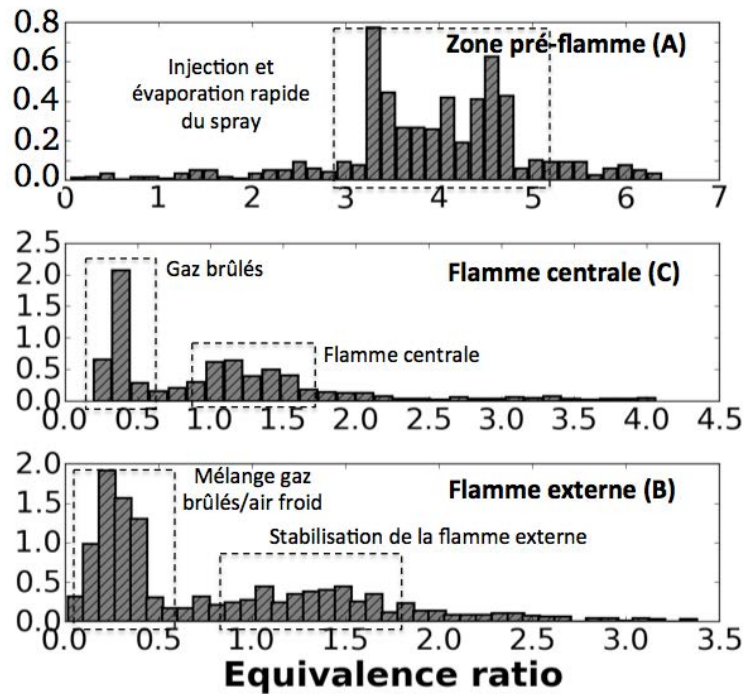


Figure 5.16 – Histogrammes de richesse gazeuse dans les différentes régions de la flamme.

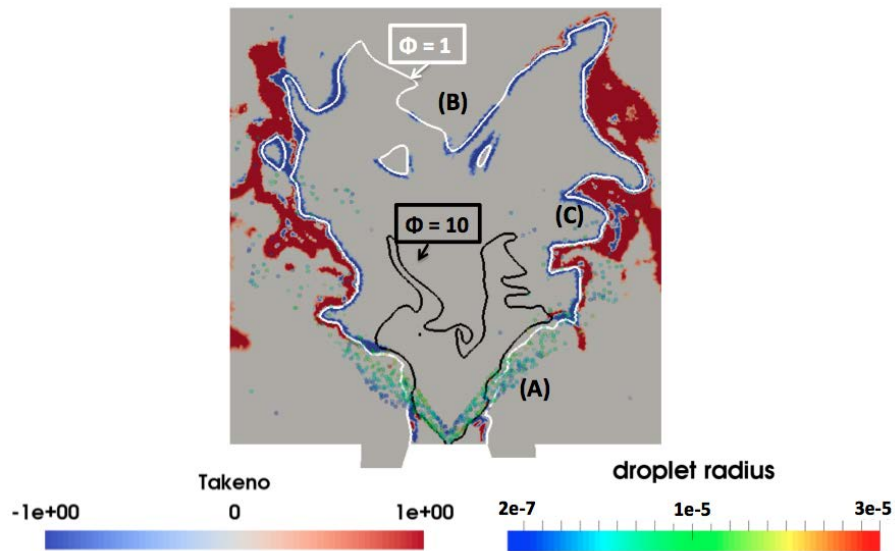


Figure 5.17 – Indice de Takeno (diffusion en noir, prémélange en rouge) et isocontours de richesse gazeuse. Les gouttes sont colorées par leur taille.

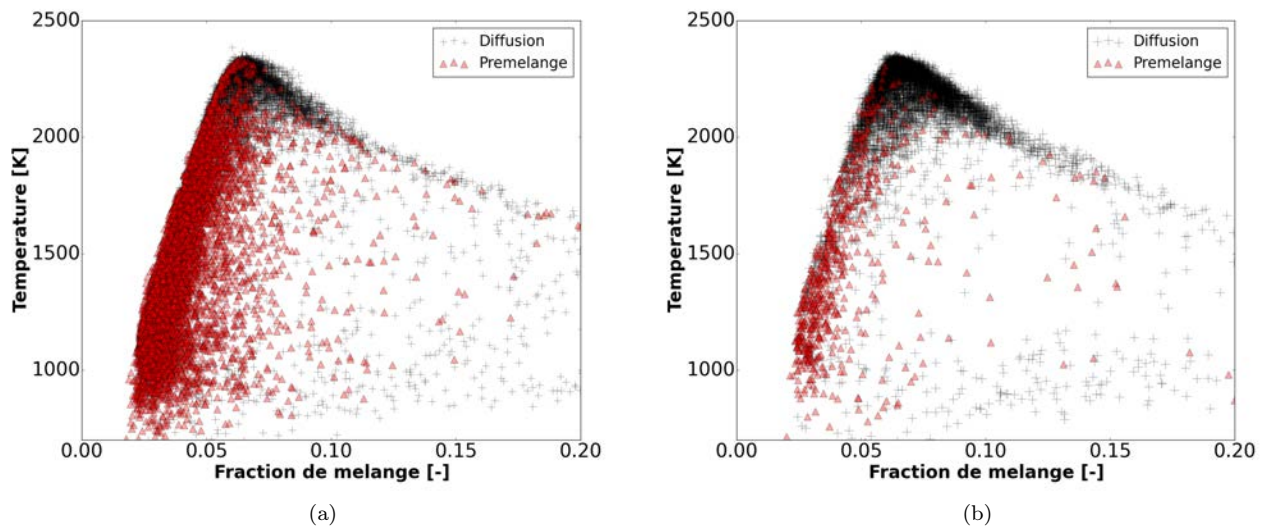


Figure 5.18 – Scatterplot de température en fonction de la fraction de mélange (a) pour la zone (B) et (b) pour la zone (C).

Quatrième partie

Théorie et modélisation de la combustion non prémélangée

L'étude du brûleur KIAI diphasique dans les Chapitres 4 et 5 a mis en évidence la présence de régimes de combustion prémélangés et non prémélangés. Ces deux régimes de combustion correspondent à des structures de flamme très différentes, qui interagissent également différemment avec l'écoulement.

Les flammes de diffusion sont présentes dans certaines applications spécifiques où le mélange, même partiel, des réactifs avant combustion est indésirable ou impossible. Dans le domaine spatial par exemple, les flammes $H_2 - O_2$ sont toujours attachées du fait de la forte réactivité de ce mélange, et sont donc de vraies flammes de diffusion. Ces flammes sont également recherchées dans certains procédés industriels (par exemple dans les fours verriers) pour leur rayonnement important du fait de leur température maximale élevée, qui permet des transferts thermiques relativement uniformes sur les très grandes surfaces que peuvent représenter les bains de verre. Dans le cas présent, le prémélange est retardé par le combustible liquide qui doit s'évaporer et des flammes de diffusion sont observées.

Le but de cette partie est de rappeler les principales caractéristiques des flammes non prémélangées (Chapitre 6) pour déduire une approche de modélisation des flammes turbulentes au Chapitre 7.

Chapitre 6

Théorie et bases de la combustion non prémélangée

Sommaire

6.1	Structure d'une flamme de diffusion laminaire stationnaire étirée	148
6.1.1	<i>La fraction de mélange</i>	149
6.1.2	<i>Equation de flamelette</i>	151
6.1.3	<i>Solution complète</i>	153
6.2	Quantités d'intérêt pour l'analyse des flammes de diffusion	155
6.2.1	<i>Epaisseur de flamme</i>	156
6.2.2	<i>Taux de dissipation scalaire χ</i>	156
6.2.3	<i>Taux de dégagement de chaleur $\dot{\Omega}$</i>	157
6.3	Illustration en combustion méthane-air	158
6.4	Effets de la turbulence sur la flamme de diffusion et modélisations existantes	160
6.5	Conclusion	164

Bien que la plupart des applications industrielles courantes implique des régimes d'écoulements turbulents, l'étude des flammes laminares est primordiale dans la mesure où celles-ci permettent de comprendre l'interaction de la combustion avec un écoulement turbulent. La structure des flammes de diffusion laminaire est généralement étudiée à partir de configurations génériques de flamme à contre-courant (Fig. 6.1). Deux solutions pseudo-1D peuvent être définies, correspondant à une flamme non étirée instationnaire (**Unsteady Unstrained (UU)**) ou une flamme étirée stationnaire (**Steady Strained (SS)**).

Dans le premier cas (UU), une flamme de diffusion s'établit dans un volume au repos, où le carburant et l'oxydant sont initialement séparés (Fig. 6.1a). Pour subsister, la flamme s'élargit au cours du temps. En guise d'illustration, une flamme de diffusion 1D est calculée avec AVBP. La configuration et les conditions limites sont présentées en Fig. 6.2. Initialement, l'écoulement est au repos et une flamme de diffusion calculée avec CANTERA est placée au centre du domaine. La Fig. 6.3 montre l'évolution de la flamme de diffusion à

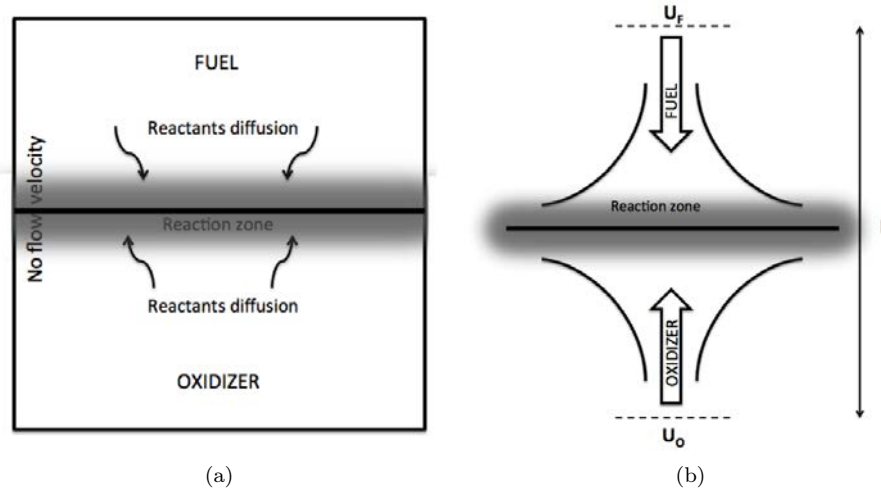


Figure 6.1 – Schémas des configurations (a) (UU) et (b) (SS).

partir du champ de température, à deux instants donnés. Dans ce cas, la flamme consomme de façon graduelle les réactifs qui diffusent vers la zone de réaction et la vitesse de l'écoulement reste quasiment nulle. Par conséquent, la flamme s'épaissit continuellement. Au bout d'un certain temps, celle-ci va atteindre les bords du domaine pour finalement s'éteindre une fois tous les réactifs consommés.

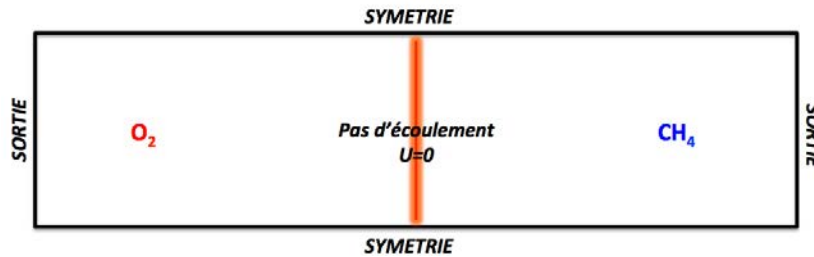


Figure 6.2 – Illustration de la configuration (UU) : schéma et conditions limites de la configuration calculée avec AVBP.

Dans le second cas (SS), un écoulement à contre-courant est introduit afin de compenser le transport diffusif et conduit à une solution stationnaire (Fig. 6.1b). L'écoulement à contre-courant résulte de l'impact de deux jets opposés contenant respectivement du carburant et de l'oxydant, et est caractérisé par un plan de stagnation, généralement différent du plan stœchiométrique où la flamme est positionnée. La structure de flamme dépend alors d'un paramètre additionnel, à savoir l'étirement Λ défini comme le gradient de vitesse dans le plan tangent à la position de la flamme. Dans un écoulement réactif, celui-ci n'est pas

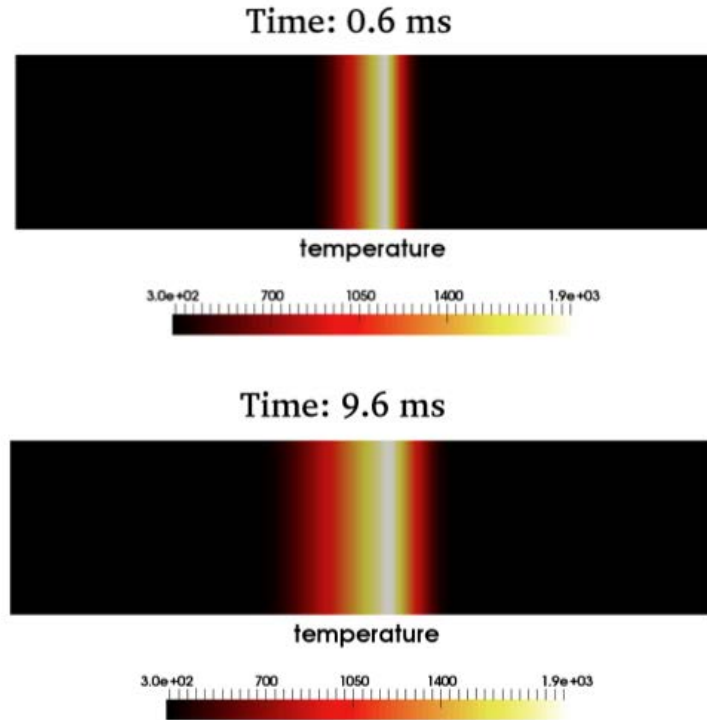


Figure 6.3 – *Illustration de la configuration (UU) : Champ de température à deux instants donnés.*

constant du fait de la variation de masse volumique ρ , mais il peut être caractérisé à partir de quantités globales avec :

$$\Lambda^* \simeq \frac{u_f + u_o}{L} \quad (6.1)$$

où u_F et u_O sont respectivement les vitesses d'injection de carburant et d'oxydant, et L est la distance entre les deux plans d'injection. La structure d'une flamme de diffusion dans l'espace physique est schématisée en Fig. 6.4. Le pic de température est localisé à la stoechiométrie et diffuse vers le carburant et l'oxydant frais. Ces deux exemples illustrent bien le fait que contrairement aux flammes prémélangées, les flammes de diffusion ne se propagent pas et ne possèdent pas d'épaisseur intrinsèque. Leur structure interne dépend de l'écoulement et plus particulièrement de l'étirement local.

La configuration académique de flamme à contre-courant a souvent été étudiée, aussi bien par les numériciens que les expérimentateurs, car elle permet l'étude détaillée de la structure d'une flamme de diffusion pure dans une région bien déterminée avec des conditions

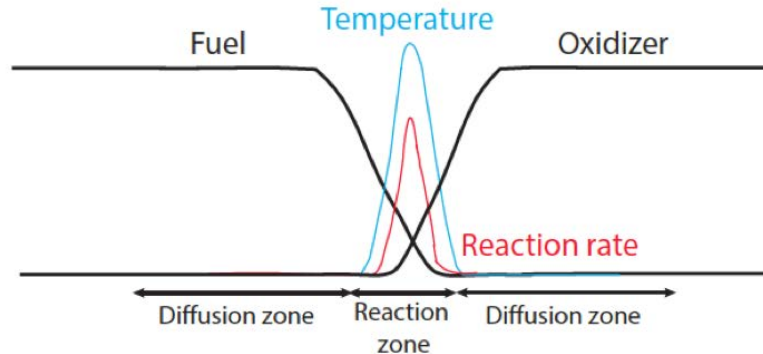


Figure 6.4 – Structure d'une flamme de diffusion dans l'espace physique.

limites bien définies. Une description détaillée des différentes configurations de flamme à contre-courant étudiées expérimentalement est fournie par Tsuji [184]. On peut notamment citer les travaux fondamentaux de Potter et Butler [95], repris et améliorés par Pandya et Weinberg [134] portant sur le développement de méthodes optiques pour étudier la structure des flammes de diffusion, et plus particulièrement les limites d'extinction. De nombreuses études numériques ont également été réalisées sur ce sujet et il serait impossible de toutes les citer. Sung *et al.* [181] montrent expérimentalement et numériquement que l'épaisseur de la flamme est inversement proportionnelle à la racine carrée de l'étirement dans le cas d'une flamme de diffusion méthane/oxygène-azote à 1 bar. Brown *et al.* [28] retrouvent ce résultat pour des flammes de diffusion H₂/air en faisant varier les taux de dilution. Balakrishnan *et al.* [9, 8] ont réalisé une étude numérique traitant l'influence de la pression (0.25-10 bar) sur les limites d'extinction et d'allumage des flammes de diffusion à contre-courant H₂/O₂ avec des chimies réduites et détaillées. Il observe ainsi que l'étirement critique conduisant à l'extinction augmente rapidement lorsque la pression augmente. Williams [205] montre que le taux d'étirement correspondant à l'extinction est influencé par le transport moléculaire. Im *et al.* [84] analysent la réponse de la flamme à contre-courant à un étirement oscillant. Des études plus récentes ont été réalisées avec des carburants complexes JP-8 en chimie réduite et détaillée [45]. Ribert *et al.* [157] répertorient de façon relativement complète les études réalisées sur les flammes de diffusion à contre-courant.

6.1 Structure d'une flamme de diffusion laminaire stationnaire étirée

On considère une chimie globale irréversible à une étape du type :



avec ν_k les coefficients stoechiométriques liés à chaque espèce. On fait ensuite l'hypothèse que la chaleur massique de chaque espèce k , notée C_{p_k} , est la même et qu'elle est indépendante de la température. On considère des nombres de Lewis Le unitaires pour des raisons de simplification bien que les principales propriétés démontrées ci-après restent valables dans le cas général. La pression thermodynamique est considérée constante. Les équations d'équilibre de fractions massiques d'espèces et de température s'écrivent :

$$\frac{\partial \rho Y_F}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{u} Y_F) = \nabla \cdot \left(\frac{\lambda}{C_p Le_F} \nabla Y_F \right) + \dot{\omega}_F \quad (6.3)$$

$$\frac{\partial \rho Y_O}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{u} Y_O) = \nabla \cdot \left(\frac{\lambda}{C_p Le_O} \nabla Y_O \right) + s \dot{\omega}_F \quad (6.4)$$

$$\frac{\partial \rho T}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{u} T) = \nabla \cdot \left(\frac{\lambda}{C_p} \nabla T \right) - \frac{Q}{C_p} \dot{\omega}_F \quad (6.5)$$

avec $s = (\nu_O W_O) / (\nu_F W_F)$ le rapport stoechiométrique, $\dot{\omega}_F$ le taux de consommation du fuel et Q la quantité de chaleur dégagée par la combustion d'une unité de masse de carburant.

6.1.1 La fraction de mélange

En faisant l'hypothèse que toutes les espèces k diffusent de la même façon ($Le_k = Le$) et que la diffusion thermique est équivalente à la diffusion moléculaire ($Le = 1$), par combinaison des équations 6.3, 6.4 et 6.5, il est possible d'obtenir une unique équation de convection-diffusion sans terme source réactif :

$$\frac{\partial \rho z}{\partial t} + \frac{\partial \rho u z}{\partial x} = \frac{\partial}{\partial x} \left(\rho D \frac{\partial z}{\partial x} \right) \quad (6.6)$$

où z est un scalaire passif solution d'une équation de transport sans terme source. La définition de z n'est pas unique et on peut utiliser par exemple :

$$z_0 = s Y_F - Y_O \quad z_1 = \frac{C_p T}{Q} + Y_F \quad z_2 = s \frac{C_p T}{Q} + Y_O \quad (6.7)$$

En combinant z_0 , z_1 et z_2 de façon à ce que les conditions limites soient les mêmes (par exemple entre 0 et 1), toutes ces définitions sont équivalentes. Par exemple, en utilisant les conditions limites connues du côté de l'oxydant et du combustible, on trouve :

$$z = \frac{sY_F - Y_O + Y_O^0}{sY_F^0 + Y_O^0} \quad (6.8)$$

où Y_F^0 et Y_O^0 sont respectivement les fractions massiques de combustible et d'oxygène à l'injection. De cette façon, z vaut 1 du côté de l'entrée du combustible et 0 du côté de l'injection de l'oxydant. z est aussi appelé fraction de mélange car il caractérise le mélange non réactif de carburant et d'oxydant. La fraction de mélange peut être exprimée sous une autre forme, introduisant la richesse Φ :

$$z = \frac{1}{1 + \phi} \left(\phi \frac{Y_F}{Y_F^0} - \frac{Y_O}{Y_O^0} + 1 \right) \quad (6.9)$$

avec $\phi = sY_F^0/Y_O^0$. La fraction de mélange à la stoechiométrie z_{st} est obtenue pour $sY_F = Y_O$:

$$z_{st} = \frac{1}{1 + \phi} \quad (6.10)$$

La fraction de mélange définie par l'Eq. 6.8 présente des limites dans la mesure où elle n'est plus un scalaire passif pour des flammes réelles où des effets de dissociations et de diffusion préférentielle apparaissent. C'est pourquoi on utilise plus généralement une fraction de mélange définie à partir de la fraction massique des atomes et non plus des espèces, suivant la définition de Bilger [15] :

$$\beta = \sum_{i=1}^{n_{spec}} \gamma_i \sum_{j=1}^{N_a} n_{ij} \frac{W_i Y_j}{W_j}, \quad (6.11)$$

où n_{ij} est le nombre d'atomes de l'élément i dans l'espèce j et N_a est le nombre total d'atomes. γ_i représentent les poids, avec les valeurs $\gamma_C = 2/W_C$, $\gamma_H = 1/(2W_H)$ et $\gamma_O = -1/W_O$ selon Bilger. β est alors normalisé par la valeur pour l'oxydant β_O et la valeur pour le combustible β_F afin d'obtenir la fraction de mélange z :

$$z = \frac{\beta - \beta_O}{\beta_F - \beta_O}. \quad (6.12)$$

Cette définition est retenue dans toute la suite. La fraction de mélange constitue la base de la théorie des flammelettes car elle permet de réduire le nombre de variables dont dépendent les fractions massiques et la température de sorte que :

$$Y_k = Y_k(t, z(t)) \quad T = T(t, z(t)) \quad (6.13)$$

Physiquement, cela signifie que pour un étirement donné, la structure de la flamme est localement monodimensionnelle et qu'elle ne dépend que du temps et de la coordonnée normale à la flamme [146]. Cette hypothèse est vérifiée pour des écoulements multidimensionnels dès lors que la flamme est suffisamment mince comparé aux longueurs caractéristiques de l'écoulement. Elle simplifie grandement le problème puisqu'elle permet de découpler le problème de mélange qui consiste à déterminer la fraction de mélange $z(x, t)$ et le problème de la structure de flamme qui repose sur la recherche de $Y_k(z, t)$ et $T(z, t)$.

6.1.2 Equation de flamelette

La structure de la flamme peut être décrite en résolvant les équations de diffusion-réaction dans l'espace de z , obtenues après le changement de variable $(x, t) \rightarrow (z, \tau)$:

$$\rho \frac{\partial \Psi}{\partial \tau} - \rho \chi \frac{\partial^2 \Psi}{\partial z^2} = \dot{\omega}_\Psi \quad (6.14)$$

où Ψ désigne un scalaire (température et fraction de mélange) et $\chi = D(\partial z / \partial x)_{st}^2$ représente le taux de dissipation scalaire. La dépendance en temps dans l'espace de z peut être négligée pour des chimies rapides de sorte que l'Eq. 6.14 peut s'écrire :

$$- \rho \chi \frac{\partial^2 \Psi}{\partial z^2} = \dot{\omega}_\Psi \quad (6.15)$$

En dehors de la zone de réaction, $\dot{\omega}_\Psi = 0$ et les variables de la flamme deviennent des fonctions linéaires de z . Dans la zone de réaction, et pour une chimie donnée, les variables de flamme sont des fonctions de z à un seul paramètre, à savoir le taux de dissipation scalaire χ . Ainsi, le taux de dissipation scalaire χ paramétrise l'équation et sa connaissance permet sa résolution directe dans l'espace de z .

Solution de Burke et Schumann [30]

Pour un étirement donné, une solution simple de l'équation 6.15 est la solution de Burke et Schumann [30]. Cette solution repose sur l'hypothèse de chimie irréversible infiniment rapide. La conséquence directe de cette hypothèse est que la flamme est infiniment mince, et donc que les variables de la flamme sont toutes des fonctions linéaires de z . Cette hypothèse correspond à un nombre de Damköhler infini. La chimie infiniment rapide implique que le combustible et l'oxydant ne peuvent pas coexister, autrement dit "mixed is burnt", et on

peut écrire que $Y_O = 0$ du côté du combustible ($z > z_{st}$) et $Y_F = 0$ du côté oxydant ($z < z_{st}$). A partir des relations 6.8 et 6.9, on en déduit les expressions de la température et des fractions massiques en fonction de la fraction de mélange z de part et d'autre de la flamme.

$$z > z_{st} \left\{ \begin{array}{l} Y_F(z) = Y_F^O \frac{z - z_{st}}{1 - z_{st}} \\ Y_O(z) = 0 \\ T(z) = \underbrace{zT_F^O + (1 - z)T_O^0}_{(a)} + \underbrace{\frac{QY_F^0}{C_p} z_{st} \frac{1 - z}{1 - z_{st}}}_{(b)} \end{array} \right. \quad (6.16)$$

$$z < z_{st} \left\{ \begin{array}{l} Y_F(z) = 0 \\ Y_O(z) = Y_O^0 \left(1 - \frac{z}{z_{st}}\right) \\ T(z) = \underbrace{zT_F^0 + (1 - z)T_O^0}_{(a)} + \underbrace{\frac{QY_F^0}{C_p} z}_{(b)} \end{array} \right. \quad (6.17)$$

où T_0^O et T_F^O sont les températures du côté de l'oxydant et du combustible, Y_F^O et Y_O^O sont les fractions massiques de combustible et d'oxydant et Q est la chaleur de combustion. Les termes (a) et (b) des Eq. 6.16 et 6.17 représentent respectivement la température de mélange entre le combustible et l'oxydant (ligne de mélange) et la température due à la réaction chimique. La forme de ces solutions dans l'espace de fraction de mélange est représentée en Fig. 6.5. L'espace grisé correspond à l'ensemble des états possibles du milieu. La température de flamme adiabatique est obtenue pour $z = z_{st}$:

$$T_{ad} = z_{st}T_F^O + (1 - z_{st})T_O^O + \frac{QY_F^0}{C_p} z_{st} = \frac{1}{1 + \phi} \left(T_F^O + T_O^0 \phi + \frac{QY_F^0}{C_p} \right) \quad (6.18)$$

Chimie non infiniment rapide

Lorsque la chimie n'est plus infiniment rapide, la structure de la flamme est plus complexe et dépend de l'écoulement via la dissipation scalaire χ_{st} . On introduit alors le nombre de Damköhler (Section 1.2.3 Eq. 1.6) qui permet de comparer les échelles de temps liées à la chimie τ_c et au mélange τ_f , évalué ici comme $1/\chi_{st}$:

$$Da = \frac{\tau_f}{\tau_c} \simeq \frac{1}{\chi_{st}\tau_c} \quad (6.19)$$

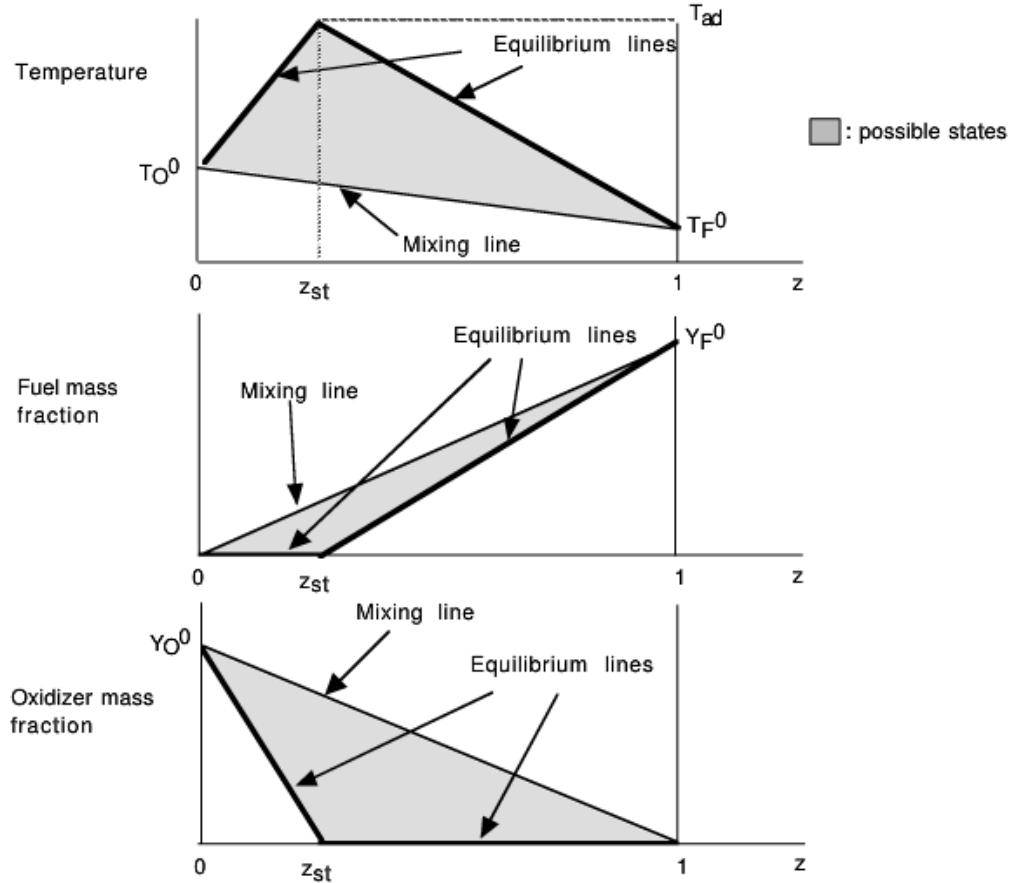


Figure 6.5 – Solution de Burke et Schumann. Extrait de [146].

Les équations et résultats des sections précédentes restent valables pour le cas de la chimie non infiniment rapide, dans la limite des nombres de Damköhler élevés correspondant aux valeurs d'étirement faible. La Fig. 6.6 illustre la déviation induite par la chimie finie sur la réponse du dégagement de chaleur total lorsque l'étirement augmente. Cela se traduit par une modification de la structure de flamme en z illustrée sur la Fig. 6.7 par les lignes pointillées. La température maximale est inférieure à celle obtenue pour une chimie infiniment rapide.

6.1.3 Solution complète

La résolution complète de la flamme de diffusion dans l'espace physique nécessite de résoudre, en plus de l'équation de flammelette, l'équation de transport pour la fraction de mélange z (Eq. 6.6). Pour chacune des deux configurations ((UU) et (SS)), cette équation

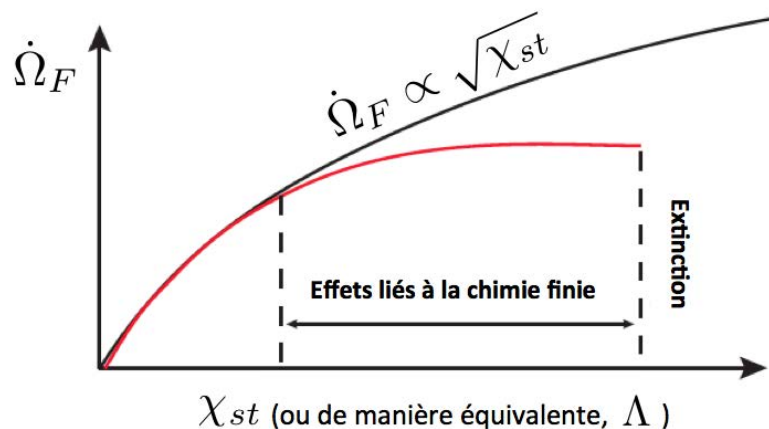


Figure 6.6 – Taux de consommation d’une flamme de diffusion en fonction de la dissipation scalaire (ou de manière équivalente à l’étirement ou à l’inverse du nombre de Damköhler $1/Da$ pour une chimie infiniment rapide (noir) et une chimie lente (rouge).

a une solution analytique de la forme :

Cas (UU) :

$$z(x, t) = \frac{1}{2} \left[1 - \operatorname{erf} \left(\frac{\xi(x)}{2\sqrt{Dt}} \right) \right] \quad (6.20)$$

Cas (SS) :

$$z(x) = \frac{1}{2} \left[1 - \operatorname{erf} \left(\frac{\xi(x)}{\sqrt{2D/\Lambda_{st}}} \right) \right] \quad (6.21)$$

où la variable d’Howarth-Dorodnitsyn $\xi(x) = \int_{x_{st}}^x \rho/\rho_{st} dx$ (l’indice st réfère à la stoechiométrie) permet de prendre en compte la variation de masse volumique au travers de la flamme [116]. Dans les équations 6.20 et 6.21, D désigne la diffusivité moléculaire égale à la diffusivité thermique et $\Lambda_{st} = (1/\rho)(\partial\rho u/\partial x)_{|st}$ représente l’étirement évalué à la position de la flamme. Ces équations montrent que les flammes instationnaires non étirées et stationnaires étirées ont des structures similaires dans l’espace de z , avec une équivalence entre $2\sqrt{t}$ et $\sqrt{2/\Lambda_{st}}$.

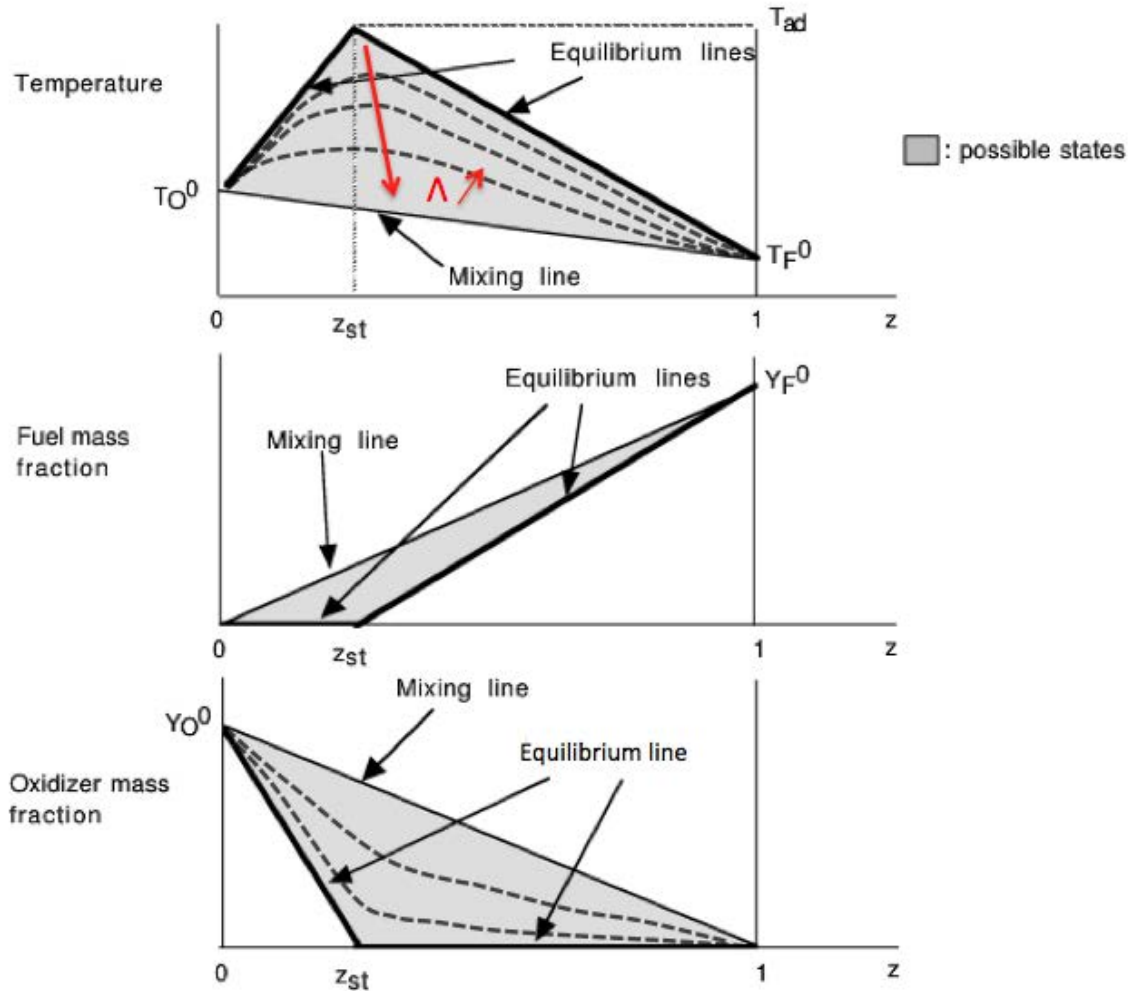


Figure 6.7 – Effet de la chimie non infiniment rapide sur la structure de flamme en z . Adapté de [146].

6.2 Quantités d'intérêt pour l'analyse des flammes de diffusion

Dans l'espace de fraction de mélange, l'Eq.6.15 montre qu'une flamme de diffusion résulte d'un bilan diffusif-réactif, le transport étant inclus dans z . Même si les flammes de diffusion n'ont pas de vitesse ou d'épaisseur intrinsèques, quelques propriétés intéressantes peuvent être déduites des équations précédemment décrites.

6.2.1 Epaisseur de flamme

On peut définir une épaisseur de flamme à partir de z , qu'on appelle **l'épaisseur thermique** δ_{th} , évaluée à partir du gradient de fraction de mélange au niveau de la flamme :

$$\delta_{th} = \left(\frac{\partial z}{\partial x} \right)_{st}^{-1} \quad (6.22)$$

En effet, si on repart de la définition $\delta_{th} = (1/\Delta_{th})/(\partial T/\partial x)^{-1}$, et en utilisant la propriété $T = T(z)$, on en déduit :

$$\delta_{th} = \left(\frac{1}{\Delta_{th}} \frac{\partial T}{\partial z} \frac{\partial z}{\partial x} \right)^{-1} \sim \left(\frac{\partial z}{\partial x} \right)^{-1} \quad (6.23)$$

En utilisant les expressions 6.20 et 6.21, on obtient :

Cas (UU) :

$$\delta_{th} = \sqrt{\pi D t} \quad (6.24)$$

Cas (SS) :

$$\delta_{th} = \sqrt{\pi D / 2 \Lambda} \quad (6.25)$$

L'équation 6.24 retrouve bien le fait que l'épaisseur d'une flamme (UU) augmente avec le temps t . Par contre, elle diminue lorsque l'étirement augmente (Eq. 6.25).

L'épaisseur de réaction δ_r correspond à l'épaisseur de la zone réactive et est estimée à partir de considérations asymptotiques [116] :

$$\delta_r \sim \delta_{th} Da^{-1/(1+\nu_t)} \quad (6.26)$$

où $\nu_t = \nu_F + \nu_O$ est la somme des coefficients stoechiométriques.

6.2.2 Taux de dissipation scalaire χ

Le taux de dissipation scalaire χ joue un rôle fondamental dans le mélange turbulent car il représente le taux de croissance des fluctuations d'une espèce passive, c'est-à-dire l'efficacité du mélange à petite échelle. Il est défini de la façon suivante :

$$\chi = D(\nabla z)^2 \quad (6.27)$$

où D représente la diffusivité moléculaire. La compréhension détaillée de la dissipation scalaire est importante d'une part pour sa signification physique comme on l'a souligné ci-dessus et, d'autre part, pour son rôle direct dans la modélisation du mélange turbulent. La dissipation scalaire χ caractérise ainsi l'intensité des flux d'espèces vers la flamme. Par analogie, la dissipation scalaire joue le même rôle pour la fraction de mélange que la dissipation d'énergie cinétique turbulente ε pour la vitesse. Elle est directement proportionnelle à l'étirement Λ . Dans le cas des flammes à contre-courant, on a :

$$\chi_{st} = \frac{\Lambda}{\pi} \exp[-2(\operatorname{erf}^{-1}(1 - 2z_{st}))^2] \quad (6.28)$$

Un taux de dissipation scalaire élevé peut causer un apport de réactifs trop important par rapport à la capacité de la flamme à les consommer entraînant ainsi l'extinction de la flamme par refroidissement. Il existe donc pour chaque flamme de diffusion une dissipation scalaire critique d'extinction χ_q qui dépend de la cinétique chimique et de la diffusivité des espèces.

6.2.3 Taux de dégagement de chaleur $\dot{\Omega}$

Une autre quantité primordiale est le taux de dégagement de chaleur total défini par l'intégrale du taux de consommation $\dot{\omega}_T$ au travers de la flamme. Pour une flamme de diffusion, et par analogie au taux de consommation dans le cas de la combustion prémélangée, cette quantité est représentée par l'intégrale du taux de consommation $\dot{\Omega}_\Psi$ définie comme :

$$\dot{\Omega}_T = \int_{-\infty}^{+\infty} \dot{\omega}_T dx \quad (6.29)$$

En utilisant l'équation de l'énergie Eq. 6.15, ce taux de dégagement de chaleur total peut être évalué comme :

$$\begin{aligned} \dot{\Omega}_T &= -\rho C_p \chi_{st} \left(\frac{\partial T}{\partial z}(1) - \frac{\partial T}{\partial z}(0) \right) / \left(\frac{\partial z}{\partial x} \right)_{st} \\ &= -\rho Q Y_F^0 \sqrt{D \chi_{st}} \end{aligned} \quad (6.30)$$

La même opération peut être appliquée à n'importe quelle espèce chimique. Dans les flammes de prémélange 1D, ce taux est proportionnel à la vitesse de flamme et ne dépend que de la richesse. Pour les flammes de diffusion, ce taux est directement lié à la dissipation scalaire et à la diffusivité [116]. Comparé aux flammes prémélangées pour lesquelles l'étirement introduit une légère correction linéaire à la vitesse de flamme, la dissipation scalaire contrôle directement le taux de consommation de la flamme de diffusion. C'est pourquoi ces dernières sont plus sensibles aux conditions locales de l'écoulement.

De plus, et contrairement aux flammes de prémélange, aucun paramètre chimique n'apparaît dans le taux dégagement de chaleur total : tant que la flamme reste mince (pour pouvoir utiliser les conditions limites linéaires en z), i.e dans la limite de haute énergie d'activation pour des nombres de Damköhler élevés, celui-ci n'est pas contrôlé par la chimie mais par le transport diffusif et le mélange. Enfin, on peut noter la dépendance en richesse globale au travers de z_{st} .

Par analogie aux flammes prémélangées où le taux de dégagement de chaleur est directement lié à la vitesse de flamme S_L par :

$$\dot{\Omega}_T = \rho C_p S_L (\Phi) (T_b(\Phi) - T_u) \quad (6.31)$$

où T_b and T_u représentent respectivement la température des gaz brûlés et des gaz frais, on peut écrire pour une flamme de diffusion, dans le cas où $T_F^0 = T_O^0 = T^0$:

$$\dot{\Omega}_T = \frac{\rho C_p D}{\delta_{th}} \frac{T^{ad} - T^0}{z_{st}(1 - z_{st})} \quad (6.32)$$

Dans les deux cas, le taux de consommation résulte du produit de la différence de température avec une quantité caractéristique du transport, S_L pour les flammes de prémélange (qui varie en \sqrt{AD} avec A la constante préexponentielle de la loi d'Arrhénus) et D/δ_{th} pour les flammes de diffusion.

6.3 Illustration en combustion méthane-air

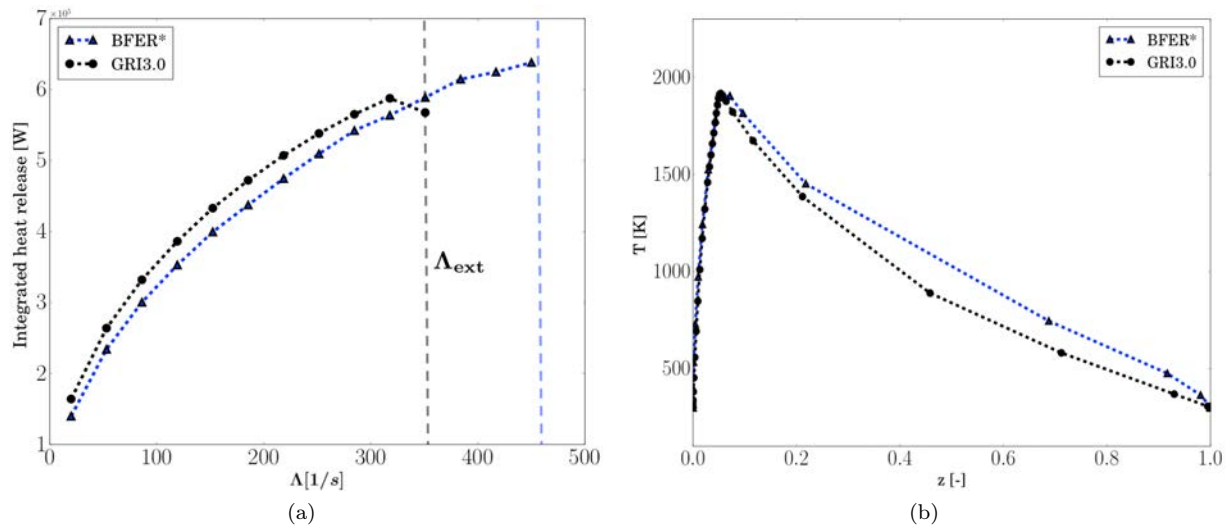
Les propriétés décrites en Section 6.2 peuvent être vérifiées dans le cas de flammes à contre-courant pseudo-1D méthane/air calculées avec CANTERA. Les calculs sont effectués pour plusieurs étirements Λ allant de 20 s^{-1} à environ 500 s^{-1} qui correspond à l'étirement d'extinction lorsque le carburant et l'air sont injectés à 300 K. La cinétique chimique utilisée est la chimie réduite BFER* développée pendant la thèse de Franzelli [63] et présentée dans le Tableau 6.1. La différence avec le schéma BFER classique réside dans le nombre de Lewis fixé à $Le_k = 1.65$ et la constante préexponentielle de la loi d'Arrhénus corrigée à $A = 3.96 \times 10^{12} \text{ (cm}^3/\text{mol/s)}$ pour retrouver à la fois la bonne vitesse de flamme et la bonne réponse à l'étirement en prémélange.

La cinétique chimique réduite BFER* a été validée dans le cas des flammes de diffusion par comparaison avec le schéma détaillé GRI3.0 en termes de température adiabatique et de dégagement de chaleur total (Fig. 6.8) pour différents étirements. Un bon accord est observé entre les résultats obtenus pour les deux mécanismes cinétiques. L'évolution du

Schéma	CH4-AIR-2S-BFER [63]
Nombre d'espèces	6
2 Réactions	R1) $CH_4 + 1.5 O_2 \rightarrow CO + 2 H_2O$ R2) $CO + 0.5 H_2O \leftrightarrow CO_2$
Facteur pré-exponentiel (R1)	$3.96 \times 10^{12} \text{ cm}^3/\text{mol/s}$
Facteur pré-exponentiel (R2)	$2.0 \times 10^8 \text{ cm}^3/\text{mol/s}$
Energie d'activation (R1)	35500 cal/mol
Energie d'activation (R2)	12000 cal/mol

Tableau 6.1 – Description du schéma réduit 2S BFER*.

taux de dégagement de chaleur en fonction de l'étirement est similaire et la température maximale est bien capturée, malgré de faibles écarts pour les valeurs de fraction de mélange élevées. Une limite de la cinétique chimique réduite est qu'elle ne permet pas de capturer précisément l'extinction qui fait intervenir des processus réactifs non pris en compte. Ainsi, l'étirement d'extinction Λ_{ext} est plus petit dans le cas de la chimie détaillée ($\Lambda_{ext} = 350 \text{ s}^{-1}$) que dans le cas de la cinétique réduite ($\Lambda_{ext} = 450 \text{ s}^{-1}$). Cependant, la combustion est le plus souvent dans un régime de grand Da , c'est-à-dire loin de l'extinction, et la cinétique réduite sera utilisée dans la suite (sauf indication contraire).

Figure 6.8 – Comparaison entre la chimie détaillée et la chimie réduite (a) du taux de dégagement de chaleur total en fonction de l'étirement et (b) du profil de température dans l'espace de fraction de mélange pour l'étirement $\Lambda = 250 \text{ s}^{-1}$.

L'épaisseur thermique et la température maximale des Fig. 6.9 et 6.10 permettent d'évaluer l'influence de l'étirement. Pour des étirements infiniment petits, la structure de la flamme tend vers une solution où l'épaisseur de la zone réaction est infiniment mince

(Eq. 6.26) tandis que l'épaisseur thermique tend vers l'infini : la flamme tend vers la solution de Burke et Schumann dans l'espace de fraction de mélange. Le taux de consommation tend également vers zéro car les flux diffusifs sont faibles du fait de la grande épaisseur thermique. La température stoechiométrique est alors maximale. Lorsque l'étirement augmente, l'épaisseur thermique de la flamme diminue, le taux de dégagement de chaleur total augmente et la température maximale diminue. Le taux de dégagement de chaleur maximal est atteint juste avant l'extinction, qui intervient brutalement pour $\Lambda_{ext} \simeq 450 \text{ s}^{-1}$. Durant la phase précédant l'extinction, la flamme n'est plus contrôlée par la diffusion mais redevient contrôlée par la chimie qui est le phénomène limitant lorsque les flux diffusifs sont très grands. L'épaisseur thermique devient très faible alors que la zone de réaction s'épaissit, jusqu'à ce que l'équilibre de réaction diffusion ne soit plus maintenu.

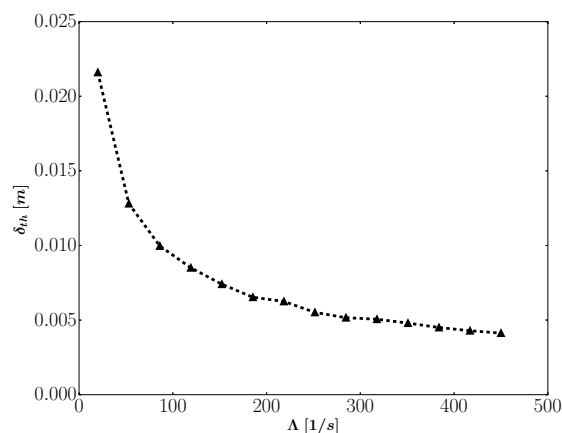


Figure 6.9 – Evolution de l'épaisseur thermique avec l'étirement (SS).

6.4 Effets de la turbulence sur la flamme de diffusion et modélisations existantes

Comme pour les flammes de prémélange, l'effet principal de la turbulence sur les flammes de diffusion est de les plisser, ce qui augmente la surface de flamme et par conséquent le taux de dégagement de chaleur total. Cependant, comme on l'a vu précédemment, la turbulence aura plus d'effets sur la structure de flamme via l'étirement. Différentes approches de modélisation existent en LES pour reproduire le comportement des flammes turbulentes et ont été décrites dans le Chapitre 2. Néanmoins, dans le cas des flammes de diffusion turbulentes, des modèles spécifiques ont été développés et sont brièvement abordés dans cette partie. Ceux-ci font l'objet de descriptions plus complètes dans les livres Williams [207] et Peters [144]. L'objectif de tous ces modèles est identique et consiste à déterminer le taux de

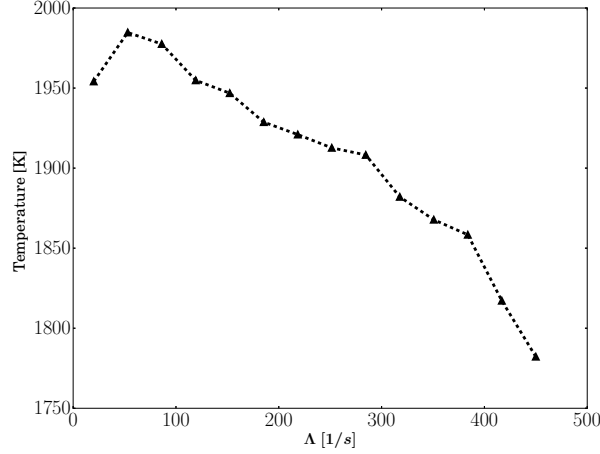


Figure 6.10 – Evolution de la température maximale avec l'étirement (SS).

dégagement de chaleur total $\dot{\Omega}$ correct de la flamme. Les modèles présentés ci-après reposent tous sur l'hypothèse de flammelette, valide pour des nombres de Damköhler élevés. Cette hypothèse permet de découpler la structure interne de la flamme, semblable à une flamme de diffusion laminaire à un étirement donné, et le transport de la flamme déformée par les structures turbulentes. La difficulté réside alors dans le couplage de ces deux problèmes. Les deux méthodologies les plus utilisées sont les méthodes PDF et les méthodes basées sur la surface de flamme.

Modèle de Magnussen et Hjertager [120]

Il s'agit d'un modèle simple reposant sur des considérations phénoménologiques identiques au modèle Eddy-Break-Up [176] pour les flammes de prémélange. Avec ce modèle, le taux de réaction moyen du combustible est contrôlé par un temps caractéristique lié au mélange turbulent défini comme le rapport entre l'énergie cinétique turbulente k et sa dissipation ϵ et la composition du mélange :

$$\overline{\dot{\omega}_F} = A\bar{\rho}\frac{\epsilon}{k}\min\left(\widetilde{Y}_F, \widetilde{Y}_O/s, C\frac{\widetilde{Y}_F}{1+s}\right) \quad (6.33)$$

avec A et C des constantes du modèle à ajuster, et s le rapport stoechiométrique. Dans ce modèle, le taux de réaction est contrôlé par l'espèce chimique en défaut.

Modèle à scalaire passif

Le modèle à scalaire passif a principalement été développé par Bilger [13, 14] et Peters [140, 141]. Il repose sur un modèle dit "local" décrivant la structure interne des flammelettes à partir de la fraction de mélange et sur un modèle dit "global" visant à déterminer respectivement la moyenne et les fluctuations de fraction de mélange \bar{z} et $\overline{z''^2}$ dus à l'écoulement turbulent à l'aide d'une équation de transport supplémentaire. Le couplage entre ces deux modèles est alors réalisé via des fonctions de densité de probabilité P_z normalisées.

La moyenne et la variance d'une fonction de la fraction de mélange $F(z)$ telle que la température ou les fractions massiques peuvent alors être déterminées de la façon suivante :

$$\overline{F}(x) = \int_0^1 F(\xi) P_z(\xi, x) d\xi \quad (6.34)$$

$$\overline{F''^2}(x) = \int_0^1 (F(\xi) - \overline{F})^2 P_z(\xi, x) d\xi \quad (6.35)$$

La difficulté réside alors dans la détermination de cette fonction de densité de probabilité. La première méthode consiste à la presumer à partir de \bar{z} et $\overline{z''^2}$, le plus souvent par une fonction β :

$$P_z(z, x) = \frac{1}{\beta(a, b)} z^{a-1} (1-z)^{b-1} \quad (6.36)$$

où les exposants $a(x)$, $b(x)$ et la fonction $\beta(a, b)$ sont donnés par les relations suivantes :

$$a = \frac{\bar{z}}{\overline{z''^2}} \left[\bar{z}(1-\bar{z}) - \overline{z''^2} \right] \quad (6.37)$$

$$b = \frac{1-\bar{z}}{\overline{z''^2}} \left[\bar{z}(1-\bar{z}) - \overline{z''^2} \right] \quad (6.38)$$

$$\beta(a, b) = \int_0^1 x^{a-1} (1-x)^{b-1} dx \quad (6.39)$$

La fonction β est supposée reproduire correctement le comportement de la densité de probabilité de z lorsque la valeur moyenne \bar{z} est proche de 0 ou 1, ou autour de 0.5.

Modèle CMC (Conditional Momentum Closure)

L'approche CMC décrite en Section 2.8.2 est également utilisée pour modéliser les flammes de diffusion turbulentes. Celle-ci consiste à filtrer les équations de transport d'espèces conditionnellement à la fraction de mélange z : $(\overline{\rho Y_i |_{z=z^*}})$. Les fractions massiques d'espèces filtrées s'écrivent alors :

$$\overline{\rho \tilde{Y}_k} = \int_0^1 (\overline{\rho Y_k |_{z^*}} p(z^*)) dz^* \quad (6.40)$$

où les fractions massiques d'espèces filtrées conditionnées $(\overline{\rho Y_k |_{z^*}})$ pour une valeur de z^* donnée sont solutions d'équations de conservation pour chaque niveau de z^* . Ces niveaux doivent être pris en nombre suffisant pour rester précis, ce qui mène à des coûts de calcul très élevés. Des méthodes comme l'approche PCM (Presumed Conditional Momentum) [191] ont été proposées afin de réduire ce coût en introduisant une tabulation des valeurs $(\overline{\rho Y_k |_{z^*}})$. Ce formalisme requiert également la description de la fonction de densité de probabilité $p(z^*)$ qui est généralement présumée.

Transport de PDF

Les méthodes de transport de PDF [147] font partie des méthodes statistiques décrites en Section 2.8.2. Le taux de réaction moyen $\overline{\dot{\omega}_k}$ de l'espèce k est exprimé comme :

$$\overline{\dot{\omega}_k} = \int_{Y_1}^1 \int_{Y_2}^1 \dots \int_{Y_N}^1 \int_T \dot{\omega}_k(Y_1, Y_2, \dots, Y_N, T) p(Y_1, Y_2, \dots, Y_N, T) dY_1 dY_2 \dots dY_N dT \quad (6.41)$$

où $p(Y_1, Y_2, \dots, Y_N, T)$ désigne la probabilité jointe d'espèces et de température. Les taux de réaction $\dot{\omega}_k$ sont obtenus par des lois d'Arrhenius. L'avantage de cette approche est sa généralité. Elle ne nécessite pas que l'hypothèse de flammelette soit vérifiée et permet en effet de prendre en compte des chimies complexes. La difficulté consiste à déterminer $p(Y_1, Y_2, \dots, Y_N, T)$. La résolution d'une équation pour la PDF jointe de toutes les variables est possible avec une méthode de type Monte Carlo et peut fournir une bonne description des phénomènes à condition qu'un modèle satisfaisant de micro-mélange soit utilisé. Le problème majeur de cette méthode est qu'elle reste extrêmement coûteuse en temps de calcul.

Modèle de flamme cohérente

Le modèle de flamme cohérente (CFM pour Coherent Flame Model), initialement développé par Marble et Broadwell [121] repose d'une part, sur le transport de la densité

de surface de flamme moyenne Σ , définie comme le rapport moyen de l'aire de flamme δA comprise dans un volume δV , par l'écoulement turbulent et d'autre part, sur l'évaluation du taux de consommation par unité de surface de flamme \dot{m} . Le taux de réaction moyen est ainsi donné par la relation :

$$\dot{\Omega} = \dot{m}\bar{\Sigma} \quad (6.42)$$

L'évaluation de \dot{m} se fait généralement par le biais de bibliothèques de flammelettes où le taux de consommation est paramétré en fonction de l'étirement, des températures et des concentrations des réactifs. La densité de surface de flamme Σ est obtenue en résolvant une équation de transport :

$$\frac{\partial \bar{\Sigma}}{\partial t} + \nabla \cdot (\bar{u}\bar{\Sigma}) = \nabla \cdot \left(\frac{\mu_T \nabla \cdot \bar{\Sigma}}{\sigma_\Sigma} \right) + P_\Sigma - D_\Sigma \quad (6.43)$$

où σ_Σ représente le nombre de Schmidt turbulent au niveau la surface de flamme, P_Σ et D_Σ désignent respectivement les termes de production et de destruction de surface de flamme détaillés dans [121].

6.5 Conclusion

Ce chapitre a rappelé les propriétés et les paramètres régissant la structure des flammes de diffusion. L'influence importante des conditions locales de l'écoulement s'exprime au travers de la dissipation scalaire notamment sur l'épaisseur de la flamme et le taux de dégagement de chaleur total qui dépend également de la diffusivité. Les effets de la turbulence sur la flamme sont globalement similaires au cas des flammes prémélangées par le biais d'une augmentation du plissement mais l'impact de l'écoulement via l'étirement peut être aussi important. Les principales approches de modélisation des flammes de diffusion turbulente reposent sur l'hypothèse de flammelettes qui permet de découpler l'effet de la turbulence de la structure locale de la flamme. Les méthodes tabulées et celles basées sur la surface de flamme sont les plus utilisées. L'approche de "flamme épaissie" développée pour les flammes prémélangées n'est quant à elle pas directement applicable pour les flammes de diffusion. Néanmoins, il serait intéressant d'adapter la méthode de flamme épaissie, qui présente de nombreux avantages, pour les flammes de diffusion turbulentes. Par conséquent, dans la suite, une approche compatible avec la méthodologie TFLES décrite en Section 2.8.3 pour les flammes de prémélange est investiguée et proposée.

Développement d'une approche TFLES en diffusion

Sommaire

7.1	Objectif du modèle	166
7.2	Effet d'un maillage sous-résolu sur la structure de flamme	167
7.3	Effet de la turbulence sur l'étirement	175
7.4	Effet de la turbulence sur le plissement	175
7.5	Récapitulatif de la méthodologie	176
7.6	Détermination d'un senseur de flamme	176
7.7	Application à une flamme de diffusion dans une Turbulence Homogène Iso-	
	trope (THI)	178
7.7.1	<i>Présentation de la configuration</i>	178
7.7.2	<i>Paramètres numériques</i>	179
7.7.3	<i>Méthode de forçage</i>	180
7.7.4	<i>Résultats sans modèle de combustion turbulente</i>	182
7.7.5	<i>Résultats avec modèle de combustion turbulente</i>	184
7.7.6	<i>Conclusion</i>	186
7.8	Application à la flamme Sandia D	188
7.8.1	<i>Présentation de la configuration et du point de fonctionnement</i>	188
7.8.2	<i>Méthodologies et maillages</i>	189
7.8.3	<i>Résultats</i>	190
7.8.4	<i>Effet du plissement, du maillage et de l'étirement</i>	190
7.8.5	<i>Application du modèle de combustion</i>	192
7.9	Conclusion	194

Différentes approches de modélisation pour les flammes de diffusion turbulentes ont été présentées dans le Chapitre 6. La méthodologie TFLES, présentée en Section 2.8.3, repose sur des propriétés intrinsèques aux flammes prémélangées et son utilisation n'est par conséquent pas justifiée pour les flammes non-prémélangées. Or, nous avons vu aux Chapitres 4 et 5 que les flammes diphasiques peuvent avoir localement des structures de type prémélange ou diffusion et il est nécessaire de disposer d'une approche capable de

décrire ces deux régimes de combustion. Dans ce chapitre, on tente de définir un modèle a priori dans le même esprit que l'approche TFLES afin de traiter toutes les flammes de façon similaire. De manière analogue à la flamme de prémélange où le but est de modéliser la vitesse de flamme turbulente, on cherche à reproduire le taux de dégagement de chaleur total de la flamme de diffusion. En effet, cette quantité contrôle la longueur et la localisation de la flamme turbulente.

Pour ce faire, il est nécessaire de comprendre les mécanismes qui déterminent ce dégagement de chaleur total dans le contexte LES. Dans cette optique, le chapitre s'articule de la façon suivante. Dans un premier temps, l'effet du maillage sur la structure des flammes de diffusion laminares est évaluée. Une attention particulière est portée sur l'effet de la sous-résolution du maillage sur le taux de dégagement de chaleur total. L'effet du plissement de sous-maille est étudié dans un second temps dans le cas d'une configuration turbulente 3D de turbulence homogène isotrope. A partir de ces observations, une méthodologie de modélisation des flammes de diffusions turbulentes sur des maillages de type LES est proposée et appliquée dans le cas d'une turbulence homogène isotrope (THI) et d'une flamme jet turbulente.

7.1 Objectif du modèle

D'après la relation 6.22, l'épaisseur de la flamme de diffusion est proportionnelle à l'inverse du gradient de fraction de mélange, lui-même proportionnel à la racine carrée du gradient de vitesse. Cela signifie que dans le cas d'une simulation LES, cette épaisseur dépendra de la valeur du gradient de vitesse résolu sur le maillage. La flamme simulée s'adapte ainsi à l'écoulement résolu, ce qui constitue une différence importante avec les flammes prémélangées qui ont une épaisseur propre. Pour cette raison, il n'est pas nécessaire d'épaissir artificiellement la flamme de diffusion pour des questions de stabilité numérique. Néanmoins, si le calcul de la flamme est numériquement possible, le taux de dégagement de chaleur n'est quant à lui pas forcément estimé de façon correcte. L'objectif du modèle est donc de récupérer le taux de dégagement de chaleur exact, par exemple qu'on trouverait à partir d'une résolution DNS de la flamme. A partir des observations théoriques de la Section 6.2, il semble que la différence entre le taux de dégagement de chaleur obtenu en LES et pour une DNS vienne d'une part, de la dissipation scalaire résolue qui diffère de la dissipation scalaire exacte et d'autre part, du défaut de plissement associé à la modification du nombre de Damköhler de la flamme résolue, induit par le maillage LES plus grossier.

7.2 Effet d'un maillage sous-résolu sur la structure de flamme

Pour étudier le seul effet d'un maillage sous-résolu sur l'épaisseur de flamme, en gardant l'étirement constant, on reprend la configuration de flamme à contre-courant. En effet, dans ce cas, le gradient de vitesse est constant et donc insensible au maillage. On reprend les flammes méthane-air du Chapitre 6, avec un étirement constant $\Lambda = 100 \text{ s}^{-1}$. La cinétique utilisée est la chimie réduite à deux étapes BFER* présentée en Section 6.3.

Le solveur utilisé par la suite est CANTERA mais les résultats sont valables pour AVBP. En effet, une comparaison entre une flamme à contre-courant simulée dans les mêmes conditions avec CANTERA et AVBP a été réalisée. La configuration pour AVBP est illustrée en Fig. 7.1 par un schéma avec toutes les conditions limites ainsi que des champs montrant la topologie de l'écoulement dans la zone d'intérêt. Les profils de vitesse, température, espèces et fraction de mélange obtenus avec CANTERA et AVBP sont représentés en Fig. 7.2. Ceux-ci sont en parfait accord et sont cohérents avec la structure classique d'une flamme de diffusion laminaire (Fig. 6.4) et valident le fait de poursuivre l'étude avec CANTERA dans la suite.

Plusieurs maillages réguliers sont considérés et listés dans le Tableau 7.1. La résolution des maillages M1000 et M500 étant suffisants, ils donnent exactement les mêmes résultats et le maillage considéré comme référence par la suite est le maillage M500 qui comporte 100 points dans l'épaisseur de flamme. Les profils de vitesse, fraction de mélange et dégagement de chaleur dans l'espace physique pour les différents maillages sont illustrés en Fig. 7.3, 7.4 et 7.5. Comme prévu, les profils de vitesse sont similaires pour tous les maillages, excepté au passage de la flamme pour le maillage le plus grossier (M10) pour lequel la flamme est très modifiée. Le profil de fraction de mélange montre que l'épaisseur thermique de la flamme augmente avec la taille de maille. C'est d'autant plus visible sur la Fig. 7.6 qui montre les profils de gradient de fraction de mélange dans l'espace de z . Le maillage agit donc ainsi comme un filtre numérique qui augmente la diffusion. L'impact sur les profils de dégagement de chaleur est très net, avec une zone de réaction qui s'étend et un maximum qui diminue avec la taille de maille. A noter que c'est là un comportement différent du comportement naturel de la flamme : en effet, on observe en principe que lorsque l'épaisseur thermique δ_{th} augmente, l'épaisseur de réaction δ_r diminue et tend vers une fonction de Dirac. Ceci est dû au fait que l'augmentation de l'épaisseur thermique est liée en théorie à la diminution de l'étirement et par conséquent à l'augmentation du nombre de Damköhler (Eqs. 6.25 et 6.26). Ici, l'étirement Λ n'a pas changé et l'augmentation de l'épaisseur thermique est due à l'effet du maillage.

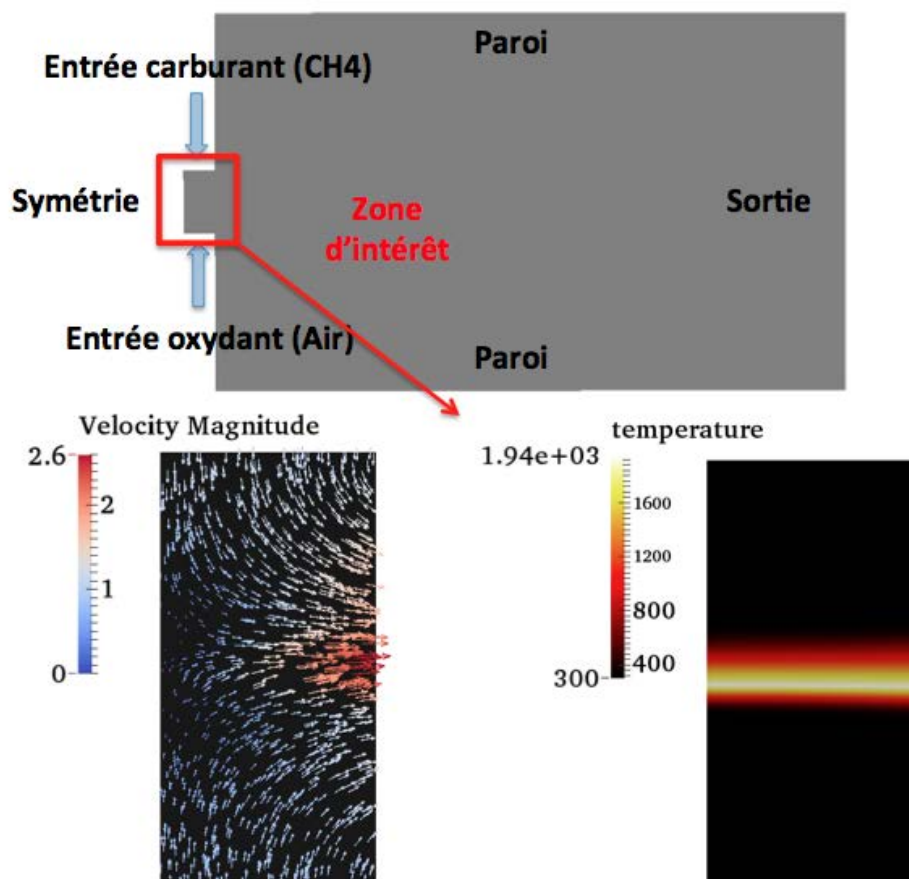


Figure 7.1 – Haut : Configuration de flamme à contre-courant en 2D avec AVBP. Bas : Champ de température et vecteurs vitesses dans la zone d'intérêt.

Nom	Nombre total de points	Taille de maille correspondante [m]	Nombre de points dans l'épaisseur de flamme
M1000	1000	2×10^{-5}	200
M500	500	4×10^{-5}	100
M100	100	2×10^{-4}	20
M50	50	4×10^{-4}	10
M30	30	6.7×10^{-4}	6
M10	10	2×10^{-3}	3

Tableau 7.1 – Liste des maillages utilisés pour évaluer leur influence sur la structure de flamme.

La figure 7.7 montre le taux de dégagement de chaleur total en fonction de la taille de maille, chacun des points représentant un des maillages testés. On peut voir que celui-ci

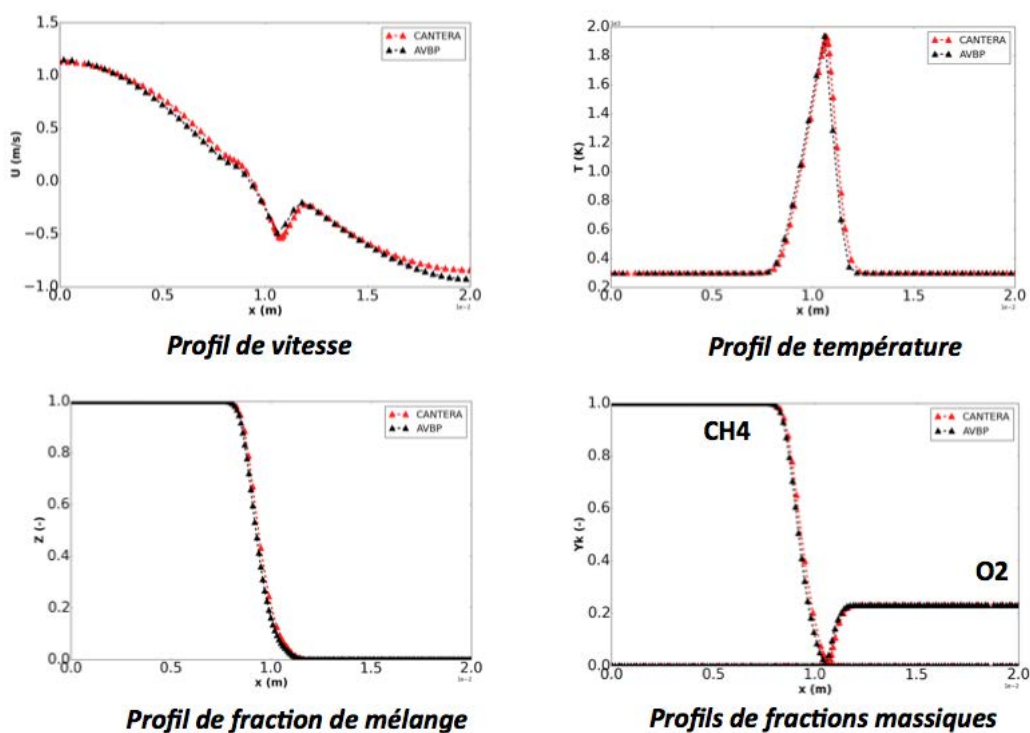


Figure 7.2 – Comparaison de CANTERA et AVBP sur un cas de flamme à contre-courant ($\Lambda = 100 \text{ s}^{-1}$).

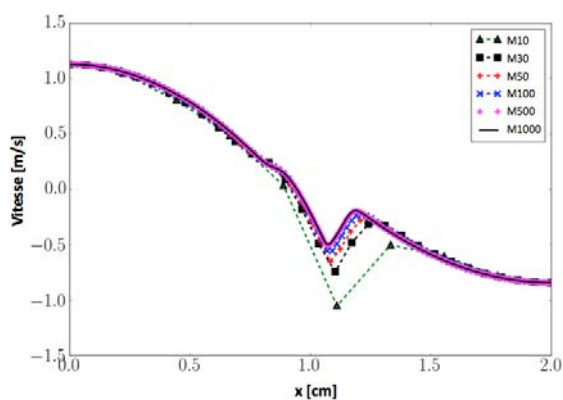


Figure 7.3 – Comparaison des profils de vitesse pour les différents maillages pour un étirement global $\Lambda = 100 \text{ s}^{-1}$.

augmente avec la résolution du maillage. A partir de l'Eq. 7.1 reliant le dégagement de chaleur à la diffusivité et l'étirement :

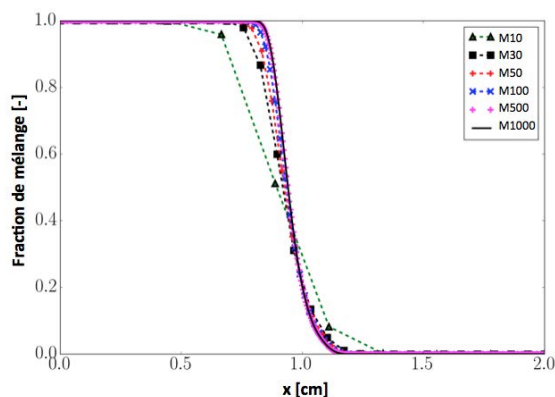


Figure 7.4 – Comparaison des profils de fraction de mélange pour les différents maillages pour un étirement global $\Lambda = 100 \text{ s}^{-1}$.

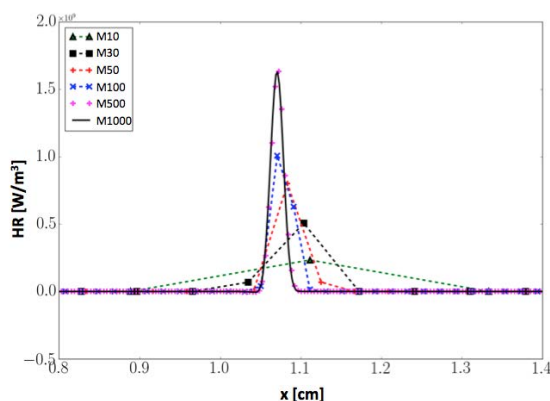


Figure 7.5 – Comparaison des profils de dégagement de chaleur pour les différents maillages pour un étirement global $\Lambda = 100 \text{ s}^{-1}$.

$$\dot{\Omega} = \sqrt{\frac{\Lambda D}{2\pi}} \quad (7.1)$$

Pour un étirement Λ fixé, l'épaisseur et le dégagement de chaleur total varient avec la diffusivité D . La sous-résolution du maillage semble donc agir comme une diffusivité numérique supplémentaire D_{num} . Ainsi, en appliquant une diffusivité équivalente $D^* = D + D_{num}$ sur le maillage de référence, il devrait être possible de retrouver le dégagement de chaleur total des maillages grossiers. La diffusivité équivalente D^* est calculée à partir du rapport des dégagements de chaleur totaux issus des simulations sur le maillage de référence et le maillage grossier.

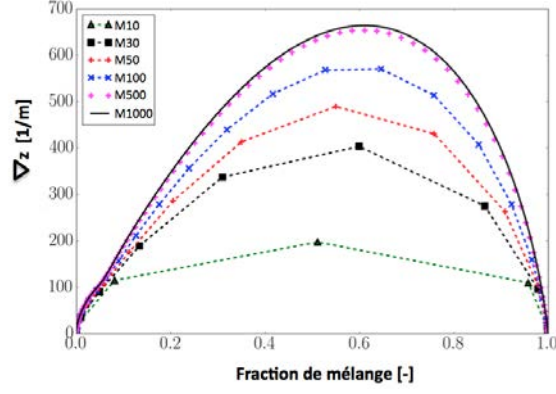


Figure 7.6 – Comparaison des profils de gradient de fraction de mélange dans l'espace de fraction de mélange pour les différents maillages, pour un étirement global $\Lambda = 100 \text{ s}^{-1}$.

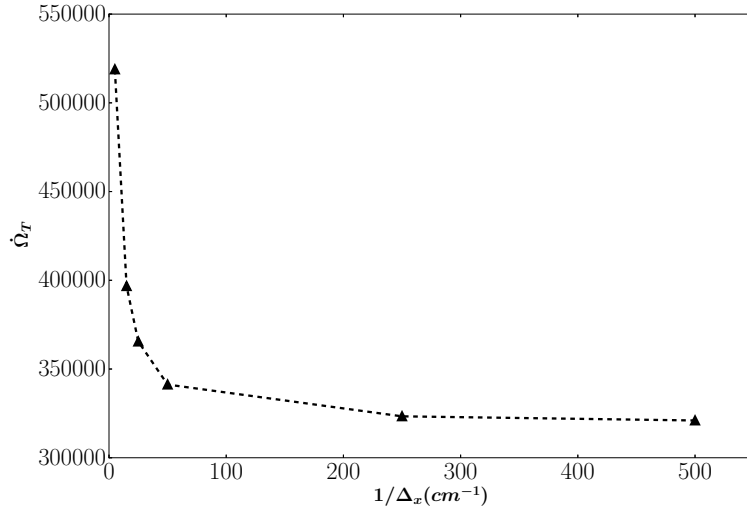


Figure 7.7 – Dégagement de chaleur total en fonction de l'inverse de la taille de maille $1/\Delta_x$.

$$\frac{\dot{\Omega}_{T,M500}}{\dot{\Omega}_{T,M^*}} = \frac{\dot{\Omega}_{T,ref}}{\dot{\Omega}_{T,obs}} = \sqrt{\frac{D}{D^*}} \Rightarrow D^* = D \underbrace{\left(\frac{\dot{\Omega}_{T,ref}}{\dot{\Omega}_{T,obs}} \right)^2}_F \quad (7.2)$$

où $\dot{\Omega}_{T,ref}$ et $\dot{\Omega}_{T,obs}$ désignent respectivement le dégagement de chaleur obtenu avec le maillage de référence et le dégagement de chaleur obtenu avec un maillage plus grossier. Les valeurs obtenues pour le rapport $D^*/D = F$ sont répertoriées dans le Tableau 7.2.

Nom	$\dot{\Omega}_T$	F
M500 (ref)	323338	1
M100	341117	1.113
M50	364383	1.27
M30	396666	1.505
M10	518854	2.575

Tableau 7.2 – Valeurs obtenues pour $F = D^*/D$ à partir de $\dot{\Omega}_T$.

Les résultats obtenus en calculant la flamme avec D^* sur le maillage M500 sont visibles en Fig. 7.8. On observe bien qu'une modification de la diffusivité permet de retrouver les comportements observés sur des maillages grossiers. De façon similaire, en appliquant $1/F$ à la diffusivité sur les maillages sous-résolus, on retrouve le dégagement de chaleur du cas de référence (Fig. 7.9).

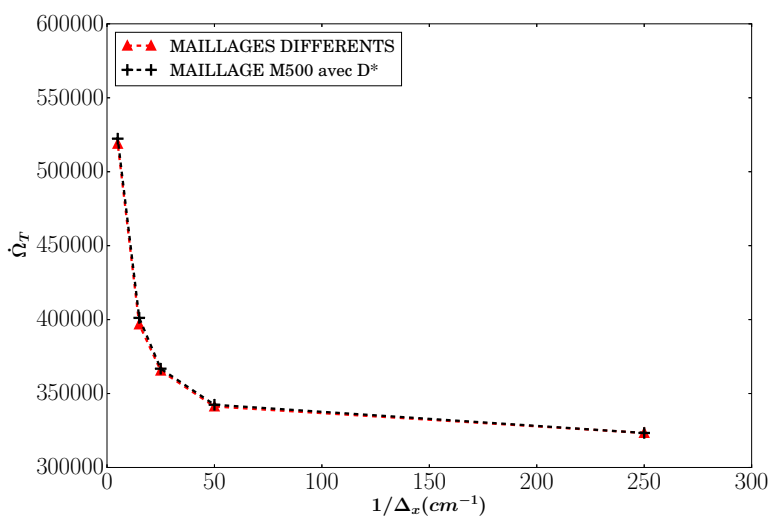


Figure 7.8 – Comparaison du dégagement de chaleur total obtenu pour chaque maillage M^* (courbe rouge) et pour le maillage de référence M500 avec chaque valeur $D^* = FD$ associée à M^* (courbe noire).

L'étape suivante consiste donc à trouver un moyen d'évaluer cette diffusivité équivalente à partir de quantités accessibles par le calcul, comme l'épaisseur thermique δ_{th} :

$$\delta_{th} = \sqrt{\frac{\pi D}{2\Lambda}} \quad (7.3)$$

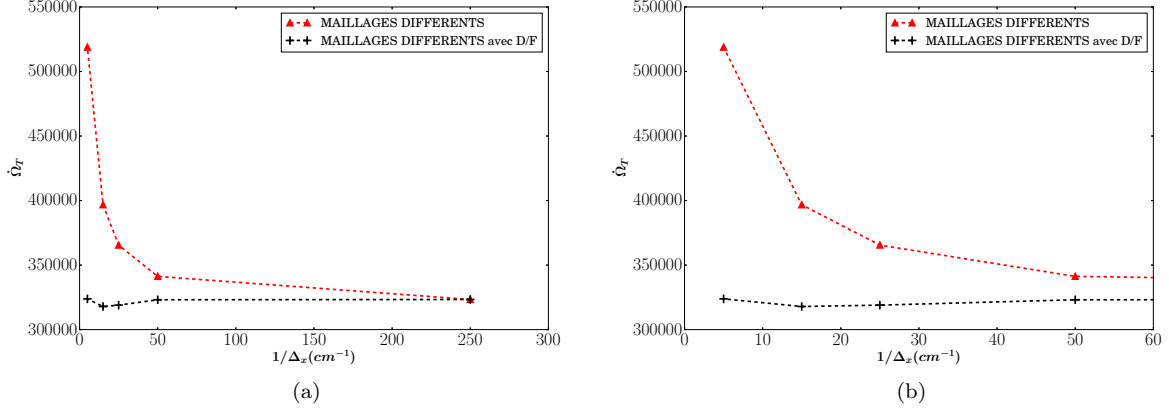


Figure 7.9 – (a) Comparaison du dégagement de chaleur total en fonction de l'inverse de taille de maille $1/\Delta_x$, obtenu pour chaque maillage M^* avec D (courbe rouge) et avec D/F (courbe noire); (b) Zoom sur l'intervalle $[0;60]$.

En mesurant l'épaisseur thermique sur chacun des cas à partir de la relation Eq. 6.22, il est possible de déterminer la diffusivité équivalente D^* correspondante :

$$\frac{\delta_{th,M500}}{\delta_{th,M^*}} = \sqrt{\frac{D}{D^*}} \Rightarrow D^* = D \underbrace{\left(\frac{\delta_{th,M^*}}{\delta_{th,M500}} \right)^2}_F \quad (7.4)$$

où $\delta_{th,M500}$ et δ_{th,M^*} désignent l'épaisseur thermique obtenue respectivement avec le maillage de référence et un maillage plus grossier. Les valeurs obtenues pour le rapport $D^*/D = F$ pour chacun des maillages sont répertoriées dans le Tableau 7.3.

Nom	δ_{th} (mm)	F
M500 (ref)	8.9	1
M100	9.34	1.1
M50	9.7	1.2
M30	10.4	1.36
M10	12	1.82

Tableau 7.3 – Valeurs obtenues à partir de δ_{th} pour $F = D^*/D$.

Les valeurs de F sont légèrement inférieures à celles du Tab. 7.2, avec une différence qui augmente quand la résolution diminue, notamment pour les maillages M30 et M10. Les dégagements de chaleur totaux obtenus en appliquant cette diffusivité équivalente sont montrés en Fig. 7.10. Malgré les différences sur F , les résultats restent proches de la Fig. 7.8. De même, le test inverse avec $1/F$ donne des résultats qui restent satisfaisants (Fig. 7.11).

Par la suite, ce facteur F correspondant à la prise en compte de la sous-résolution du maillage est noté F_{num} .

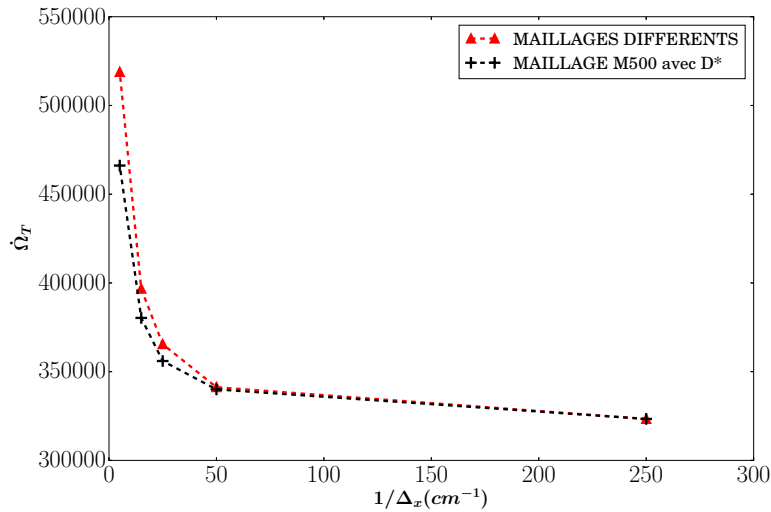


Figure 7.10 – Comparaison du dégagement de chaleur total obtenu pour chaque maillage M^* (courbe rouge) et pour le maillage de référence $M500$ avec chaque valeur $D^* = FD$ associée à M^* (courbe noire), F évalué à partir de l'épaisseur thermique δ_{th} .

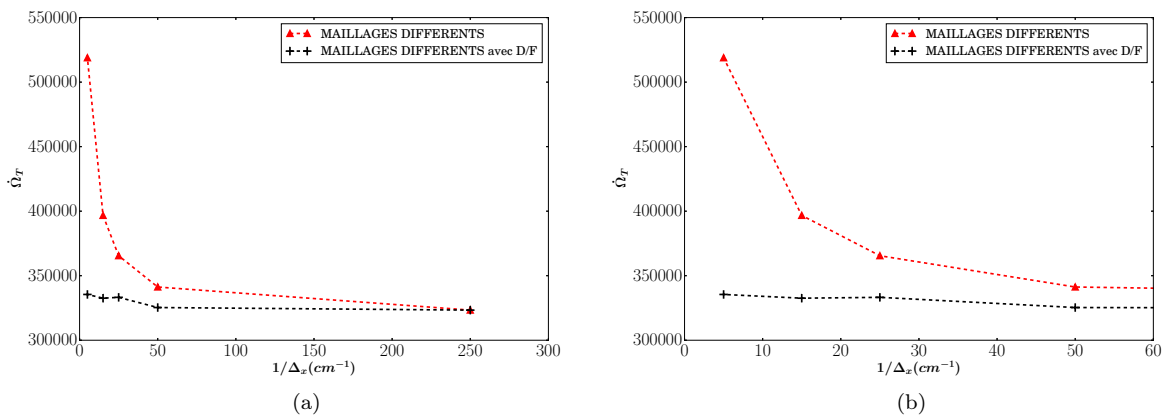


Figure 7.11 – (a) Comparaison du dégagement de chaleur total en fonction de l'inverse de taille de maille $1/\Delta_x$, obtenu pour chaque maillage M^* avec D (courbe rouge) et avec D/F (courbe noire), F évalué à partir de l'épaisseur thermique δ_{th} ; (b) Zoom sur l'intervalle $[0;60]$.

7.3 Effet de la turbulence sur l'étirement

Lorsque l'écoulement est turbulent, le front de flamme de diffusion est soumis à des variations intenses de l'étirement, qui modifient fortement sa structure. Les petites structures turbulentes, non résolues en LES, ont donc une influence variable sur la flamme de diffusion étirée. Dans le cas d'une flamme à contre-courant, l'étirement résolu Λ_{res} s'écrit donc :

$$\Lambda_{res} = \pi \chi_{res,st} \exp[2(\text{erf}^{-1}(1 - 2z_{st}))^2] \quad (7.5)$$

Celui-ci est inférieur à l'étirement de sous-maille Λ_{sgs} qui est maximal à l'échelle de Kolmogorov et conduit donc à sous-estimer le dégagement de chaleur total. Or si on se reporte à l'expression du dégagement de chaleur total (Eq. 6.30), la seule façon de prendre en compte l'effet de l'étirement de sous-maille sur cette quantité est de modifier la diffusivité D en la multipliant par un facteur $F_\Lambda = \Lambda_{sgs}/\Lambda_{res} > 1$.

$$D_\Lambda^* = \underbrace{\frac{\Lambda_{sgs}}{\Lambda_{res}}}_{F_\Lambda > 1} D \quad (7.6)$$

On voit ici une différence majeure avec le modèle TFLES en prémélange : dans le cas des flammes de diffusion à grand nombre de Damköhler, il est inutile (car inefficace) d'appliquer F au taux de réaction et on ne peut modéliser les effets de sous-maille qu'au travers de la diffusivité.

7.4 Effet de la turbulence sur le plissement

Comme pour les flammes prémélangées, la turbulence a pour effet d'augmenter le plissement de la flamme de diffusion. Celui-ci peut être décomposé en un plissement résolu Π_{res} et un plissement non résolu, dit de sous-maille Π_{sgs} . Le dégagement de chaleur total de la flamme étant directement proportionnel au plissement résolu qui est inférieur au plissement total, celui-ci est sous-estimé et il faut alors, comme pour l'étirement de sous-maille, multiplier la diffusivité D par un facteur $F_\Pi = \Pi_{tot}/\Pi_{res} > 1$ pour corriger le dégagement de chaleur total.

$$D_\Pi^* = \underbrace{\frac{\Pi_{tot}}{\Pi_{res}}}_{F_\Pi > 1} D \quad (7.7)$$

7.5 Récapitulatif de la méthodologie

Au terme de cette étude, on a vu que tous les effets de sous-résolution, d'étirement et de plissement peuvent être corrigés au travers de la diffusivité D :

$$D^* = \underbrace{F_{num} F_{\Pi} F_{\Lambda}}_{F_{tot}} D \quad (7.8)$$

où $F_{num} < 1$, $F_{\Lambda} > 1$ et $F_{\Pi} > 1$. En fonction de l'importance des différents effets et contrairement au modèle TFLES pour les flammes de prémélange pour lequel F est forcément supérieur à 1, le facteur F_{tot} peut prendre des valeurs supérieures ou inférieures à 1.

La détermination des coefficients d'épaississement à partir d'un calcul LES reste une question à traiter. Elle pourra notamment se baser sur une estimation de la turbulence de sous-maille à partir de la turbulence résolue filtrée. Cette question ne sera pas traitée dans ce chapitre par manque de temps, et dans la suite, les coefficients d'épaississement sont toujours déterminés à partir de calculs DNS.

7.6 Détermination d'un senseur de flamme

Dans le cas d'une flamme turbulente, et comme en prémélange, modifier D dans tout le domaine modifie le mélange des réactifs et produits, voire inter-espèces, en dehors de la zone de réaction et doit être évité. Pour cela, comme pour les flammes prémélangées, on applique la modification de D localement, uniquement dans la zone de réaction, grâce à un senseur. De plus, si le coefficient d'épaississement global est plus grand que 1, le modèle résulte en un épaississement supplémentaire de la flamme, et donc une perte supplémentaire de plissement. Afin de limiter cet effet pour garder un modèle efficace, le senseur de flamme doit être calibré de manière précise pour permettre de modifier le dégagement de chaleur total sans diminuer le plissement. A noter également que comme en prémélange, la diffusivité turbulente D_t introduite par le modèle de sous-maille est désactivée dans la région de la flamme :

$$D = D_{lam} + (1 - \theta)D_t \quad (7.9)$$

où θ désigne le senseur de flamme ayant pour valeur 1 dans la flamme et 0 en dehors.

Pour les flammes de diffusion qui brûlent toujours à la stoechiométrie, il semble naturel de baser le senseur sur la fraction de mélange stoechiométrique z_{st} . Dans un premier temps, celui-ci est défini comme :

$$\theta = \min(A \times \exp(-B \times (z - z_{st})^2), 1) \quad (7.10)$$

où A et B sont des constantes qui contrôlent la raideur et la largeur du senseur. Ici, elles sont fixées arbitrairement à 4 et 2000 respectivement de façon à garder le senseur proche de la zone de réaction. La forme du senseur obtenu est visible sur la Fig. 7.12. Il suffit ensuite simplement de multiplier F par θ . Afin de vérifier que le senseur permet de modifier le dégagement de chaleur total sans épaissir la flamme, la flamme à contre-courant à l'étirement $\Lambda = 100 \text{ s}^{-1}$ est calculée avec un épaississement constant et un épaississement local. La figure 7.13 montre l'évolution du taux de dégagement de chaleur total avec F , tandis que la Fig. 7.14 montre l'impact sur le profil de gradient de fraction de mélange du modèle local. Comme attendu le taux de dégagement de chaleur augmente, mais de façon moins importante avec le modèle local qu'avec l'épaississement constant. Cependant, le modèle local modifie peu l'épaisseur de flamme, comme le montre la Fig. 7.14, et donc permettra une augmentation effective du dégagement de chaleur total. Pour obtenir la bonne valeur de dégagement de chaleur total, il faudra donc appliquer un F localement et supérieur à la valeur correspondant au plissement de sous-maille.

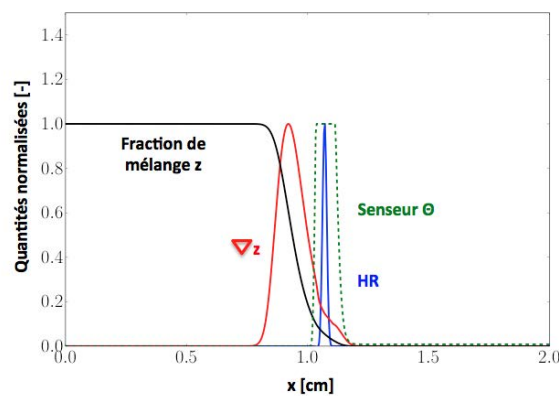


Figure 7.12 – Profil du senseur θ basé sur la fraction de mélange. Cas M500.

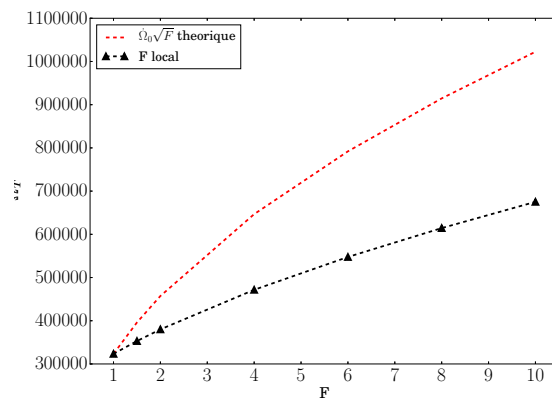


Figure 7.13 – Evolution du taux de dégagement de chaleur en fonction de F appliqué localement. Comparaison avec la courbe théorique.

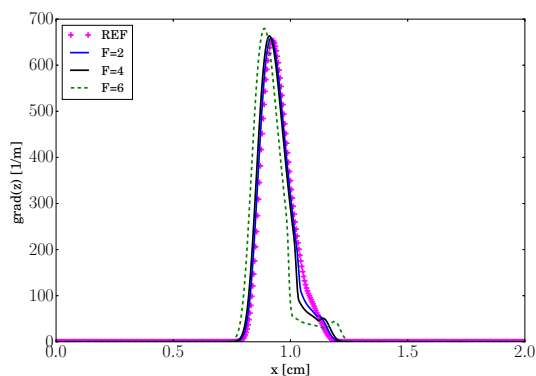


Figure 7.14 – Influence d'une application locale de F localisée sur l'épaisseur de la flamme.

7.7 Application à une flamme de diffusion dans une Turbulence Homogène Isotrope (THI)

Afin de tester l'approche proposée, une configuration turbulente académique est étudiée. Le cas consiste en une flamme de diffusion placée dans une turbulence homogène isotrope forcée .

7.7.1 Présentation de la configuration

Le domaine de calcul est présenté en Fig. 7.15. Celui-ci est cubique de longueur $L = 4$ cm. La moitié du domaine est remplie avec de l'air et l'autre avec du méthane pur. Toutes les

faces sont dotées de conditions limites périodiques, excepté les deux faces supérieures et inférieures (Fig. 7.15) où l'écoulement est libre d'entrer et de sortir. Trois maillages de résolution différente sont utilisés pour cette étude et sont listés dans le Tableau 7.4. Ceux-ci sont tous réguliers avec des mailles de type hexaédrique. Une illustration l'écoulement pour le cas 256^3 est présentée en Fig. 7.16.

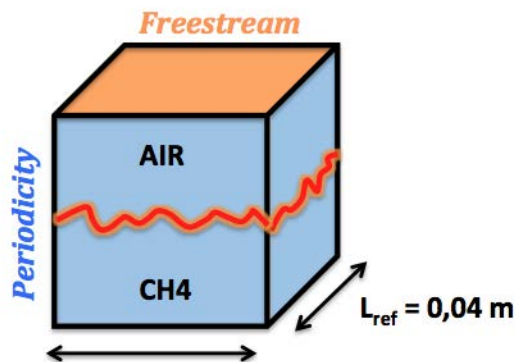


Figure 7.15 – Schéma de la configuration THI.

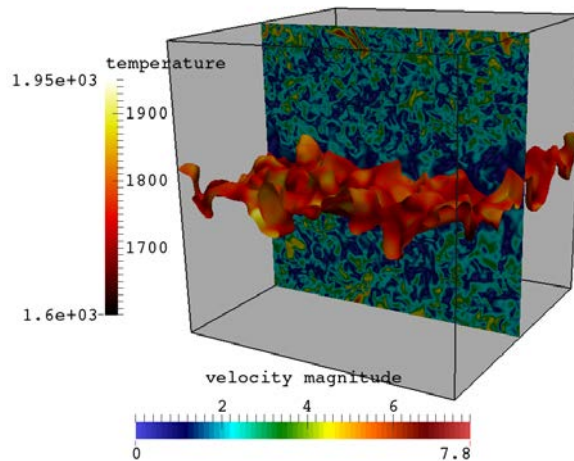


Figure 7.16 – Illustration de l'écoulement sur $M0$.

7.7.2 Paramètres numériques

Les principaux paramètres numériques sont répertoriés dans le Tableau 7.5.

	M0	M1	M2
Nombre de noeuds	512 ³	256 ³	128 ³
Δ_x	78 μm	156 μm	312 μm

Tableau 7.4 – Liste des maillages utilisés.

Paramètres numériques	
Schéma convectif	TTGC : $\mathcal{O}(3)$ en espace et en temps [41]
Schéma diffusif	Opérateur 2Δ
Modèle de sous-maille	WALE [54]
Viscosité artificielle	Modèle de Colin : $\epsilon^{(2)} = 0.01$, $\epsilon^{(4)} = 0.005$

Tableau 7.5 – Paramètres numériques pour AVBP.

A l'initialisation, une flamme de diffusion d'étirement $\Lambda = 50 \text{ s}^{-1}$ calculée avec CANTERA est interpolée sur le domaine de la THI.

7.7.3 Méthode de forçage

Afin d'obtenir une flamme suffisamment plissée, la turbulence est forcée avec la méthodologie décrite par Paoli et Shariff [135]. Celle-ci est basée sur l'ajout d'un terme source stochastique $S_q = \rho \vec{f}$ dans les équations de moment. Le terme source correspondant dans l'équation d'énergie cinétique s'écrit ainsi $S_e = \rho \vec{f} \vec{u}$ avec \vec{f} le terme de forçage. Ce terme source stochastique a pour but d'introduire de l'énergie via les grandes échelles du domaine. Un spectre d'énergie turbulente peut alors s'établir, les tourbillons de grande échelle transférant leur énergie aux échelles plus petites qui sont finalement dissipées par viscosité. Lorsque le taux d'énergie introduit par forçage est égal au taux de dissipation, un état statistiquement stationnaire est atteint. Afin d'éviter l'échauffement dû à la dissipation d'énergie cinétique turbulente, un terme source $S_e^* = \rho \vec{f} \vec{u} - \langle \rho \vec{f} \vec{u} \rangle$ est également introduit pour l'énergie, où $\langle \rangle$ désigne la moyenne sur le domaine entier. Ainsi, le terme source moyen dans l'équation de l'énergie reste nul. L'énergie cinétique augmente donc par l'effet du forçage tandis que l'énergie totale est conservée.

Cette idée a été initialement proposée par Eswaran et Pope [58] et consiste à exprimer le forçage par un développement en série de Fourier :

$$f_i(x, t) = \sum_{k \leq k_f} e^{ik \cdot x} \hat{f}_i(k, t), \quad (7.11)$$

où les coefficients sont obtenus par des procédés d'Uhlenbeck-Ornstein. Dans l'Eq. 7.11, le terme de gauche correspond au terme de forçage introduit dans les équations de Navier-

Stokes comme terme source. Dans la partie droite de l'équation, k_f représente le plus petit nombre d'onde forcé. La dissipation d'énergie cinétique turbulente ε à l'équilibre peut être estimée de la façon suivante :

$$\varepsilon = \frac{4/(k_0^2\varepsilon)^{1/3}\tau_f\sigma_f^2N_f}{(1/(k_0^2\varepsilon)^{1/3}) + \tau_f} \quad (7.12)$$

avec :

- $k_0 = 2\pi/L_b$, le nombre d'onde fondamental avec L_b la longueur caractéristique du domaine.
- τ_f , un temps caractéristique de la procédure de forçage qui contrôle la durée pour atteindre un état statistiquement stationnaire.
- σ_f , une accélération caractéristique de la procédure de forçage. $\sigma_f^2\tau_f$ détermine la vitesse à laquelle l'énergie est ajoutée et donc les taux de dissipation et niveau d'énergie cinétique finaux.
- N_f correspond au nombre de modes forcés.

Le Tableau 7.6 contient les données d'entrée retenues pour le cas étudié. Le taux de dissipation ε cible est donné par $\varepsilon = \nu^3/\eta_k^4$ avec η_k l'échelle de Kolmogorov.

	τ_f [s]	σ_f [m ² /s]	N_f [-]
	1×10^{-4}	50	730

Tableau 7.6 – Paramètres de forçage utilisés.

La méthode est décrite de façon détaillée dans [58] et ne fait pas l'objet de cette étude. Elle a été testée en premier lieu dans le cas d'un écoulement non réactif dont le spectre de turbulence est montré en Fig. 7.17.

Les paramètres de la turbulence sont évalués a posteriori et sont répertoriés dans le Tableau 7.7.

Le (m)	u' (m/s)	Re_t	η_k (μ m)
0.004	5	280	60

Tableau 7.7 – Paramètres de la turbulence.

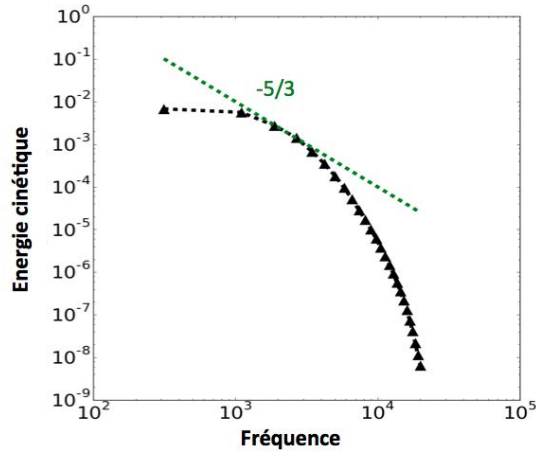


Figure 7.17 – Spectre d'énergie cinétique pour un cas non réactif (256^3).

7.7.4 Résultats sans modèle de combustion turbulente

L'évolution de la flamme est décrite dans un premier temps à travers des coupes de champ de température visibles en Fig. 7.18. Sur ces coupes, un isocontour de fraction de mélange à la stœchiométrie z_{st} est également tracé. La flamme, initialement plane, est déformée par les plus grosses structures turbulentes qui sont générées au fur et à mesure. La structure interne de la flamme ne semble pas être modifiée, ce qui est consistant avec l'hypothèse de flammelettes. Les scatterplots de température en fonction de la fraction de mélange présentés en Fig. 7.19 le confirment dans la mesure où la structure locale de la flamme correspond à celle d'une flamme laminaire.

La Fig. 7.20 montre l'évolution du dégagement de chaleur total au cours du temps. Comme il n'y a pas d'injection de carburant ni d'oxydant à travers les conditions limites, le dégagement de chaleur a tendance à diminuer au bout d'un certain temps en raison de la diminution en quantité des réactifs, c'est pourquoi celui-ci est pondéré par le flux de CH_4 vu par la flamme. La phase transitoire dure jusqu'à environ 15 ms. Durant cette phase transitoire, l'énergie cinétique continue d'augmenter et la turbulence se développe, résultant en une augmentation du plissement de la flamme. Après cette phase transitoire, le taux de dégagement de chaleur atteint un palier et reste plus ou moins constant. Ce dernier est plus élevé pour les maillages les plus fins. Ainsi, le rapport entre le dégagement de chaleur du maillage le plus fin et le maillage grossier est d'environ 1.5.

Afin de comprendre les différences observées dans le dégagement de chaleur, les effets de l'étirement, du maillage et du plissement sont évalués.

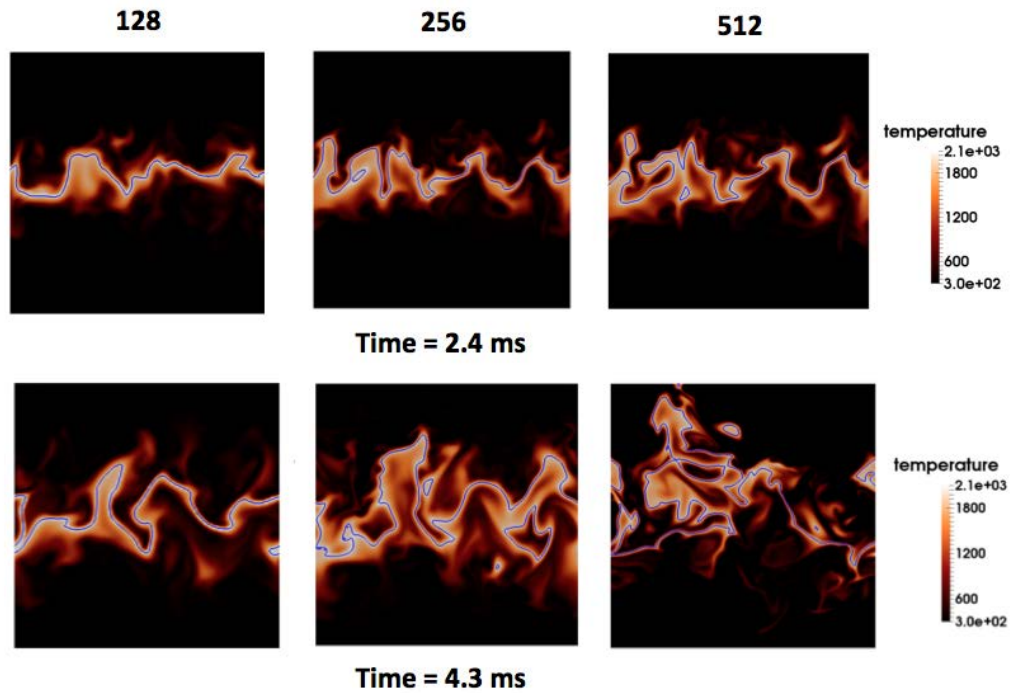


Figure 7.18 – Champs de température avec un isocontour de fraction de mélange z_{st} pour les cas $M0$, $M1$ et $M2$.

L'écart de résolution entre le maillage le plus fin et le plus grossier est d'un facteur 4. Au vu de l'étude 1D réalisée dans la Section 7.2, l'impact de la sous-résolution du maillage semble négligeable ici (surestimation de l'ordre de 4%).

L'étirement est également évalué pour chacun des maillages à travers des histogrammes tracés en Fig. 7.21 dans la région de la flamme. Ces derniers montrent que la gamme d'étirement majoritaire que voit la flamme est relativement similaire pour les trois cas, même si l'étirement est plus élevé localement dans le cas du maillage le plus fin mais avec une faible occurrence.

Enfin, la Fig. 7.22 décrit l'évolution de la surface de flamme au cours du temps pour les différents cas. La surface de flamme est calculée comme la surface de l'isosurface $z = z_{st}$. Cette estimation de la surface de flamme est justifiée dans la mesure on n'observe quasiment pas d'extinction. L'évolution de la surface de flamme est similaire à l'évolution du dégagement de chaleur. Celle-ci augmente dans un premier temps jusqu'à atteindre un palier à 6 ms. La surface de flamme est plus importante dans le cas du maillage fin. Ainsi, le rapport entre le dégagement de chaleur du maillage le plus fin et le maillage grossier est

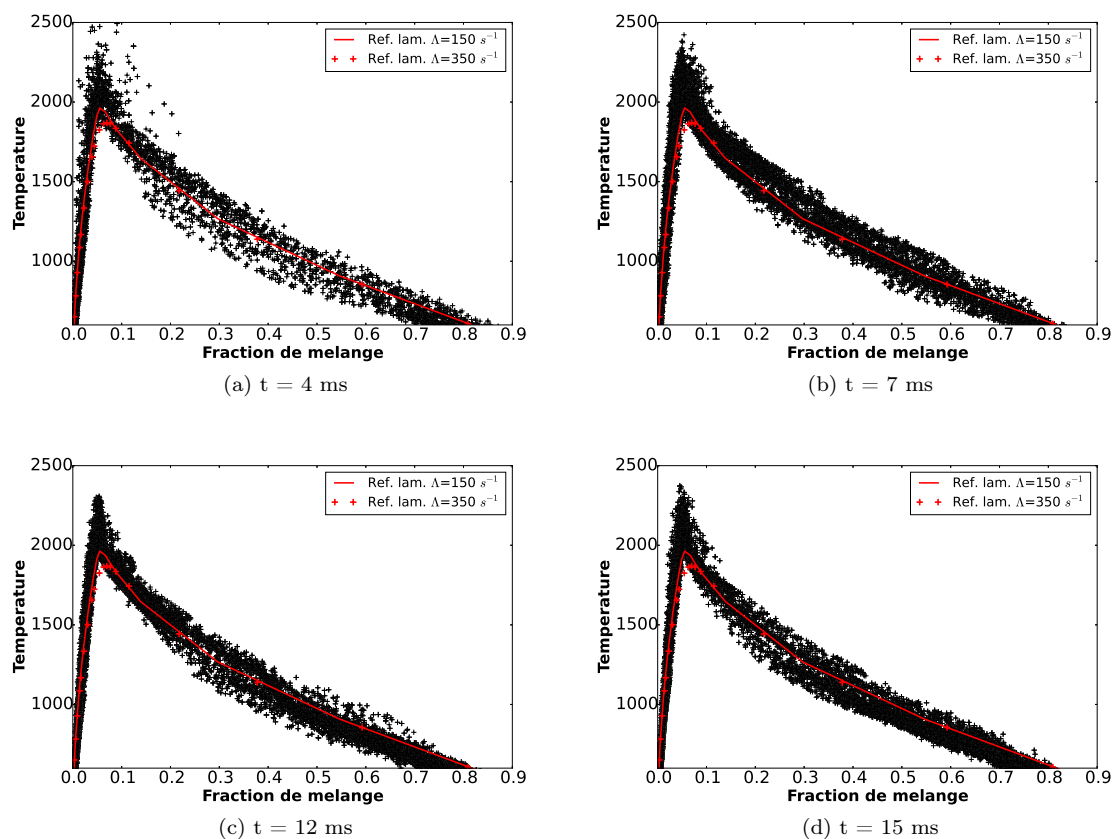


Figure 7.19 – Scatterplots de température en fonction de la fraction de mélange à différents instants pour M1 et M2. Pour comparaison, les flammes laminares à un étirement $\Lambda = 150 \text{ s}^{-1}$ et $\Lambda = 350 \text{ s}^{-1}$ sont également montrées.

d'environ 1.4.

Par conséquent, le plissement semble être ici le facteur influençant au premier ordre le dégagement de chaleur de la flamme. La Fig. 7.23 montre le dégagement de chaleur par unité de surface de flamme et confirme cette hypothèse dans la mesure où celui-ci est plus ou moins équivalent dans les trois cas. Les effets de l'étirement non résolu et de la sous-résolution du maillage sont quant à eux beaucoup moins importants.

7.7.5 Résultats avec modèle de combustion turbulente

A partir des résultats observés dans la section précédente, on se propose d'appliquer le modèle proposé en Section 7.5 sur le cas du maillage le plus grossier. Puisque le défaut de plissement représente la principale cause des différences observées dans les dégagements de

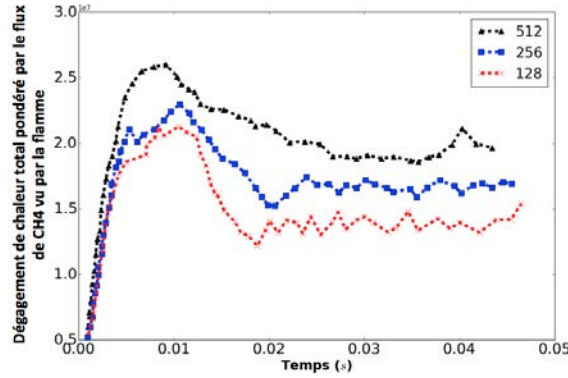


Figure 7.20 – Evolution du dégagement de chaleur total au cours du temps pour les 3 maillages M0, M1 et M2.

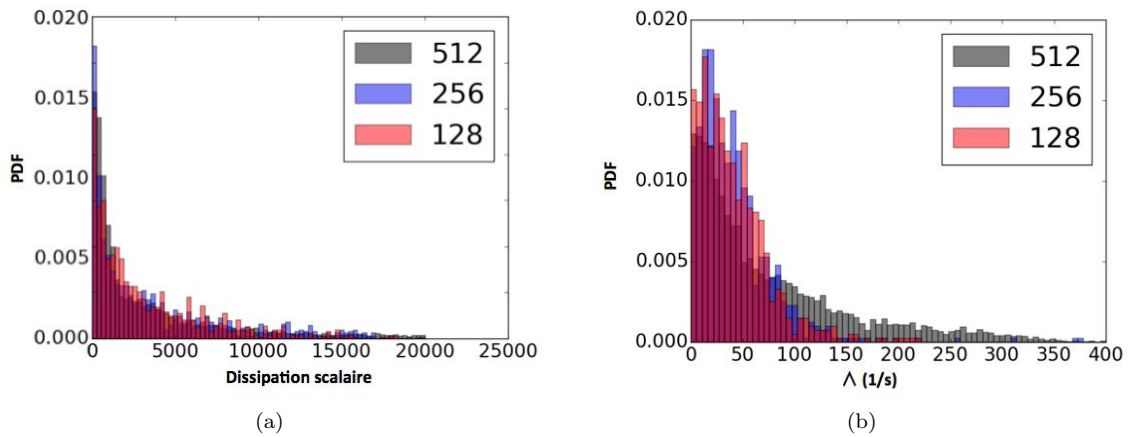


Figure 7.21 – Distribution de dissipation scalaire et d'étirement (Eq. 6.28) pour les trois cas.

chaleur totaux dans ce cas, on applique un facteur $F > 1$ à la diffusivité comme décrit en Section 7.6, où F est déterminé à partir du rapport des surfaces de flamme obtenues dans le cas de référence et le cas du maillage grossier. Celui-ci reste constant durant la simulation. En utilisant également le senseur θ déduit en Section 7.6 (avec $A = 4$ et $B = 5000$), on obtient les champs de température et de F correspondant (Fig. 7.24).

Les résultats obtenus avec l'application du modèle en terme de dégagement de chaleur total sont présentés sur la Fig. 7.25 pour $F = 1.5$. Lorsqu'on applique le modèle, le dégagement de chaleur total est augmenté et atteint une valeur de $2 \cdot 10^7 \text{ W/m}^3/\text{kg/s}$, proche de la valeur obtenue dans le cas de référence. Puis celui-ci diminue progressivement au cours du temps jusqu'à atteindre $1.5 \cdot 10^7 \text{ W/m}^3/\text{kg/s}$. En effet, bien que le senseur local ait été utilisé, la flamme a été un peu épaissie comme on peut le voir sur la Fig. 7.24. Comme

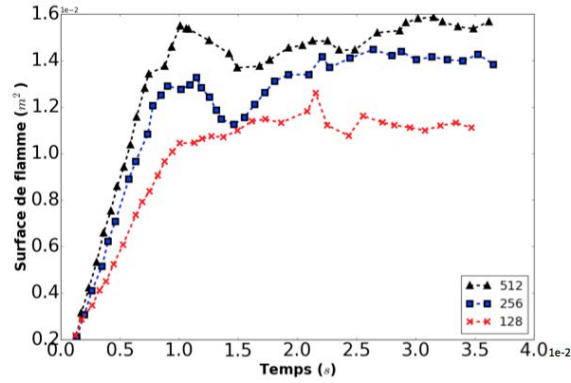


Figure 7.22 – Evolution de la surface de la flamme au cours du temps.

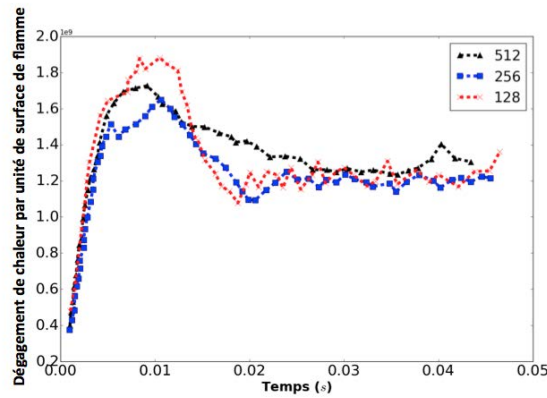


Figure 7.23 – Evolution du dégagement de chaleur par unité de surface de flamme.

expliqué précédemment (Section. 7.6), cela implique une diminution du plissement, visible sur la Fig. 7.26 qui reporte l'évolution de la surface de flamme légèrement inférieure avec le modèle par rapport au cas sans modèle. Comme déjà mentionné, il faudrait ici appliquer un seuil plus étroit avec une valeur de F plus grande que le rapport de surface de flamme pour éviter la perte de plissement.

7.7.6 Conclusion

Dans cette section, une flamme de diffusion placée dans une turbulence homogène isotrope a été étudiée. Cette configuration a permis d'appliquer la méthodologie décrite en Section 7.5. Les simulations préliminaires sur des maillages de résolution différente ont permis de constater que dans ce cas, le plissement constitue le principal facteur responsable de

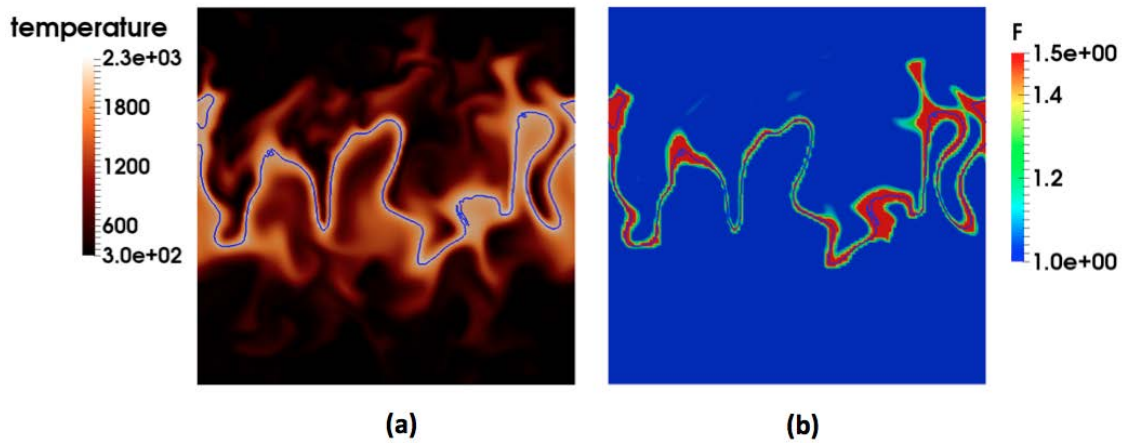


Figure 7.24 – Champs instantanés de (a) température et de (b) F avec une isoligne $z = z_{st}$ à $t = 31$ ms. Cas 128^3 avec modèle de combustion.

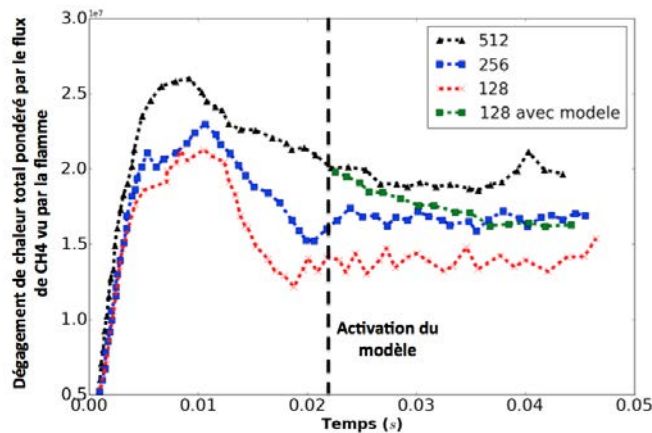


Figure 7.25 – Evolution du dégagement de chaleur total au cours du temps.

la sous-estimation du dégagement de chaleur total pour le cas du maillage le plus grossier. En appliquant le modèle, ce dernier est bien augmenté même s'il n'atteint pas la valeur de référence. Bien que le modèle est perfectible, notamment au niveau de l'estimation du facteur F , cela a permis de vérifier que la méthodologie proposée fournit des résultats cohérents avec les attentes théoriques du Chapitre 7.

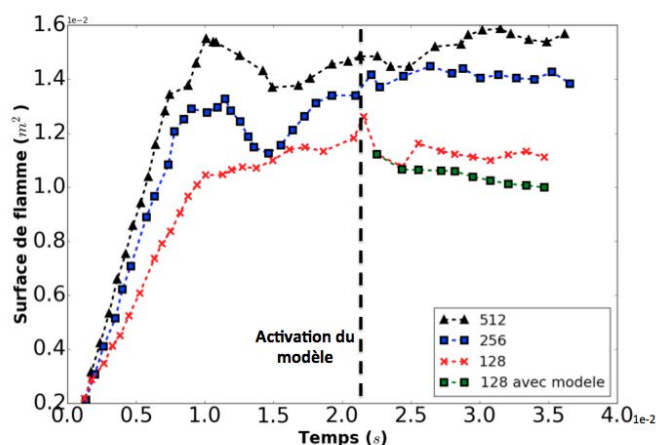


Figure 7.26 – Evolution de la surface de la flamme au cours du temps.

7.8 Application à la flamme Sandia D

Afin de tester le modèle sur une configuration plus réaliste on l'applique au cas de la flamme Sandia D. La flamme Sandia D a fait l'objet de nombreuses études LES et constitue un cas de référence pour l'étude des flammes non prémélangées turbulentes aussi bien expérimentalement [10] que numériquement [83, 117, 197, 210].

7.8.1 Présentation de la configuration et du point de fonctionnement

Le brûleur consiste en trois jets coaxiaux visibles en Fig. 7.27. Le jet central est injecté via un tube de diamètre $D = 7.2$ mm avec une vitesse débitante de 49.6 m/s. Il est composé d'un mélange riche méthane-air de richesse $\phi = 3.17$ dans des conditions ambiantes. La flamme est stabilisée grâce à un écoulement pilote autour du jet central, de vitesse débitante 11.4 m/s et consiste en un mélange de gaz brûlés à richesse $\phi = 0.77$. Finalement, un écoulement co-courant externe d'air aux conditions ambiantes est injecté à 0.9 m/s et enveloppe le jet pilote. Les valeurs pour la composition et la température des trois entrées utilisées dans les simulations suivantes sont résumées dans le Tableau 7.8. Un profil de vitesse turbulent théorique correspondant à un écoulement dans un canal turbulent de nombre de Reynolds $Re = 22400$ est imposé à l'entrée du tube principal. Des fluctuations turbulentes d'intensité $u' = 2$ m/s sont superposées au profil conformément aux expériences. La couche limite turbulente n'est pas résolue ($\Delta_x \sim 0.09$ mm) et une condition de mur glissant est appliquée à la paroi du tube d'injection.

	T K	Y_{CH_4}	Y_{O_2}	Y_{CO_2}	Y_{H_2O}	Y_{CO}	Y_{NO}	ϕ
Jet central	294	0.156	0.197	0	0	0	0	3.17
Jet pilote	1880	0	0.054	0.111	0.0942	4×10^{-3}	2×10^{-5}	0.77
Jet co-courant	291	0	0.230	0	0	0	0	0.0

Tableau 7.8 – Composition (fractions massiques) et température pour les trois entrées de la flamme Sandia D.

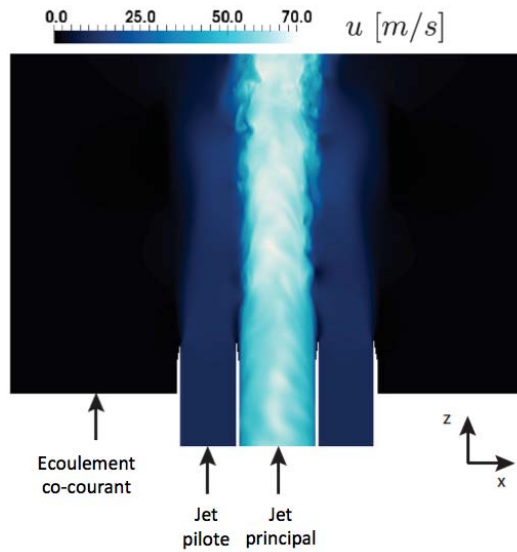


Figure 7.27 – Configuration de l'écoulement de la flamme D.

7.8.2 Méthodologies et maillages

Les simulations LES sont réalisées avec le code AVBP. Les trois entrées ainsi que la condition de sortie sont décrites via des conditions limites de type NSCBC afin d'assurer un traitement correct des ondes acoustiques. Le schéma numérique utilisé est le schéma TTGC, d'ordre 3 en espace et en temps. Comme pour la configuration de THI, différents maillages sont utilisés. Le maillage de référence comporte 14 millions de noeuds. La taille caractéristique des éléments dans les tubes d'injection et dans la flamme est de 0.1 mm, jusqu'à la position axiale $Z = 3D$. En aval de cette position, le maillage est déaffiné de façon linéaire jusqu'à atteindre une taille caractéristique de 0.3 mm à $Z = 7.5D$. Celle-ci reste inchangée jusqu'à $Z = 30D$. La simulation est également réalisée sur un maillage plus grossier qui comporte quant à lui 2 millions de noeuds. Il est identique au maillage fin jusqu'à $Z = 3D$ afin de bien capturer le mélange initial au niveau des lèvres de l'injecteur. La taille de maille est ensuite de 0.9 mm jusqu'à $Z = 30D$.

7.8.3 Résultats

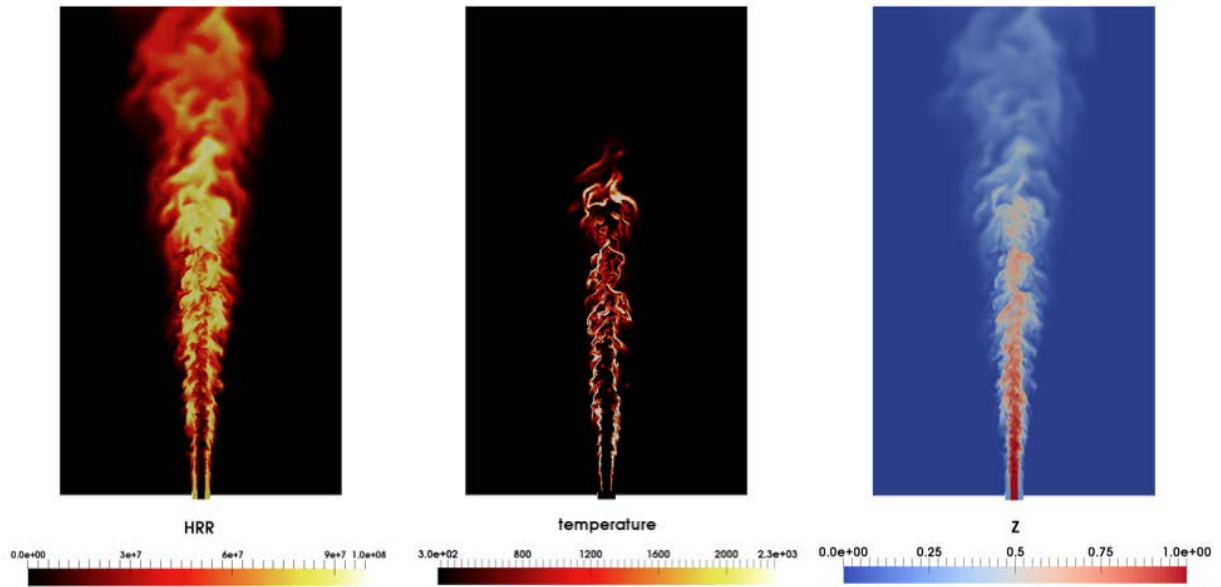
Dans ce paragraphe, l'écoulement et la structure de flamme sont brièvement présentés et comparés avec l'expérience. Des champs instantanés de fraction de mélange, température et de dégagement de chaleur sont montrés en Fig. 7.28 pour les différents maillages. Les couches de mélange entre les trois jets se développent et génèrent des structures turbulentes qui grandissent et conduisent à l'ouverture du jet. La couche de mélange entre le jet pilote et le jet principal se déstabilise plus vite que celle entre le jet co-courant et le jet pilote comme l'indique la plus grande quantité de fines structures à cet endroit. Les principales différences observables entre le cas de référence et le cas du maillage grossier résident dans le plissement et la longueur de la flamme. En effet, on peut remarquer que la flamme est plus courte dans le cas du maillage grossier, comme on peut le voir sur la Fig. 7.29 qui montre la surface de flamme définie comme l'isocontour de fraction à la stoechiométrie z_{st} . La flamme semble également moins plissée, notamment vers le pied de flamme dans la zone où le maillage est fortement déaffiné par rapport au maillage de référence.

Des profils de vitesse et de température sont tracés et comparés aux mesures à différentes positions axiales. Les courbes obtenues avec le maillage de référence sont en accord avec les expériences, conformément à l'étude détaillée présentée dans la thèse de Jaravel [87]. Les différences observées pour le cas de maillage grossier sont consistantes avec les observations faites sur la flamme dans les deux cas.

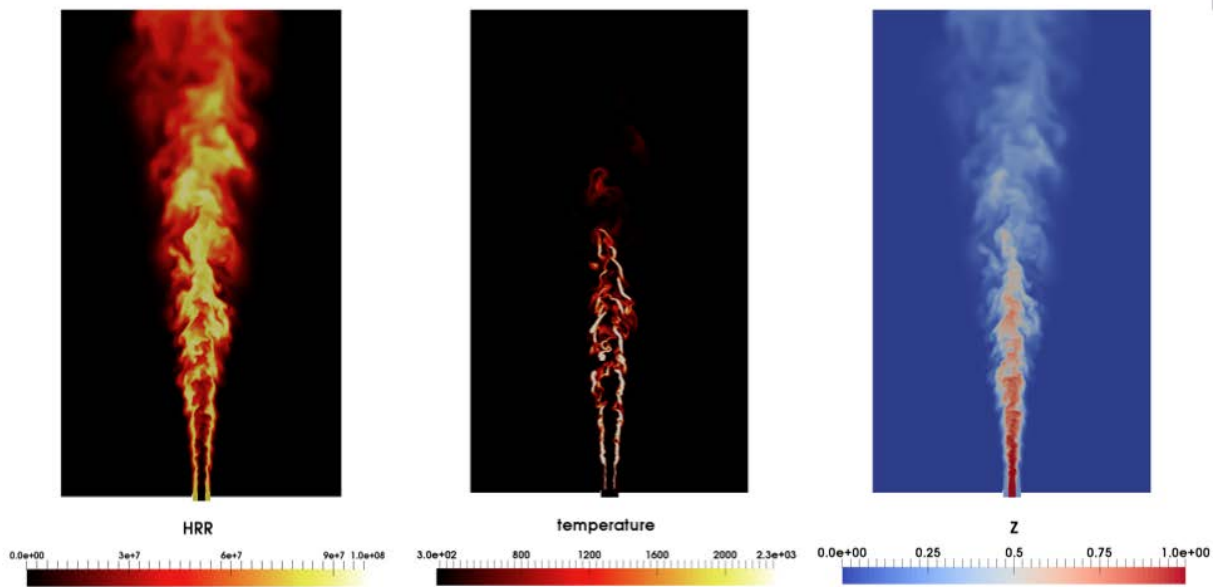
7.8.4 Effet du plissement, du maillage et de l'étirement

La totalité du combustible étant consommée avant la sortie du domaine, le dégagement de chaleur total est le même dans les deux cas. C'est pourquoi, dans la suite on compare les dégagements de chaleur intégrés dans des sections transversales d'épaisseur $\Delta_Z = 20$ mm tout au long de la flamme, comme le montre la Fig. 7.33a.

La figure 7.33b montre l'évolution du dégagement de chaleur intégré par sections le long de la flamme. La première chose que l'on observe est une surestimation du dégagement de chaleur par rapport au maillage de référence jusqu'à $Z = 0.2$ m. Cette surestimation correspond au déaffinement du maillage. Après $Z = 0.2$ m, le dégagement de chaleur diminue plus vite qu'avec le maillage de référence. Comme attendu, il est à noter que l'intégrale de ces deux courbes est égale. La Fig. 7.34 représente l'évolution de la surface de flamme intégrée par sections, le long de la flamme. Celle-ci augmente jusqu'à $Z = 0.25$ m, en raison de la déstabilisation de la couche de cisaillement qui déforme et plisse la flamme, puis elle diminue jusqu'au bout de la flamme. Cette dernière est globalement plus élevée dans le cas de référence, néanmoins les différences observées ne sont pas très importantes. L'écart est maximal à $Z = 0.3$ m où le rapport est de l'ordre de 2.5, et correspond à la différence de longueur de flamme. Enfin, l'étirement intégré par section est représenté en



(a) Maillage de référence



(b) Maillage grossier

Figure 7.28 – Champs instantanés de température, dégagement de chaleur et fraction de mélange pour (a) le maillage de référence et (b) le maillage grossier.

Fig. 7.35a tandis que la distribution d'étirement autour de z_{st} est donnée en Fig. 7.35b pour les deux maillages. L'étirement est globalement plus élevé pour le cas de référence sur toute

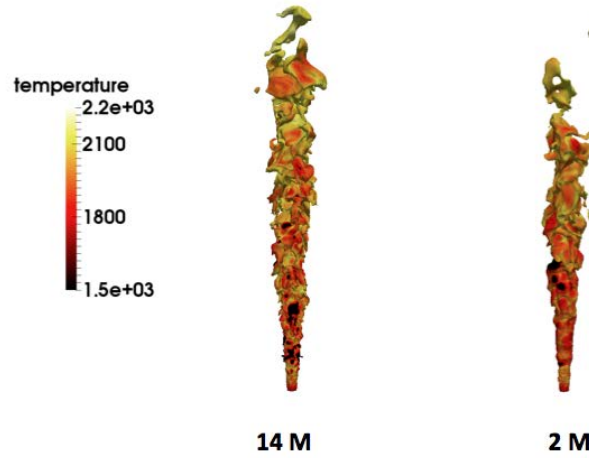


Figure 7.29 – Visualisation de la surface de flamme pour (gauche) le maillage de référence et (droite) le maillage grossier.

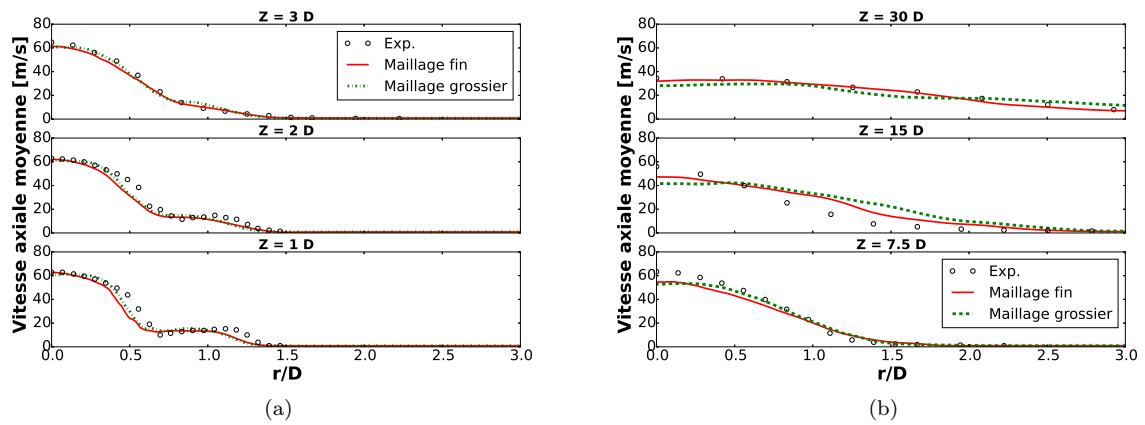


Figure 7.30 – Profils de vitesse axiale moyenne.

la longueur de la flamme. Néanmoins, les valeurs restent très proches et le rapport maximal est de l'ordre de 1.25.

7.8.5 Application du modèle de combustion

Au vu des résultats précédents, il semble que dans ce cas, la surestimation du dégagement de chaleur due à la sous-résolution du maillage soit l'effet principal. En effet, la sous-estimation du dégagement de chaleur dans la seconde partie de la flamme résulte di-

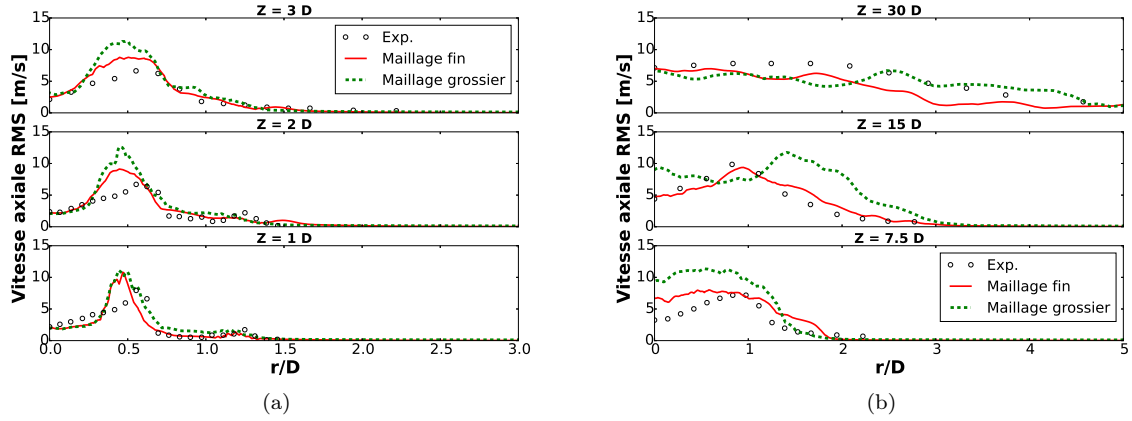


Figure 7.31 – Profils de vitesse axiale RMS.

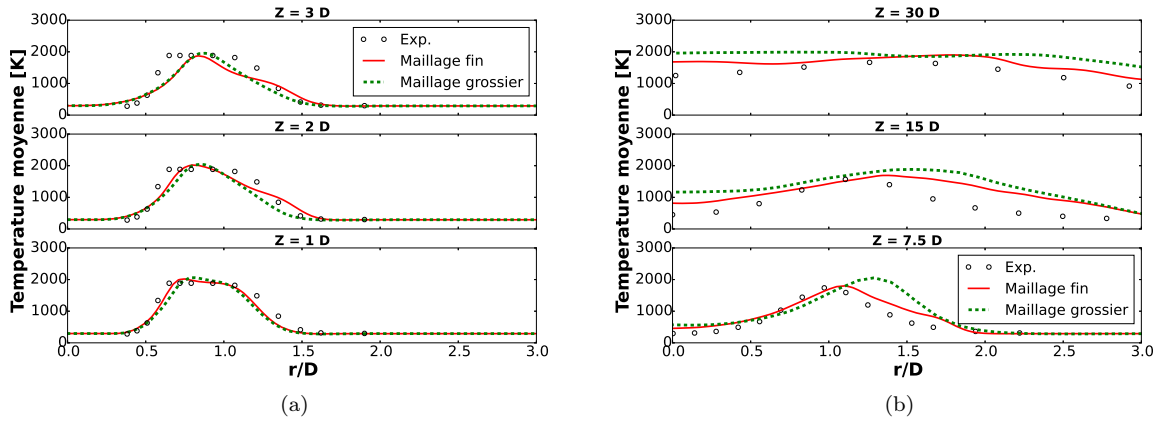
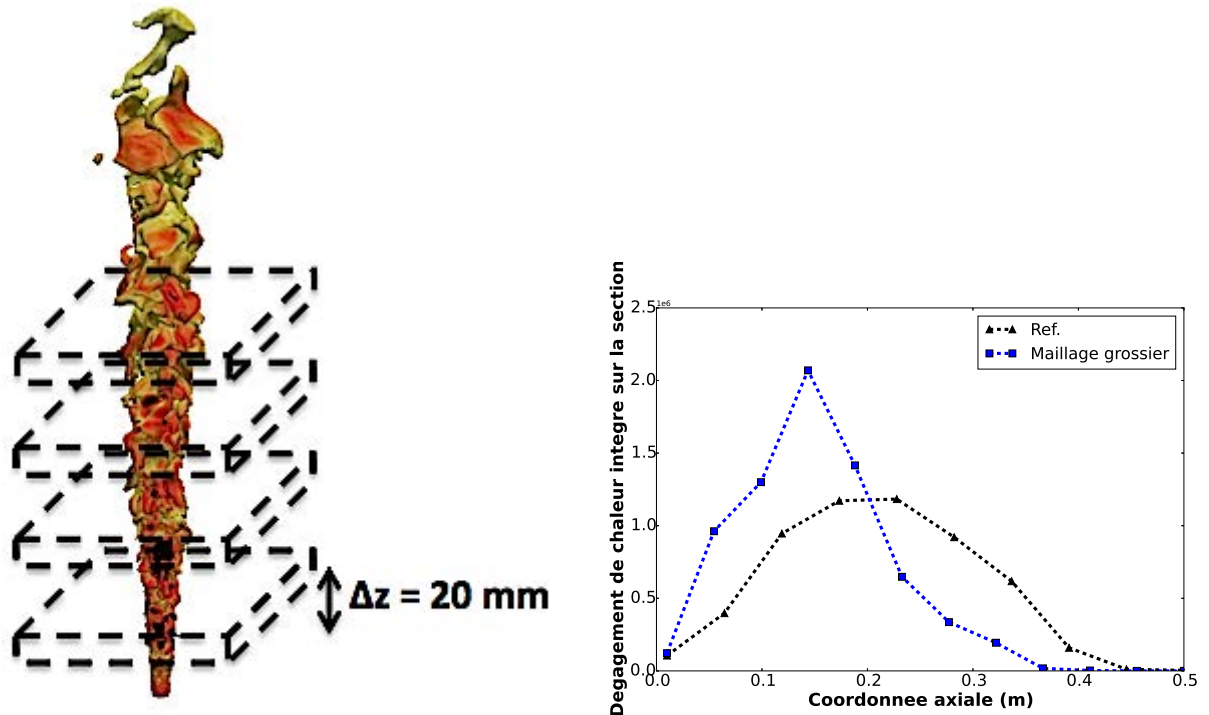


Figure 7.32 – Profils de température.

rectement de la surconsommation du carburant en amont. Afin de prendre en compte la surestimation du taux de dégagement de chaleur dans la région $Z < 0.2$ m, un facteur F dépendant de la coordonnée axiale Z est appliqué. Celui-ci est évalué à partir du rapport de taille de maille ainsi que du rapport de surface de flamme et d'étirement analysés en Section 7.8.4. Il vaut 0.1 en pied de flamme et remonte à 1 vers $Z = 0.3$ m. Un champ de F multiplié par le senser θ ($A = 4$, $B = 2000$) ainsi que la fonction utilisée sont visibles en Fig. 7.36.

Les résultats obtenus avec l'application du modèle sont présentés en Fig. 7.37a et 7.37b. Le modèle permet de se rapprocher du cas de référence en réduisant la surestimation du taux de dégagement de chaleur pour $Z < 0.2$ m. La surface de flamme n'est quant à elle que très peu modifiée même si on peut noter une légère augmentation de celle-ci à $Z = 0.3$ m.



(a) Schéma de l'intégration par sections transversales le long de la flamme. (b) Dégagement de chaleur intégré par sections le long de l'axe longitudinal.

Figure 7.33 – Dégagement de chaleur pour les deux maillages.

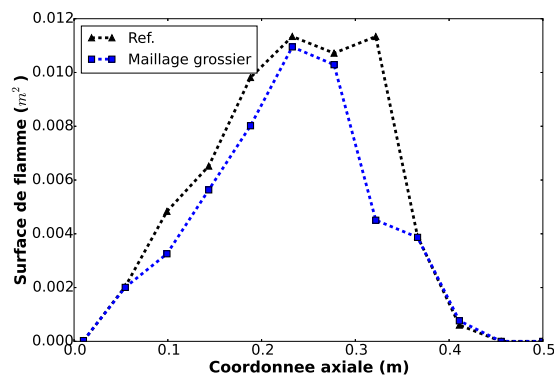
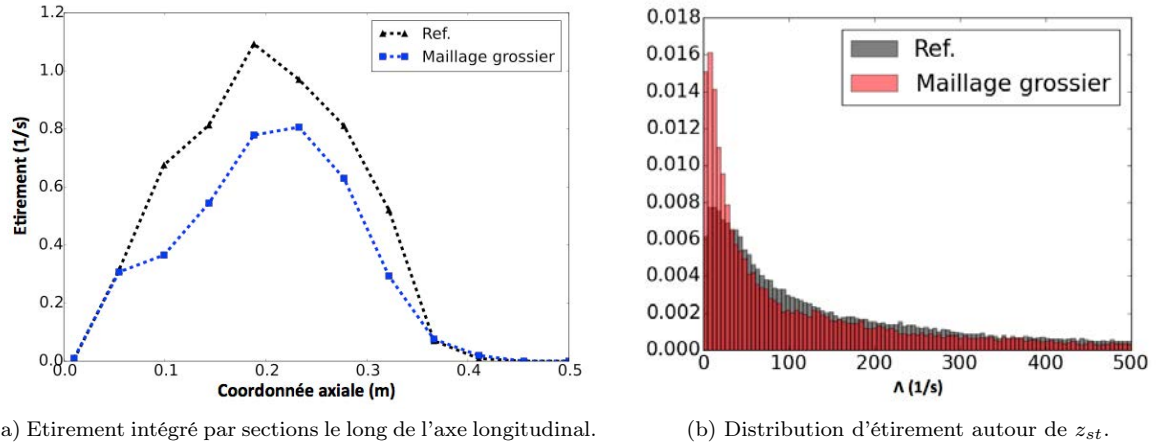


Figure 7.34 – Surface de flamme intégrée par sections le long de l'axe de longitudinal.

7.9 Conclusion

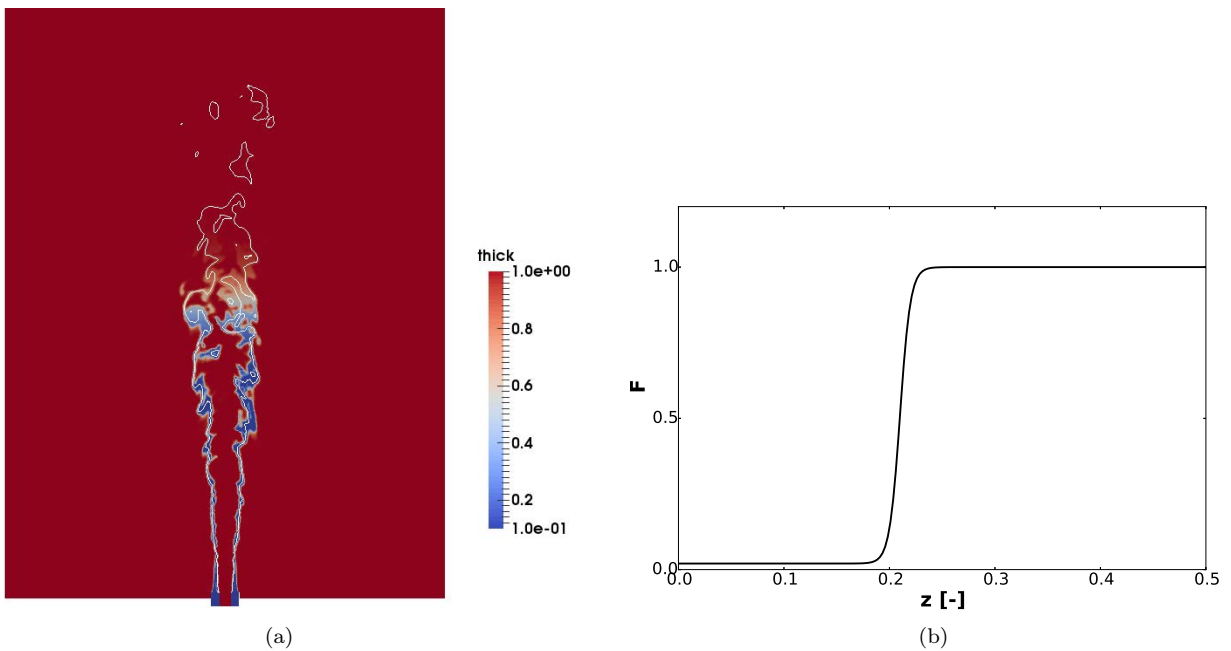
Dans ce chapitre, une méthodologie de modélisation des flammes de diffusion turbulente a été proposée à partir d'une étude 1D permettant d'une part, de vérifier les propriétés



(a) Etirement intégré par sections le long de l'axe longitudinal.

(b) Distribution d'étirement autour de z_{st} .

Figure 7.35 – Comparaison de l'étirement pour les deux maillages.



(a)

(b)

Figure 7.36 – Champ de F avec un isocontour $z = z_{st}$ ainsi que son profil en fonction de la coordonnée axiale.

théoriques des flammes de diffusion laminaires et d'autre part, d'évaluer l'effet de la sous-résolution du maillage sur le dégagement de chaleur total de la flamme. Cette dernière joue le rôle d'une diffusivité supplémentaire à prendre en compte pour ne pas surestimer le dégagement de chaleur. La prise en compte du plissement de sous-maille est réalisée en multipliant la diffusivité par un facteur supérieur à 1 de façon locale afin de ne pas épaissir la flamme de diffusion qui s'adapte au maillage. Deux configurations de flammes

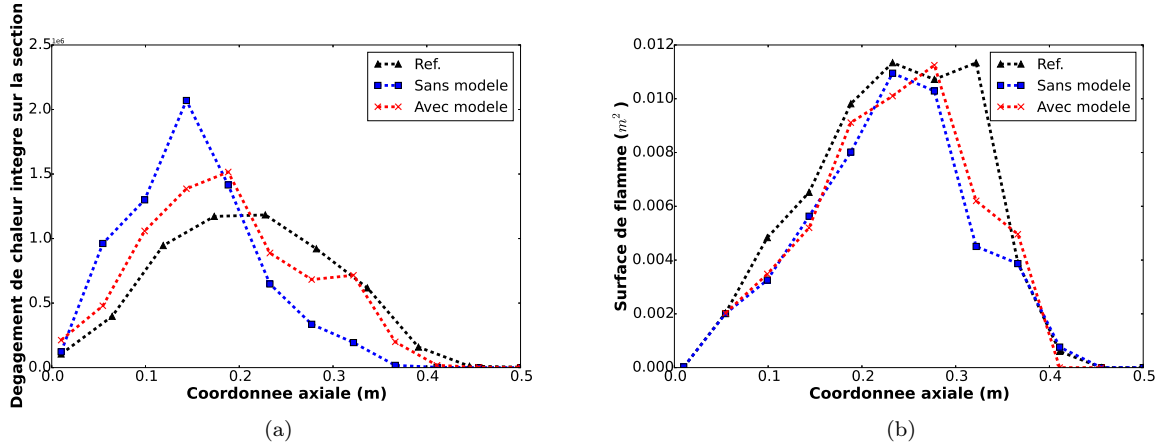


Figure 7.37 – (a) Dégagement de chaleur intégré par section le long de l'axe longitudinal. (b) Surface de flamme le long de l'axe longitudinal.

non prémélangées turbulentes ont alors fait l'objet de tests à priori. Dans le cas de la turbulence homogène isotrope, la différence observée dans le dégagement de chaleur total résulte principalement du défaut de plissement supplémentaire présent pour le maillage grossier. L'étude de la flamme Sandia D montre une surconsommation du carburant dans la zone amont de la flamme due à la sous-résolution du maillage. En conséquence, la flamme sur le maillage sous-résolu est plus courte. Le plissement reste quant à lui relativement similaire et ne joue pas un rôle prédominant. Toutes ces études ont été faites à partir de diagnostics a priori où les valeurs de F sont issues de calculs préliminaires résolus. La prochaine étape consistera à estimer F directement à partir des solutions LES filtrées. Cette étape permettra également d'aller, si nécessaire, vers des valeurs de F plus grandes que celles qui ont pu être testées ici et qui restent assez modestes.

Conclusions et perspectives

Le travail présenté dans ce manuscrit de thèse s'inscrit dans un contexte environnemental et industriel toujours plus restrictif et concurrentiel. A ce titre, l'amélioration des processus de combustion est devenu au fil des années un enjeu majeur de l'industrie du transport. Pouvoir caractériser l'évolution du carburant liquide ainsi que la structure complexe de la flamme diphasique dans un moteur est donc essentiel. L'étude proposée repose sur l'utilisation de la Simulation aux Grandes Echelles dans laquelle la phase liquide est traitée avec une approche lagrangienne déterministe (Chapitres 2 et 3). Le brûleur diphasique KIAI a fait l'objet d'une étude détaillée dans une configuration non swirlée non confinée et une configuration swirlée et confinée (Chapitre 4 et 5). Celui-ci a été choisi en raison des nombreuses validations rendues possibles par la grande quantité de données expérimentales disponibles à la fois pour la phase gazeuse et la phase liquide. La méthodologie LES-DPS s'est révélée en mesure de reproduire fidèlement l'écoulement gazeux ainsi que le spray en terme de distribution de taille et de vitesse. La structure complexe de la flamme a été analysée de façon détaillée et les différentes zones réactives ont été décrites, mettant en évidence l'impact de la phase de liquide sur la flamme. En particulier, la flamme exhibe des régimes de combustion variés dans des zones bien distinctes qui ont été identifiées. Le processus de stabilisation de la flamme a également été étudié à partir de calculs réalisés avec une chimie simplifiée et une chimie analytique. Ces derniers n'ont pas montré de différences significatives, aussi bien dans la structure de la flamme que dans la hauteur de liftoff. Celle-ci se trouve être d'origine purement propagative et présente des caractéristiques similaires avec les flammes triples gazeuses. La flamme se stabilise dans une région proche de la stœchiométrie et où la vitesse de l'écoulement est égale à la vitesse de la flamme. Une analyse locale a montré que cette dernière est très proche de la vitesse laminaire de flamme.

Toujours dans l'optique d'améliorer la modélisation de la combustion diphasique, la modélisation des flammes de diffusion turbulentes a fait l'objet de la seconde partie de la thèse. Le Chapitre 6 a permis de montrer dans quelle mesure ce type de flamme diffère des flammes prémélangées et a permis de définir les quantités d'intérêt pour l'étude de ce type de flamme. Les différentes propriétés énoncées concernant notamment le dégagement de chaleur total, l'épaisseur de flamme et l'étirement ont été vérifiées sur un cas 1D (Chapitre 7) qui a également permis de mettre en évidence l'effet de la sous-résolution du maillage sur le dégagement de chaleur. A partir de cette première étude, une méthodologie a été élaborée et repose sur la modification du coefficient de diffusivité de telle sorte à prendre en compte les facteurs influençant le dégagement de chaleur total. Cette modification doit être faite de façon locale pour ne pas épaissir la flamme et un senseur basé sur la fraction de mélange est utilisé. Cette méthodologie a ensuite été testée sur deux configurations 3D que sont l'évolution d'une flamme de diffusion dans une turbulence homogène isotrope et la flamme jet Sandia D (Chapitre 7). Pour la première, il a été montré que les différences observées dans les dégagements de chaleur totaux provenaient principalement du défaut de plissement tandis que la sous-résolution du maillage à la base de la flamme constituait le principal facteur responsable de la diminution de la longueur de la flamme dans le cas de la flamme D.

Bien que les méthodologies de modélisation telles que la LES-DPS semblent aujourd'hui suffisamment matures en terme de prédictivité pour des configurations de complexité intermédiaire, une dernière étape consiste à la valider dans le cas d'une configuration industrielle. L'une des principales difficultés réside dans l'acquisition de données fiables et précises simultanément pour la phase gazeuse et la phase liquide. Une autre difficulté majeure, du point de vue de la simulation, réside dans la modélisation de la combustion pour des régimes de combustion variés. L'approche proposée dans cette thèse permet de modéliser les flammes de diffusion turbulentes et est compatible avec la méthodologie TFLES. Celle-ci doit être appliquée dans un cas impliquant à la fois de la combustion prémélangée et non-prémélangée, puis un cas diphasique comme la configuration non swirlée non confinée de KIAI, pour lequel le senseur du modèle serait conditionné par l'indice de Takeno.

D'un point de vue plus général concernant la recherche future dans la modélisation de la combustion diphasique, un tel niveau de maturité de la méthodologie LES-DPS permet d'aborder l'étude de phénomènes plus complexes tels que l'effet de la phase liquide sur les émissions de polluants, ainsi que sur l'allumage et l'extinction de la flamme. En particulier, ces dernières problématiques font l'objet du projet TIMBER impliquant les laboratoires EM2C, CORIA et CERFACS et dont le but est d'investiguer les effets de la phase liquide sur les procédés d'allumage et d'extinction, en construisant une base de donnée expérimentale qui serviront à valider les outils LES. Le banc expérimental KIAI faisant partie avec MICCA

des configurations retenues pour cette étude, ce travail constitue ainsi une excellente base sur laquelle se reposer pour les études d'allumages futures.

Bibliographie

- [1] A. Abdelsamie and D. Thévenin. Direct numerical simulation of spray evaporation and autoignition in a temporally-evolving jet. *Proceedings of the Combustion Institute*, 2016. citée en p. [39](#)
- [2] B. Abramzon and S. Sazhin. Droplet vaporization model in the presence of thermal radiation. *Int. J. Heat and Mass Transfer* , 48 :1868–1873, 2005. citée en p. [78](#), [89](#)
- [3] VM Alipchenkov and LI Zaichik. Differential and algebraic models for the second moments of particle velocity and temperature fluctuations in turbulent flows. *Fluid Dynamics*, 42(2) :236–254, 2007. citée en p. [38](#)
- [4] C. Angelberger, D. Veynante, F. Egolfopoulos, and T. Poinsot. Large eddy simulations of combustion instabilities in premixed flames. In *Proc. of the Summer Program* , pages 61–82. Center for Turbulence Research, NASA Ames/Stanford Univ., 1998. citée en p. [66](#)
- [5] K. Annamalai and W. Ryan. Interactive processes in gasification and combustion. part 1 : Liquid drop arrays and clouds. *Prog. Energy Comb. Sci.* , 18 :221–295, 1992. citée en p. [24](#)
- [6] WD Bachalo. Experimental methods in multiphase flows. *International journal of multiphase flow*, 20 :261–295, 1994. citée en p. [34](#)
- [7] S. Balachandar and John K. Eaton. Turbulent dispersed multiphase flow. *Annual Review of Fluid Mechanics*, 42 :111–133, 2010. citée en p. [20](#)
- [8] G. Balakrishnan, M. Smooke, and F. A. Williams. A numerical investigation of extinction and ignition limits in laminar non-premixed counterflowing hydrogen-air streams for both elementary and reduced chemistry. *Combust. Flame* , 102 :329–340, 1995. citée en p. [148](#)

- [9] G. Balakrishnan, C. Trevino, and F. Mauss. The asymptotic structure of hydrogen-air diffusion flames. *Combust. Flame* , 91 :246–256, 1992. citée en p. [148](#)
- [10] R. S. Barlow and Franck J.H. Effects of turbulence on species mass fractions in methane/air jet flames. *Proc. Combust. Inst.* , 27 :1087–1095, 1998. citée en p. [188](#)
- [11] David Barré. *Numerical simulation of ignition in aeronautical combustion chambers*. PhD thesis, 2014. citée en p. [84](#)
- [12] J. M. Beer and N. A. Chigier. *Combustion aerodynamics*. Krieger, Malabar, Florida, 1983. citée en p. [15](#)
- [13] R. W. Bilger. Turbulent jet diffusion flames. *Prog. Energy Comb. Sci.* , 1(87) :109–130, 1976. citée en p. [162](#)
- [14] R. W. Bilger. The structure of turbulent non premixed flames. In *22nd Symp. (Int.) on Combustion*, pages 475–488. The Combustion Institute, Pittsburgh, 1988. citée en p. [162](#)
- [15] R. W. Bilger, S. H. Starner, and R. J. Kee. On reduced mechanisms for. methane-air combustion in nonpremixed flames. *Combust. Flame* , 80 :135–149, 1990. citée en p. [150](#)
- [16] RW Bilger, SH Starner, and RJ Kee. On reduced mechanisms for methane-air combustion in nonpremixed flames. *Combust. Flame* , 80(2) :135–149, 1990. citée en p. [107](#)
- [17] M. Bini and W. P. Jones. Large eddy simulation of an evaporating acetone spray. *International Journal of Heat and Fluid Flow*, 30 :471–480, 2009. citée en p. [36](#)
- [18] R. B. Bird, W. E. Stewart, and E. N. Lighfoot. *Transport phenomena*. John Wiley, New York, 1960. citée en p. [47](#)
- [19] M. Boger and D. Veynante. Large eddy simulations of a turbulent premixed v-shape flame. In C. Dopazo, editor, *Advances in Turbulence VIII*, pages 449 – 452. CIMNE, Barcelona, Spain, 2000. citée en p. [63](#)
- [20] M. Boger, D. Veynante, H. Boughanem, and A. Trouvé. Direct numerical simulation analysis of flame surface density concept for large eddy simulation of turbulent premixed combustion. In *27th Symp. (Int.) on Combustion*, pages 917–927, Boulder, 1998. The Combustion Institute, Pittsburgh. citée en p. [63](#)
- [21] M. Boileau. *Simulation aux grandes échelles de l’allumage diphasique des foyers aéronautiques*. Phd thesis, INP Toulouse, 2007. citée en p. [42](#), [67](#)

-
- [22] Giulio Borghesi, Epaminondas Mastorakos, and R Stewart Cant. Complex chemistry dns of n-heptane spray autoignition at high pressure and intermediate temperature conditions. *Combustion and Flame*, 160(7) :1254–1275, 2013. citée en p. [39](#)
- [23] R. Borghi. Turbulent combustion modelling. *Prog. Energy Comb. Sci.* , 14(4) :245–292, 1988. citée en p. [63](#)
- [24] R. Borghi. Background on droplets and sprays. In *Combustion and turbulence in two phase flows, Lecture Series 1996-02*. Von Karman Institute for Fluid Dynamics, 1996. citée en p. [24](#)
- [25] R. Borghi. The links between turbulent combustion and spray combustion and their modelling. *Transport phenomena in combustion*, 1996. citée en p. [22](#), [24](#), [25](#)
- [26] R. Borghi and M. Champion. *Modélisation et théorie des flammes*. TECHNIP, éditions technip edition, 2000. citée en p. [26](#)
- [27] K. N. C. Bray, M. Champion, and P. A. Libby. The interaction between turbulence and chemistry in premixed turbulent flames. In R. Borghi and S.N.B. Murthy, editors, *Turbulent Reactive Flows*, volume 40, pages 541–563. Lecture notes in engineering, Springer Verlag, 1989. citée en p. [63](#)
- [28] T. M. Brown, M. A. Tanoff, R. J. Osborne, R. W. Pitz, and M. D. Smooke. Experimental and numerical investigation of laminar hydrogen-c. *Combust. Sci. Technol.*, 129 :71–88, 1997. citée en p. [148](#)
- [29] M. Burger, R. Schmehl, K. Prommersberger, O. Schaefer, R. Koch, and S. Wittig. Droplet evaporation modeling by the distillation curve model : accounting for kerosene fuel and elevated pressures. *Int. J. Heat and Mass Transfer* , 46 :4403–4412, 2003. citée en p. [73](#)
- [30] S. P. Burke and T. E. W. Schumann. Diffusion flames. *Industrial and Engineering Chemistry*, 20(10) :998–1005, 1928. citée en p. [151](#)
- [31] T. D Butler and P. J. O'Rourke. A numerical method for two dimensional unsteady reacting flows. In *Symposium on Combustion (International), 16th, Cambridge, Mass., August 15-20*, pages 1503–1513, 1977. citée en p. [64](#)
- [32] J Cai, S-M. Jeng, and R. Tacina. The structure of a swirl-stabilized reacting spray issued from an axial swirler. In *43rd AIAA Aerospace Sciences Meeting and Exhibit*, page 1424, 2005. citée en p. [41](#)
- [33] S. Candel, F. Lacas, N. Darabiha, and J. Rolon. Group combustion in spray flames. *Multiphase Science and Technology*, 11 :1–18, 1999. citée en p. [23](#)
-

- [34] GF Carrier. Shock waves in a dusty gas. *Journal of Fluid Mechanics*, 4(04) :376–382, 1958. citée en p. [37](#)
- [35] F. Charlette, D. Veynante, and C. Meneveau. A power-law wrinkling model for LES of premixed turbulent combustion : Part i - non-dynamic formulation and initial tests. *Combust. Flame* , 131 :159–180, 2002. citée en p. [66](#)
- [36] N. H. Chen, B. Rogg, and K. N. Bray. Modelling laminar two-phase counterflow flames with detailed chemistry and transport. In *Twenty-Fourth Symposium (International) on Combustion*, pages 1513–1521, 1992. citée en p. [40](#)
- [37] H. Chiu and T. Liu. Group combustion of liquid droplets. *Combust. Sci. Tech.* , 17 :127–131, 1977. citée en p. [23](#)
- [38] H.H. Chiu. Advances and challenges in droplet and spray combustion. i. toward a unified theory of droplet aerothermochemistry. *Progress in Energy and Combustion Science*, 26 :381–416, 2000. citée en p. [23](#), [78](#)
- [39] H.H. Chiu, H.Y. Kim, and E.J. Croke. Internal group combustion of liquid droplets. , 19 :971–980, 1982. citée en p. [23](#), [24](#), [25](#), [26](#)
- [40] Huei-Huang Chiu and S. P. Su. Theory of droplets (ii) : states, structures, and laws of interacting droplets. *Atomization and Sprays* , 7 :1–32, 1997. citée en p. [78](#)
- [41] O. Colin, F. Ducros, D. Veynante, and T. Poinso. A thickened flame model for large eddy simulations of turbulent premixed combustion. *Physics of Fluids*, 12 :1843–1863, 2000. citée en p. [65](#), [66](#), [88](#), [127](#), [180](#)
- [42] O. Colin and M. Rudgyard. Development of high-order Taylor-Galerkin schemes for LES. *J. Comput. Phys.* , 162 :338–371, 2000. citée en p. [92](#)
- [43] G. Continillo and W. A. Sirignano. Counterflow spray combustion modeling. *Combust. Flame* , 81(3-4) :325–340, September 1990. citée en p. [40](#), [107](#)
- [44] A. W. Cook and J. J. Riley. A subgrid model for equilibrium chemistry in turbulent flows. *Phys. Fluids A*, 6(8) :2868 – 2870, 1994. citée en p. [63](#)
- [45] J. A. Cooke, M. Bellucci, M. D Smooke, A. Gomez, A. Violi, T. Faravelli, and E. Ranzi. Computational and experimental study of jp-8, a surrogate, and its components in counterflow diffusion flames. *Proceedings of the Combustion Institute*, 30 :439–446, 2005. citée en p. [148](#)
- [46] M Cordier. *Allumage et propagation de flammes dans les écoulements fortement swirlés : études expérimentales et numériques*. PhD thesis, PhD thesis, INSA Rouen, 2013. citée en p. [84](#)

-
- [47] C. Crowe, M. Sommerfeld, and Y. Tsuji. *Multiphase Flows with Droplets and Particles*. 1998. citée en p. [72](#)
- [48] C.T. Crowe, J. D. Schwarzkopf, M. Sommerfeld, and Y. Tsuji. *Multiphase Flows With Droplets and Particles*. CRC Press, August 2011. citée en p. [72](#)
- [49] B. Cuenot and T. Poinso. Effects of curvature and unsteadiness in diffusion flames. implications for turbulent diffusion flames. *Proc. Combust. Inst.* , 25 :1383–1390, 1994. citée en p. [33](#)
- [50] Henry J Curran, Paolo Gaffuri, William J Pitz, and Charles K Westbrook. A comprehensive modeling study of n-heptane oxidation. *Combustion and flame*, 114(1) :149–177, 1998. citée en p. [117](#)
- [51] R. Ben Dakhli, V. Giovangigli, and D. E. Rosner. Soret effects in laminar counterflow spray diffusion flames. *Combust. Theory and Modelling* , pages 1–17, 2002. citée en p. [40](#)
- [52] G. Damkohler. The effect of turbulence on the flame velocity in gas mixtures. *Z. Electrochem*, 46 :601–626, 1940. citée en p. [29](#)
- [53] Connaissance des Energies. <http://www.connaissancedesenergies.org/fiche-pedagogique/consommation-d-energie-finale-dans-le-monde-0>. citée en p. [12](#)
- [54] F. Ducros, F. Nicoud, and T. Poinso. Wall-adapting local eddy-viscosity models for simulations in complex geometries. In Baines M. J., editor, *Proc. 6th ICFD Conference on numerical methods for fluid dynamic*, pages 293–300, 1998. citée en p. [60](#), [88](#), [180](#)
- [55] J. K. Dukowicz. A particle-fluid numerical model for liquid sprays. *J. Comput. Phys.* , 35 :229–253, 1980. citée en p. [36](#)
- [56] A. Ern and V. Giovangigli. *Multicomponent Transport Algorithms*. Lecture Notes in Physics. Springer Verlag, Heidelberg, 1994. citée en p. [47](#)
- [57] Lucas Esclapez. *Numerical study of ignition and inter-sector flame propagation in gas turbine*. PhD thesis, 2015. citée en p. [84](#), [87](#)
- [58] V. Eswaran and S. B. Pope. An examination of forcing in direct numerical simulations of turbulence. *Computers & Fluids*, 16 :257–278, 1988. citée en p. [180](#), [181](#)
- [59] A Felden. *Development of Analytically Reduced Chemistries (ARC) and applications in Large Eddy Simulations (LES) of turbulent combustion*. PhD thesis, 2017. citée en p. [117](#)
- [60] E. Fernández-Tarrazo, A. L. Sánchez, A. Liñán, and F. A. Williams. A simple one-step chemistry model for partially premixed hydrocarbon combustion. *Combust. Flame* , 147 :32–38, 2006. citée en p. [91](#)
-

- [61] J. Ferry and E. Balachandar. A fast eulerian method for disperse two-phase flow. *Int. J. Multiphase Flow* , 27 :1199–1226, 2001. citée en p. [37](#)
- [62] Jim Ferry and S Balachandar. A fast eulerian method for disperse two-phase flow. *International journal of multiphase flow*, 27(7) :1199–1226, 2001. citée en p. [37](#)
- [63] B. Franzelli, E. Riber, M. Sanjosé, and T. Poinso. A two-step chemical scheme for Large-Eddy Simulation of kerosene-air flames. *Combust. Flame* , 157 :1364–1373, 2010. citée en p. [90](#), [158](#), [159](#)
- [64] Jean-Philippe Frenillot. *Etude phénoménologique des processus d’allumage et de stabilisation dans les chambres de combustion turbulente swirlées*. PhD thesis, Rouen, INSA, 2011. citée en p. [84](#)
- [65] M Garcia. *Development and validation of the Euler-Lagrange formulation on a parallel and unstructured solver for large-eddy simulation*. PhD thesis, INP Toulouse. citée en p. [21](#), [41](#)
- [66] M. Germano, U. Piomelli, P. Moin, and W. Cabot. A dynamic subgrid-scale eddy viscosity model. *Phys. Fluids* , 3(7) :1760–1765, 1991. citée en p. [59](#)
- [67] V. Giovangigli. *Multicomponent Flow Modeling*. Modeling and Simulation in Science, Engineering and Technology. Birkhauser, Boston, 1999. citée en p. [47](#)
- [68] A Giusti and E Mastorakos. Detailed chemistry les/cmc simulation of a swirling ethanol spray flame approaching blow-off. *Proceedings of the Combustion Institute*, 2016. citée en p. [41](#)
- [69] David G. Goodwin. Cantera code site, July 2009. citée en p. [49](#)
- [70] F. Gouldin, K. Bray, and J. Y. Chen. Chemical closure model for fractal flamelets. *Combust. Flame* , 77 :241, 1989. citée en p. [66](#)
- [71] F. C. Gouldin. Combustion intensity and burning rate integral of premixed flames. In *26th Symp. (Int.) on Combustion*, pages 381 – 388. The Combustion Institute, Pittsburgh, 1996. citée en p. [62](#)
- [72] J. B. Greenberg, I. Silverman, and Y. Tambour. A new heterogeneous burning velocity formula for the propagation of a laminar flame front through a polydisperse spray of droplet. *Combust. Flame* , 104 :358–368, 1996. citée en p. [28](#)
- [73] E. Gutheil and W. A. Sirignano. Counterflow spray combustion modeling with detailed transport and detailed chemistry. *Combust. Flame* , 113 :92–105, 1998. citée en p. [40](#)
- [74] J.C. Han, S. Dutta, and S.V. Ekkad. *Gas Turbine Heat Transfer and Cooling Technology*. Taylor & Francis, New York, NY, USA, 2000. citée en p. [16](#)

-
- [75] G. Hannebique, P. Sierra, E. Riber, and B. Cuenot. Large eddy simulation of reactive two-phase flow in a aeronautical multipoint burner. *Flow, Turb. and Combustion*, 90 :449–469, 2012. citée en p. [68](#), [77](#), [114](#)
- [76] K. Harstad and J. Bellan. Modeling evaporation of Jet-A, JP-7 and RP-1 drops at 1 to 15 bars. *Combust. Flame*, 77 :163–177, 2004. citée en p. [73](#)
- [77] E. R. Hawkes and S. R. Cant. A flame surface density approach to large eddy simulation of premixed turbulent combustion. In *28th Symp. (Int.) on Combustion*, pages 51–58. The Combustion Institute, Pittsburgh, 2000. citée en p. [63](#)
- [78] J. O. Hirschfelder, C. F. Curtiss, and R. B. Bird. *Molecular theory of gases and liquids*. John Wiley & Sons, New York, 1969. citée en p. [47](#)
- [79] Yong Hu, Hernan Olguin, and Eva Gutheil. Transported joint pdf simulation of turbulent spray flames combined with a spray flamelet model using a transported scalar dissipation rate. *Combustion Science and Technology*, (just-accepted), 2016. citée en p. [40](#)
- [80] G. L. Hubbard, V. E. Denny, and A. F. Mills. Droplet evaporation : effects of transient and variable properties. *Int. J. Heat and Mass Transfer*, 18 :1003–1008, 1975. citée en p. [77](#)
- [81] N. Iafrate. *Simulation aux grandes échelles diphasique dans les moteurs downsizes à allumage commande*. Phd thesis, INP Toulouse, 2016. citée en p. [70](#)
- [82] IEA. Key world energy statistics 2016. Technical report, IEA, 2016. citée en p. [13](#)
- [83] M. Ihme and H. Pitsch. Modeling of radiation and nitric oxide formation in turbulent nonpremixed flames using a flamelet/progress variable formulation. *Physics of Fluids*, 20(5) :055110–055110–20, 2008. citée en p. [188](#)
- [84] H. G. Im, C. K. Law, J. S. Kim, and F. A. Williams. Response of counterflow diffusion flames to oscillating strain rates. *Combust. Flame*, 100 :21–30, 1995. citée en p. [148](#)
- [85] F. Jaegle. *LES of two-phase flow in aero-engines*. PhD thesis, Université de Toulouse - Ecole doctorale MEGeP, CERFACS - CFD Team, Toulouse, December 2009. citée en p. [41](#)
- [86] F. Jaegle, J.-M. Senoner, M. Garcia, F. Bismes, R. Lecourt, B. Cuenot, and T. Poinso. Lagrangian and eulerian simulations of evaporating fuel spray in an aeronautical multipoint injector. *Proc. Combust. Inst.*, 33 :2099–2107, 2011. citée en p. [88](#)
- [87] T Jaravel. *Prediction of pollutants in gas turbines using large eddy simulation*. PhD thesis, 2016. citée en p. [117](#), [190](#)
-

- [88] T Jaravel, E Riber, B Cuenot, and G Bulat. Large eddy simulation of an industrial gas turbine combustor using reduced chemistry with accurate pollutant prediction. *Proceedings of the Combustion Institute*, 2016. citée en p. [68](#)
- [89] P. Jenny, D. Roekaerts, and N. Beishuizen. Modeling of turbulent dilute spray combustion. *Prog. Energy Comb. Sci.* , 38 :846—887, 2012. citée en p. [19](#), [21](#), [70](#)
- [90] S. Jerzembeck, N. Peters, P. Pepiot-Desjardins, and H. Pitsch. Laminar burning velocities at high pressure for primary reference fuels and gasoline : Experimental and numerical investigation. *Combustion and Flame*, 156 :292–301, 2009. citée en p. [117](#), [118](#)
- [91] W. P. Jones, A. J. Marquis, and D. Noh. LES of a methanol spray flame with a stochastic sub-grid model. *Proceedings of the Combustion Institute*, 35 :1685–1691, 2015. citée en p. [63](#)
- [92] W. P. Jones, A.J. Marquis, and K. Vogiatzaki. Large-eddy simulation of spray combustion in a gas turbine combustor. *Combust. Flame* , 161 :222–239, 2014. citée en p. [36](#), [63](#)
- [93] W.P. Jones, C. Lettieri, A.J. Marquis, and S. Navarro-Martinez. Large eddy simulation of the two-phase flow in an experimental swirl-stabilized burner. *International Journal of Heat and Fluid Flow*, 38 :145–158, 2012. citée en p. [36](#), [63](#)
- [94] WP Jones, AJ Marquis, and D Noh. A stochastic breakup model for large eddy simulation of a turbulent two-phase reactive flow. *Proceedings of the Combustion Institute*, 2016. citée en p. [40](#)
- [95] A. E. Potter JR and J. N. Butler. A novel combustion measurement based on the extinguishment of diffusion flames. *ARS JOURNAL*, pages 54 – 56, 1959. citée en p. [148](#)
- [96] Damien Kah, Frédérique Laurent, Lucie Fréret, Stephane De Chaisemartin, Rodney O Fox, Julien Reveillon, and Marc Massot. Eulerian quadrature-based moment models for dilute polydisperse evaporating sprays. *Flow, Turbulence and Combustion*, 85(3-4) :649–676, 2010. citée en p. [38](#)
- [97] B. Karlovitz, D. W. Denniston, D. H. Knapschaefer, and F. H. Wells. Studies on turbulent flames. In William and Wilkins, editors, *4th Symp. (Int.) on Combustion*, pages 613–620. The Combustion Institute, Pittsburgh, 1953. citée en p. [29](#)
- [98] A. Kaufmann, O. Simonin, and T. Poinso. Direct numerical simulation of particle-laden homogeneous isotropic turbulent flows using a two-fluid model formulation. In *5th Int. Conf. on Multiphase Flow*. ICMF’04, 2004. citée en p. [28](#)

-
- [99] Robert J. Kee, Kiyotaka Yamashita, Huayang Zhu, and Anthony M. Dean. The effects of liquid-fuel thermophysical properties, carrier-gas composition, and pressure, on strained opposed-flow non-premixed flames. *Combustion and Flame*, 158(6) :1129–1139, June 2011. citée en p. [39](#)
- [100] S. H. Kim and H. Pitsch. Conditional filtering method for large eddy simulation of turbulent nonpremixed combustion. *Phys. Fluids*, 17(10) :105103.1–105103.12, 2005. citée en p. [64](#)
- [101] A. Y. Klimenko and R. W. Bilger. Conditional moment closure for turbulent combustion. *Prog. Energy Comb. Sci.*, 25 :595 – 687, 1999. citée en p. [64](#)
- [102] A. N. Kolmogorov. The local structure of turbulence in incompressible viscous fluid for very large reynolds numbers. *C. R. Acad. Sci., USSR*, 30 :301, 1941. citée en p. [52](#), [53](#)
- [103] Kamal Kumar, JE Freeh, CJ Sung, and Y Huang. Laminar flame speeds of preheated iso-octane-o2-n2 and n-heptane-o2-n2 mixtures. *Journal of propulsion and power*, 23(2) :428–436, 2007. citée en p. [117](#), [118](#)
- [104] K. K. Kuo. *Principles of combustion*. John Wiley & Sons, Inc., Hoboken, New Jersey, 2nd edition, 2005. citée en p. [51](#)
- [105] K. K. Kuo. *Principles of combustion*. John Wiley & Sons, Inc., Hoboken, New Jersey, 2005 Second Edition. citée en p. [74](#)
- [106] F. Laurent and M. Massot. Multi-fluid modeling of laminar poly-dispersed spray flames : origin, assumptions and comparison of the sectional and sampling methods. *Combust. Theory and Modelling*, 5 :537–572, 2001. citée en p. [37](#), [38](#)
- [107] F. Laurent and M. Massot. Multi-fluid modelling of laminar polydisperse sprayflames : origin, assumptions and comparison of sectional and sampling methods. *Combust. Theory and Modelling*, 5 :537–572, 2001. citée en p. [40](#)
- [108] J.-Ph. L egier. *Simulations num eriques des instabilit es de combustion dans les foyers a eronautiques*. Phd thesis, INP Toulouse, 2001. citée en p. [66](#)
- [109] J Lelieveld, JS Evans, M Fnais, D Giannadaki, and A Pozzer. The contribution of outdoor air pollution sources to premature mortality on a global scale. *Nature*, 525(7569) :367–371, 2015. citée en p. [13](#)
- [110] Fabrice Lemoine and Guillaume Castanet. Temperature and chemical composition of droplets by optical measurement techniques : a state-of-the-art review. *Experiments in fluids*, 54(7) :1572, 2013. citée en p. [35](#)
-

- [111] D. C. Leslie and G. L. Quarini. The application of turbulence theory to the formulation of subgrid modelling procedures. *J. Fluid Mech.* , 91 :65–91, 1979. citée en p. [58](#)
- [112] Camille Letty, Bruno Renou, Julien Reveillon, Sawitree Saengkaew, and Gérard Gréhan. Experimental study of droplet temperature in a two-phase heptane/air v-flame. *Combustion and Flame*, 160(9) :1803–1811, 2013. citée en p. [35](#)
- [113] B. Lewis and G. Von Elbe. *Combustion, Flames and Explosions of Gases*. Academic Press, New York, third edition, 1987. citée en p. [29](#)
- [114] SC. Li. Spray stagnation flames. *Progress in Energy and Combustion Science*, 23(4) :303–347, 1997. citée en p. [39](#)
- [115] D. K. Lilly. A proposed modification of the germano sub-grid closure method. *Phys. Fluids* , 4(3) :633–635, 1992. citée en p. [60](#)
- [116] A. Linan. The asymptotic structure of counterflow diffusion flames for large activation energies. *Acta Astronautica* , 1 :1007, 1974. citée en p. [154](#), [156](#), [157](#)
- [117] C. Locci, O. Colin, D. Poitou, and F. Mauss. A tabulated, flamelet based no model for large eddy simulations of non premixed turbulent jets with enthalpy loss. *Flow, Turbulence and Combustion*, 94(4) :691–729, mar 2015. citée en p. [188](#)
- [118] E. Longmire and J. Eaton. Structure of a particle-laden round jet. *J. Fluid Mech.* , 236(1) :217, 1992. citée en p. [20](#)
- [119] Likun Ma and Dirk Roekaerts. Structure of spray in hot-diluted coflow flames under different coflow conditions : A numerical study. *Combustion and Flame*, 172 :20–37, 2016. citée en p. [40](#)
- [120] B. F. Magnussen and B. W. Hjertager. On the structure of turbulence and a generalised eddy dissipation concept for chemical reaction in turbulent flow. In *19th AIAA Aerospace Meeting*, St. Louis, 1981. citée en p. [161](#)
- [121] F. E. Marble and J. E. Broadwell. The coherent flame model for turbulent chemical reactions. Technical Report Tech. Rep. TRW-9-PU, Project Squid, 1977. citée en p. [163](#), [164](#)
- [122] F. Mashayek. Simulations of reacting droplets dispersed in isotropic turbulence. *AIAA Journal* , 37(11) :1420–1425, 1999. citée en p. [20](#)
- [123] F. Mashayek, F. A. Jaber, R. S. Miller, and P. Givi. Dispersion and polydispersity of droplets in stationary isotropic turbulence. *Int. J. Multiphase Flow* , 23(2) :337–355, 1997. citée en p. [20](#)
- [124] Farzad Mashayek. Numerical investigation of reacting droplets in homogeneous shear turbulence. *Journal of Fluid Mechanics*, 405 :1–36, 2000. citée en p. [39](#)

-
- [125] Enrica Masi and Olivier Simonin. Algebraic-closure-based moment method for unsteady eulerian simulations of non-isothermal particle-laden turbulent flows at moderate stokes numbers in dilute regime. *Flow, Turbulence and Combustion*, 92(1-2) :121–145, 2014. citée en p. [38](#)
- [126] A. Massol. *Simulation d'écoulement autour de réseaux de particules sphériques*. PhD thesis, INP Toulouse, 2004. citée en p. [71](#)
- [127] M. Massot, M. Kumar, M. D. Smooke, and A. Gomez. Spray counterflow diffusion flames of heptane : experiments and computations with detailed kinetics and transport. In *27th Symposium (International) on Combustion*, pages 1975–1983, 2001. citée en p. [40](#)
- [128] J. D. Mattingly. *Elements of gas turbine propulsion*. AIAA, 2nd edition, 2005. citée en p. [14](#)
- [129] C. Mueller, J. F. Driscoll, D. Reuss, M. Drake, and M. Rosalik. Vorticity generation and attenuation as vortices convect through a premixed flame. *Combust. Flame*, 112 :342–358, 1998. citée en p. [29](#)
- [130] A. Neophytou and E. Mastorakos. Simulations of laminar flame propagation in droplet mists. *Combust. Flame*, 156 :1627–1640, 2009. citée en p. [28](#), [29](#)
- [131] F. Nicoud, H. B. Toda, O. Cabrit, S. Bose, and J. Lee. Using singular values to build a subgrid-scale model for Large Eddy Simulations. *Physics of Fluids*, 23(8), 2011. citée en p. [60](#), [61](#), [127](#)
- [132] Department of Economic and Population Division Social Affairs. World population prospects : The 2015 revision, key findings and advance tables. Technical report, United Nations, 2015. citée en p. [11](#), [12](#)
- [133] Fabrice Onofri. Etat de l'art de la granulométrie laser en mécanique des fluides. *9ième Congrès Francophone de Vélocimétrie Laser. Bruxelles*, 2004. citée en p. [34](#)
- [134] T. P. Pandya and F. J. Weinberg. The study of the structure of laminar diffusion flames by optical methods. In *9th Symposium (International) on Combustion*, New York, USA, 1963. citée en p. [148](#)
- [135] R. Paoli and K. Shariff. Turbulent condensation of droplets : direct simulation and a stochastic model. *J. Atmos. Sci.*, DOI 10.1175/2008JAS2734.1, 2008. citée en p. [180](#)
- [136] S. Pascaud. *Vers la simulation aux grandes échelles des écoulements turbulents diphasiques réactifs : application aux foyers aéronautiques*. PhD thesis, INP Toulouse, 2006. citée en p. [41](#)
-

- [137] D. Paulhiac. *Modélisation de la combustion d'un spray dans un bruleur aéronautique*. PhD thesis, INP Toulouse, 2015. citée en p. [41](#), [67](#), [90](#), [92](#), [131](#)
- [138] D. Paulhiac, E Riber, and B Cuenot. Large eddy simulation of a lab-scale spray burner. *ILASS conference Proc.*, 2013. citée en p. [40](#)
- [139] Perrine Pepiot-Desjardins and Heinz Pitsch. An efficient error-propagation-based reduction method for large chemical kinetic mechanisms. *Combustion and Flame*, 154(1) :67–81, 2008. citée en p. [117](#)
- [140] N. Peters. Local quenching due to flame stretch and non-premixed combustion. *Combust. Sci. Tech.* , 30 :1–17, 1983. citée en p. [162](#)
- [141] N. Peters. Laminar flamelet concepts in turbulent combustion. In *21st Symp. (Int.) on Combustion*, pages 1231–1250. The Combustion Institute, Pittsburgh, 1986. citée en p. [162](#)
- [142] N. Peters. Turbulent modeling, scales and flame structure of premixed turbulent flames, 1988. citée en p. [30](#), [31](#)
- [143] N. Peters. The turbulent burning velocity for large-scale and small-scale turbulence. *J. Fluid Mech.* , 384 :107 – 132, 1999. citée en p. [62](#)
- [144] N. Peters. *Turbulent combustion*. Cambridge University Press, 2001. citée en p. [62](#), [160](#)
- [145] H. Pitsch. Large eddy simulation of turbulent combustion. *Ann. Rev. Fluid Mech.* , 38 :453–482, 2006. citée en p. [61](#)
- [146] T. Poinsot and D. Veynante. *Theoretical and Numerical Combustion*. Third Edition (www.cerfacs.fr/elearning), 2011. citée en p. [32](#), [61](#), [112](#), [151](#), [153](#), [155](#)
- [147] S. B. Pope. Computations of turbulent combustion : progress and challenges. In *23rd Symp. (Int.) on Combustion*, pages 591–612. The Combustion Institute, Pittsburgh, 1990. citée en p. [63](#), [163](#)
- [148] S. B. Pope. Lagrangian PDF methods for turbulent flows. *Ann. Rev. Fluid Mech.* , pages 23–63, 1994. citée en p. [63](#)
- [149] S.B. Pope. *Turbulent Flows*. Cambridge University Press, 2000. citée en p. [36](#), [52](#), [54](#), [91](#)
- [150] J. Pozorski, S. V. Apte, and V. Raman. Filtered particle tracking for dispersed two-phase turbulent flows. In *Proc. of the Summer Program* , pages 329–340. Center for Turbulence Research, NASA Ames/Stanford Univ., 2004. citée en p. [36](#)

-
- [151] R. H. Rangel and W. A. Sirignano. An evaluation of the point-source approximation in spray calculation. *Numerical Heat Transfer, Part A : Applications*, 16 :37–57, 1989. citée en p. [70](#)
- [152] Reetesh Ranjan, Achyut Panchal, Gregory Hannebique, and Suresh Menon. Towards numerical prediction of jet fuels sensitivity of flame dynamics in a swirl spray combustion system. In *52nd AIAA/SAE/ASEE Joint Propulsion Conference*, page 4895, 2016. citée en p. [41](#)
- [153] W. E. Ranz and W. R. Marshall. Evaporation from drops. *Chem. Eng. Prog.*, 48 :173, 1952. citée en p. [78](#)
- [154] J. Réveillon and F.-X. Demoulin. Effects of the preferential segregation of droplets on evaporation and turbulent mixing. *J. Fluid Mech.* , 583 :273–302, 2007. citée en p. [20](#), [39](#)
- [155] J. Réveillon and L. Vervisch. Analysis of weakly turbulent diluted-spray flames and spray combustion regimes. *J. Fluid Mech.* , 537 :317–347, 2005. citée en p. [25](#), [27](#)
- [156] E. Riber. *Développement de la méthode de simulation aux grandes échelles pour les écoulements diphasiques turbulents*. Phd thesis, INP Toulouse, 2007. citée en p. [41](#)
- [157] G. Ribert, N. Zong, V. Yang, L. Pons, N. Darabiha, and S. Candel. Counterflow diffusion flames of general fluids : Oxygen/hydrogen mixtures. *Combust. Flame* , 154 :319–330, 2008. citée en p. [148](#)
- [158] L. F. Richardson. *Weather Prediction by Numerical Process*. Cambridge University Press, cambridge edition, 1922. citée en p. [52](#)
- [159] Macole Sabat, Adam Larat, Aymeric Vié, and Marc Massot. On the development of high order realizable schemes for the eulerian simulation of disperse phase flows : a convex-state preserving discontinuous galerkin method. *The Journal of Computational Multiphase Flows*, 6(3) :247–270, 2014. citée en p. [38](#)
- [160] S Saengkaew, V Bodoc, G Lavergne, and G Grehan. Application of global rainbow technique in sprays with a dependence of the refractive index on droplet size. *Optics Communications*, 286 :295–303, 2013. citée en p. [35](#)
- [161] M. Sanjose. *Evaluation de la méthode Euler-Euler pour la simulation aux grandes échelles des chambres à carburant liquide*. Phd thesis, INP Toulouse, 2009. citée en p. [41](#)
- [162] M. Sanjosé, J.-M Senoner, F. Jaegle, B. Cuenot, S. Moreau, and T. Poinso. Fuel injection model for Euler-Euler and Euler-Lagrange large-eddy simulations of an evaporating spray inside an aeronautical combustor. *Int. J. Multiphase Flow* , 37(5) :514–529, June 2011. citée en p. [88](#)
-

- [163] Javier Marrero Santiago, Antoine Verdier, Gilles Godard, Alexis Vandiel, Gilles Cabot, Mourad Boukhalfa, and Bruno Renou. 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*, 2016. citée en p. [84](#), [126](#)
- [164] S. Sazhin. Advanced models of fuel droplet heating and evaporation. *Progress in Energy and Combustion Science*, 32 :162–214, 2006. citée en p. [73](#)
- [165] L. Schiller and A. Nauman. A drag coefficient correlation. *VDI Zeitung*, 77 :318–320, 1935. citée en p. [72](#)
- [166] A. Sengissen, A. Giauque, G. Staffelbach, M. Porta, W. Krebs, P. Kaufmann, and T. Poinsot. Large eddy simulation of piloting effects on turbulent swirling flames. *Proc. Combust. Inst.* , 31 :1729–1736, 2007. citée en p. [42](#)
- [167] J.-M. Senoner. *Simulations aux grandes échelles de l'écoulement diphasique dans un brûleur aéronautique par une approche Euler-Lagrange*. PhD thesis, INP Toulouse, 2010. citée en p. [41](#)
- [168] B. Shotorban and F. Mashayek. A stochastic model for particle motion in large-eddy simulation. *J. Turb.* , 7 :1–13, 2006. citée en p. [36](#)
- [169] P. Sierra. *Modeling the dispersion and evaporation of sprays in aeronautical combustion chambers*. PhD thesis, INP Toulouse, 2012. citée en p. [41](#)
- [170] O. Simonin. Combustion and turbulence in two phase flows. Lecture Series 1996-02, Von Karman Institute fo Fluid Dynamics, 1996. citée en p. [37](#)
- [171] Anubhav Sinha, R Surya Prakash, A Madan Mohan, and RV Ravikrishna. Airblast spray in crossflow—structure, trajectory and droplet sizing. *International Journal of Multiphase Flow*, 72 :97–111, 2015. citée en p. [35](#)
- [172] W. A. Sirignano. *Fluid dynamics and transport of droplets and sprays*. Cambridge University Press, 1999. citée en p. [73](#)
- [173] J. Smagorinsky. General circulation experiments with the primitive equations : 1. the basic experiment. *Mon. Weather Rev.* , 91 :99–164, 1963. citée en p. [59](#)
- [174] A.J. Smallbone, W. Liu, C.K. Law, X.Q. You, and H. Wang. Experimental and modeling study of laminar flame speed and non-premixed counterflow ignition of n-heptane. *Proc. Combust. Inst.* , 32 :1245–1252, 2009. citée en p. [91](#), [92](#)
- [175] D. B. Spalding. The combustion of liquid fuels. In *4th Symp. (Int.) on Combustion*, pages 847–864. The Combustion Institute, Pittsburgh, 1953. citée en p. [73](#)

-
- [176] D. B. Spalding. Development of the eddy-break-up model of turbulent combustion. In *16th Symp. (Int.) on Combustion*, pages 1657–1663. The Combustion Institute, 1976. citée en p. [161](#)
- [177] K. D. Squires and J. Eaton. Measurements of particle dispersion obtained from direct numerical simulations of isotropic turbulence. *J. Fluid Mech.*, 226 :1–35, 1991. citée en p. [20](#)
- [178] K. D. Squires and J. K. Eaton. Effect of selective modification of turbulence on two-equation models for particle-laden turbulent flows. *Transactions of the ASME*, 116 :778–784, 1994. citée en p. [20](#)
- [179] A. Stagni, L. Esclapez, P. Govindaraju, A. Cuoci, T. Faravelli, and M. Ihme. The role of preferential evaporation on the ignition of multicomponent fuels in a homogeneous spray-air mixture. *Proceedings of the Combustion Institute*, 2016. citée en p. [41](#)
- [180] G. G. Stokes. On the effect of the inertial friction of fluids on the motions of pendulums. *Trans. Cambridge Phil. Soc.*, 9 :8–23, 1851. citée en p. [71](#)
- [181] C. J. Sung, J. B. Liu, and C. K. Law. Structural response of counterflow diffusion flames to strain rate variations. *Combustion and Flame*, pages 1531 – 1539, 1995. citée en p. [148](#)
- [182] W. Sutherland. The viscosity of gases and molecular force. *Philosophical Magazine*, 5 :507–531, 1893. citée en p. [49](#)
- [183] S. Tonini and Gi. E. Cossali. A novel vaporisation model for a single-component drop in high temperature air streams. *International Journal of Thermal Sciences*, 75 :194–203, 2014. citée en p. [77](#)
- [184] H. Tsuji. Counterflow diffusion flames. *Prog. Energy Comb. Sci.*, 8 :93–119, 1982. citée en p. [148](#)
- [185] J. Urzay. A revised spray-combustion diagram of diffusion-controlled burning regimes in fuel-spray clouds. *Annual Research Briefs of the Center for Turbulence Research*, pages 193–198, 2011. citée en p. [25](#), [28](#)
- [186] J. Urzay, H. Pitsch, and A. Linan. Source terms for calculations of vaporizing and burning fuel sprays with non-unity lewis numbers in gases with temperature-dependent thermal conductivities. citée en p. [77](#)
- [187] L. Valino. A Field Monte Carlo Formulation for Calculating the Probability Density Function of a Single Scalar in a Turbulent Flow. *Flow, Turbulence and Combustion*, 60 :157–172, 1998. citée en p. [63](#)
-

- [188] A Verdier, B Renou, A Vandel, S Saengkaew, G Cabot, G Gréhan, and M Boukhalfa. Experimental characterization of fuel droplet temperature in a spray jet flame. In *Proceedings of the European Combustion Meeting*, 2015. citée en p. [84](#), [87](#)
- [189] A Verdier, J Marrero Santiago, A Vandel, G Godard, G Cabot, MA Boukhalfa, and B Renou. Experimental study of local extinction mechanisms on a spray jet flame. In *18th International Symposium on the Application of Laser and Imaging Techniques to Fluid Mechanics*, 2016. citée en p. [84](#), [87](#), [96](#), [99](#), [108](#), [123](#)
- [190] Antoine Verdier, Javier Marrero Santiago, Alexis Vandel, Sawitree Saengkaew, Gilles Cabot, Gerard Grehan, and Bruno Renou. Experimental study of local flame structures and fuel droplet properties of a spray jet flame. *Proceedings of the Combustion Institute*, 2016. citée en p. [84](#)
- [191] L. Vervisch, R. Hauguel, P. Domingo, and M. Rullaud. Three facets of turbulent combustion modelling : Dns of premixed v-flame, les of lifted nonpremixed flame and rans of jet flame. *J. Turb.* , 5 :004, 2004. citée en p. [64](#), [163](#)
- [192] Denis Veynante and Luc Vervisch. Turbulent combustion modeling. *Progress in Energy and Combustion Science*, 28(3) :193–266, March 2002. citée en p. [61](#)
- [193] A Vié, F Doisneau, and M Massot. On the anisotropic gaussian closure for the prediction of inertial-particle laden flows. *Communications in Computational Physics*, 17(1) :1–46, 2015. citée en p. [38](#)
- [194] Aymeric Vié, Benedetta Franzelli, Yang Gao, Tianfeng Lu, Hai Wang, and Matthias Ihme. Analysis of segregation and bifurcation in turbulent spray flames : A 3d counter-flow configuration. *Proceedings of the Combustion Institute*, 35(2) :1675–1683, 2015. citée en p. [40](#)
- [195] Aymeric Vié, Hadi Pouransari, Rémi Zamansky, and Ali Mani. Particle-laden flows forced by the disperse phase : Comparison between lagrangian and eulerian simulations. *International Journal of Multiphase Flow*, 79 :144–158, 2016. citée en p. [36](#)
- [196] Emmanuel Villermaux. Unifying ideas on mixing and atomization. *New Journal of Physics*, 6(1) :125, 2004. citée en p. [18](#)
- [197] Bert Vreman, Bernard J. Geurts, N. G. Deen, J. A. M. Kuipers, and J. G. M. Kuerten. Two- and Four-Way coupled EulerâLagrangian Large-Eddy simulation of turbulent Particle-Laden channel flow. *Flow, Turbulence and Combustion*, 82(1) :47–71, August 2008. citée en p. [188](#)
- [198] DH. Wacks, N Chakraborty, and E. Mastorakos. Spray stagnation flames. *Flow, Turbulence and Combustion*, 96 :573–607, 2016. citée en p. [28](#), [92](#)

-
- [199] Haiou Wang, Kun Luo, and Jianren Fan. Effects of turbulent intensity and droplet diameter on spray combustion using direct numerical simulation. *Fuel*, 121 :311–318, 2014. citée en p. [39](#)
- [200] Lian-Ping Wang and Martin R Maxey. Settling velocity and concentration distribution of heavy particles in homogeneous isotropic turbulence. *Journal of Fluid Mechanics*, 256 :27–68, 1993. citée en p. [20](#)
- [201] Y Wang and CJ Rutland. Effects of temperature and equivalence ratio on the ignition of n-heptane fuel spray in turbulent flow. *Proceedings of the Combustion Institute*, 30(1) :893–900, 2005. citée en p. [39](#)
- [202] Y Wang and CJ Rutland. Direct numerical simulation of ignition in turbulent n-heptane liquid-fuel spray jets. *Combustion and flame*, 149(4) :353–365, 2007. citée en p. [39](#)
- [203] C. Weber and Z. Angrew. The decomposition of a liquid jet. *Math. Mech.*, 11 :136–154, 1931. citée en p. [19](#)
- [204] C. R. Wilke. A viscosity equation for gas mixtures. *The Journal of Chemical Physics*, 18 :517–519, 1950. citée en p. [77](#)
- [205] B. A. Williams. Sensitivity of calculated extinction strain rate to molecular transport formulation in nonpremixed counterflow flames. *Combustion and Flame*, 124 :330–333, 2001. citée en p. [148](#)
- [206] F. A. Williams. Spray combustion and atomization. *Phys. Fluids* , 1 :541–546, 1958. citée en p. [37](#)
- [207] F. A. Williams. *Combustion Theory*. Benjamin Cummings, Menlo Park, CA, 1985. citée en p. [64](#), [160](#)
- [208] H. Yamashita, G. Kushida, and T. Takeno. A numerical study of the transition of jetdiffusion flames. *Proc. R. Soc. Lond. A* , 431 :301–314, 1990. citée en p. [106](#)
- [209] LI Zaichik and VA Pershukov. Influence of particles on the initial stage of homogeneous turbulence degeneration. *Journal of Engineering Physics and Thermophysics*, 58(4) :408–412, 1990. citée en p. [20](#)
- [210] B. T. Zoller, J. M. Allegrini, U. Maas, and P. Jenny. PDF model for NO calculations with radiation and consistent NO-NO₂ chemistry in non-premixed turbulent flames. *Combustion and Flame*, 158(8) :1591–1601, 2011. citée en p. [188](#)
-