



HAL
open science

Simulation aux grandes échelles de l'allumage diphasique des foyers aéronautiques

Matthieu Boileau

► **To cite this version:**

Matthieu Boileau. Simulation aux grandes échelles de l'allumage diphasique des foyers aéronautiques. Sciences de l'ingénieur [physics]. Institut National Polytechnique de Toulouse - INPT, 2007. Français. NNT: . tel-00282523

HAL Id: tel-00282523

<https://theses.hal.science/tel-00282523>

Submitted on 27 May 2008

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.

Numéro d'ordre : 2517

THÈSE

présentée pour obtenir le titre de

**DOCTEUR DE
L'INSTITUT NATIONAL POLYTECHNIQUE
DE TOULOUSE**

École doctorale : TYFEP

Spécialité : Dynamique des Fluides

Directeur de thèse : Bénédicte CUENOT

Par **Matthieu BOILEAU**

Simulation aux grandes échelles de l'allumage diphasique des foyers aéronautiques

Soutenue le 10 octobre 2007 devant le jury composé de :

I. GÖKALP	LCSR, Orléans	Rapporteur
L. VERVISCH	INSA de Rouen	Rapporteur
M. CAZALENS	SNECMA Villaroche	Examineur
C. COLIN	INP de Toulouse	Examineur
D. VEYNANTE	EM2C, Châtenay-Malabry	Examineur
P. VILLEDIEU	INSA de Toulouse	Examineur
B. CUENOT	CERFACS, Toulouse	Directeur de thèse

Réf. CERFACS : TH/CFD/07/103

Table des matières

Remerciements	7
Liste des symboles	9
1 Introduction générale	15
1.1 Contexte industriel	15
1.2 État de l’art en combustion diphasique	28
1.3 Objectif de l’étude et choix méthodologiques	37
1.4 Organisation du manuscrit	40
I Équations et modèles pour les écoulements turbulents diphasiques réactifs	41
2 Équations de conservation pour les écoulements gazeux réactifs	47
2.1 Équations et variables conservatives	47
2.2 Variables thermodynamiques	48
2.3 Équation d’état des gaz parfaits	49
2.4 Diffusion moléculaire multi-espèces	50
2.5 Diffusion de la chaleur	51
2.6 Coefficients de transport diffusif	51
2.7 Cinétique chimique	52
3 Équations de conservation pour la phase dispersée	55

TABLE DES MATIÈRES

3.1	Introduction	55
3.2	De la description statistique du spray aux équations de conservation eulériennes	59
3.3	Modèles de fermeture	69
4	Équations pour la LES diphasique réactive	81
4.1	Simulation aux grandes échelles (SGE ou LES)	81
4.2	Équations LES pour la phase gazeuse	82
4.3	Modèles de sous-maille	86
4.4	Équations LES pour la phase dispersée	88
4.5	Modèles de sous-maille pour la phase dispersée	93
4.6	Modèle de combustion turbulente	94
4.7	Modélisation de la chimie du kérosène	103
5	Approche numérique	113
5.1	Discrétisation <i>Cell-Vertex</i>	113
5.2	Schémas numériques	115
5.3	Modèles de viscosité artificielle	116
5.4	Maillages	118
5.5	Parallélisme et performance	120
5.6	Conditions aux limites	124
II	Interaction turbulence-évaporation-flamme	127
6	Évaporation de gouttes dans une turbulence homogène isotrope	131
6.1	Introduction	131
6.2	Description du cas test	136
6.3	Dynamique de la phase gazeuse	140
6.4	Bilans de masse et d'énergie	142

6.5	Comparaison avec l’approche lagrangienne	144
6.6	Analyse des mécanismes de production et de destruction de la variance de vapeur	147
6.7	Taux d’évaporation filtré en LES	154
6.8	Conclusion	155
7	Flammes laminaires diphasiques	157
7.1	Introduction	157
7.2	Flamme diphasique homogène	163
7.3	Flamme diphasique saturée	174
III	Combustion diphasique dans un secteur de foyer aéronautique	199
8	Écoulement réactif en régime stationnaire	203
8.1	Introduction	203
8.2	Configuration	203
8.3	Aérodynamique de l’écoulement non réactif	209
8.4	Topologie de l’écoulement et mécanisme de stabilisation	211
8.5	Structure de flamme	214
8.6	Conclusion	220
9	Allumage d’un secteur de chambre	223
9.1	Introduction	223
9.2	Configuration	224
9.3	Diagnostics temporels	226
9.4	Analyse des champs instantanés	229
9.5	Analyse locale 1D	232
9.6	Conclusion	234

TABLE DES MATIÈRES

IV Allumage d'un foyer complet de chambre de combustion	237
Introduction	239
LES of an ignition sequence in a full helicopter combustor	240
Compléments	263
Influence de la répartition de carburant liquide	263
Comparaison avec l'allumage en carburation gazeuse	264
Conclusion	266
Conclusion générale	269
Bibliographie	273
Annexes	293
A Bilan de masse et d'énergie dans la THI avec évaporation	293
B Article soumis à <i>Flow, Turbulence and Combustion</i>	295
Résumé	348

Remerciements

Je tiens à exprimer ici ma gratitude à toutes les personnes qui ont contribué à faire de mes années de thèse une expérience d'une grande richesse.

Je remercie Bénédicte Cuenot d'avoir encadré mon DEA et d'avoir accepté de diriger ma thèse. Je retiens particulièrement sa disponibilité, la pertinence de ses conseils et nos discussions scientifiques captivantes. Elle incarne pour moi une image dynamique et fascinante de la recherche et représente un modèle de réussite qui incite à poursuivre dans le métier de chercheur.

Je remercie également Thierry Poinot pour sa gestion remarquable de l'équipe CFD du CERFACS. Il donne aux jeunes chercheurs les moyens, l'énergie et le cadre nécessaires pour produire une recherche de haut niveau.

Mes remerciements vont naturellement à Iskender Gökalp et Luc Vervisch pour avoir accepté d'être rapporteurs de ma thèse ainsi qu'à Denis Veynante, Catherine Colin, Philippe Villedieu et Michel Cazalens pour avoir examiné ma soutenance.

Au sein du CERFACS, nombreux sont les membres actuels et anciens que je souhaite remercier, tant pour les collaborations professionnelles et scientifiques, que pour les nombreux moments d'amitié partagés. Avant tout, j'adresse mes remerciements chaleureux à Marie Labadens, secrétaire d'équipe, dont le dévouement quasi maternel est précieux pour la grande famille des thésards CFD. J'exprime également ma plus profonde reconnaissance aux équipes informatiques et administratives pour leur disponibilité et leur incroyable efficacité. Grâce à eux, informatique et administration ne sont plus synonymes de solitude et frustration !

Je salue ensuite l'ensemble des membres de l'équipe diphasique pour nos nombreux échanges et collaborations, me permettant de passer du statut de novice en diphasique à diphasicien premier grade... Merci à André Kaufmann (Grand Créateur), Jean-Baptiste Mossa (artisan du polydisperse), Stéphane Pascaud (collègue de bureau et beaucoup plus), Eléonore Riber (complice de bureau, de codage, d'anniversaires, ...), Laurent Gicquel (coauteur et compagnon précieux de l'aventure Makila), Nicolas Lamarque et Jacques Lavédrine (camarades de l'eulérien). Aux diphasiciens actuellement en thèse, Marta García, Guilhem Lacaze, Marlène Sanjosé, Felix Jaegler et Jean-Matthieu Senoner, j'adresse mes vœux de courage et de réussite pour leur recherche dans l'univers étonnant des écoulements à phase dispersée.

Hors de l'équipe diphasique, Gabriel Staffelbach (qui pour moi est bien plus que « Pablo ») et Yannick Sommerer sont la preuve que l'on peut faire le bien dans un monde sans goutte. Sans eux, pas de calcul

REMERCIEMENTS

sur plus de 128 processeurs... Merci à tous les deux. Merci également à Alois Sengissen pour m'avoir aidé dès ma première QPF (Snif!).

J'exprime toute mon amitié à Antoine Dauplain pour m'avoir attiré vers le CERFACS lors de mes premiers pas dans le monde de la recherche. Avec lui, j'ai partagé de nombreux instants de la vie de chercheur, des discussions scientifiques aux incontournables réunions ludiques en passant par de mémorables escapades cisalpines.

J'exprime également ma sincère gratitude à Alexandre Beer et Simon Mendez, membres d'un trio matinal qui, tous les mardi, sacrifiaient leur santé sur l'autel de l'écologie et bravaient la fraîcheur hivernale pour relier au trot (parfois au galop!) le centre ville à la météopole. Ceux-là mêmes qui, avec Patrick Schmitt, Guillaume Albouze, Guillaume Boudier, Jérôme Tournier, Sébastien Massart, Nicolas Daget, Jens-Dominik Müller, Matthieu Leyko et certains noms illustres déjà cités, ont partagé avec moi les nombreuses sorties running de midi cinq. Les plus téméraires se sont même laissés entraîner dans la fameuse aventure du Relais des Coteaux, en compagnie de Sébastien Roux (nageur contrarié et grand ami). Qu'ils soient tous remerciés pour ces bons moments passés ensemble.

Je salue également Valérie Auffray et Laurent Benoît, mes compagnons fidèles (jusqu'au bout!) d'Elégie soviétique et autres bizarreries cinématographiques, toujours prêts à partager d'intenses moments culturels et gastronomiques.

Je n'oublierai pas non plus les instants savoureux passés en compagnie d'Alexis Giauque, Charles Martin, Karine Truffin (copine d'ornithologie), Céline Prière, Yann Colin, ainsi que mes chers collègues de bureau : Stéphane Pascaud (encore lui!), Ludovic Thobois (venu du ch'Nord), Guilhem Lacaze (allumeur et coureur supersonique), Benoît Eaux (useur de pistons) et Kerstin Wieczorek (experte en combustion de feuerzangenbowle). Merci à ces derniers d'avoir rendu agréable l'atmosphère de ce petit espace où les esprits cogitent dans le ronronnement des ventilateurs.

Enfin, je remercie mes parents pour leur appui permanent ainsi que Stéphanie pour son soutien et son attention dans les mois les plus difficiles.

Liste des symboles

Lettres romaines

\dot{m}	débit massique des gaz dans le moteur	C_w	constante du modèle WALE
\dot{Q}_{ch}	puissance thermique de la combustion	d	diamètre de goutte
\dot{W}_c	puissance du compresseur	D_{ij}	coefficient de diffusion binaire
\dot{W}_t	puissance de la turbine	D_k	diffusivité moléculaire dans le mélange
\dot{W}_{net}	puissance nette du générateur de gaz	D_{th}	diffusivité thermique
\mathbb{C}	variation par les collisions particulières	E	densité spectrale d'énergie turbulente (chapitre 6)
\mathbb{T}	transport par la vitesse décorrélée	E	fonction d'efficacité (section 4.6)
\mathbb{U}_θ	terme additionnel dû au mouvement décorrélé	E	énergie totale massique
\mathcal{M}_{kj}	réactif ou produit k de la réaction j	E_a	énergie d'activation
\mathcal{Q}_j	taux d'avancement	e_s	énergie sensible
\mathcal{R}	constante universelle des gaz parfaits	F	facteur d'épaississement
\mathcal{T}	indice de Takeno	f_p	fonction densité de présence de particules
\check{q}_p	énergie cinétique turbulente mésoscopique	g_{ij}	gradient de vitesse résolu
\bar{S}_T	vitesse de flamme turbulente	$h_{s,corr}$	terme de correction d'enthalpie
A	constante pré-exponentielle	$h_{s,l}$	enthalpie sensible liquide
a_T	taux d'étirement	h_s	enthalpie sensible du mélange
c	vitesse du son	K	nombre d'onde
$C_{p,l}$	capacité calorifique liquide	k	énergie cinétique turbulente gazeuse
C_p	capacité calorifique à pression constante	K_{eq}	constante d'équilibre
C_{SF}	constante du modèle de Smagorinsky filtré	$K_{f,j}$	constante de la réaction directe
C_S	constante du modèle de Smagorinsky	$K_{r,j}$	constante de la réaction inverse
C_v	capacité calorifique à volume constant	L_v	enthalpie latente d'évaporation
		l_t	échelle intégrale de la turbulence
		M	nombre de réactions

LISTE DES SYMBOLES

N	nombre d'espèces	V_{cell}	volume de la cellule
n_l	densité volumique de particules	W	masse molaire
P	pression	w	3 ^{ème} composante de vitesse
P_2	pression entrée compresseur	W_θ	variation d'énergie décorrélée due à la traînée
P_3	pression entrée chambre	X	fraction molaire
P_{cc}	pression de Clausius-Clapeyron	Y	fraction massique
P_k	pression partielle de l'espèce k	z	fraction de mélange
q_p	énergie cinétique turbulente des particules	z_{st}	fraction de mélange stœchiométrique
q_{fp}	covariance fluide-particules	\mathbf{c}_p	vitesse dans l'espace des phases
q_{RUM}	énergie cinétique turbulente décorrélée	\mathbf{F}	tenseur des flux
q_s	énergie cinétique turbulente du mouvement relatif fluide-particule	\mathbf{f}	1 ^{ère} composante du tenseur des flux
R	coefficient de corrélation	\mathbf{F}_d	terme de traînée eulérien
r	constante du gaz	\mathbf{F}_p	force de traînée particulaire
S	senseur du modèle d'épaississement dynamique (section 4.6)	\mathbf{g}	2 ^{ème} composante du tenseur des flux
s	entropie sensible (chapitre 2)	\mathbf{h}	3 ^{ème} composante du tenseur des flux
s	rapport stœchiométrique	\mathbf{J}_k	flux diffusif de l'espèce k
S_c	vitesse de consommation	\mathbf{q}	flux de chaleur
$S_{i,j}$	tenseur des vitesses de déformation	\mathbf{s}	vecteur des termes sources gazeux
S_L	vitesse de flamme laminaire	\mathbf{s}_c	vecteur du terme source chimique
T	température	\mathbf{s}_θ	vecteur du terme source dû au mouvement décorrélé
T_4	température entrée turbine	\mathbf{s}_{g-l}	vecteur du terme source du gaz vers le liquide
T_{wb}	température d'équilibre (humide)	\mathbf{s}_{l-g}	vecteur du terme source du liquide vers le gaz
T_{cc}	température de Clausius-Clapeyron	\mathbf{u}	vecteur vitesse
T_{eb}	température d'ébullition	\mathbf{u}_s	vecteur vitesse relative gaz-particule
T_{ref}	température de référence pour l'enthalpie liquide	\mathbf{V}^c	vitesse de diffusion corrective
u	1 ^{ère} composante de vitesse	\mathbf{V}^k	vitesse de diffusion de l'espèce k
v	2 ^{ème} composante de vitesse	\mathbf{w}	vecteur des variables conservatives

\mathbf{x}	position dans l'espace des phases	Γ	étirement de sous-maille (section 4.6)
\dot{m}_p	taux d'évaporation particulaire	γ	exposant polytropique
Lettres grecques		Γ_θ	variation d'énergie décorrélée par évaporation
α	constante de la fonction d'efficacité	Γ_u	variation de quantité de mouvement mésoscopique par évaporation
α_l	fraction volumique de liquide	κ	charge massique de liquide
β	constante de la fonction d'efficacité	Λ	flux thermique eulérien par évaporation
χ	taux de dissipation scalaire	λ	conductivité thermique
χ_ϕ	fonction indicatrice de phase (section 3.1)	μ	viscosité dynamique
$\delta\check{R}_l^*$	partie déviatorique du tenseur décorrélé	μ_p	masse dans l'espace des phases
$\delta\check{R}_l$	tenseur du mouvement décorrélé	ν	viscosité cinématique
$\delta\check{S}_l$	tenseur triple du mouvement décorrélé	ν_{kj}''	coefficient stœchiométrique des produits
$\delta\theta_l$	énergie décorrélée	ν_{kj}'	coefficient stœchiométrique des réactifs
Δ_e	taille du filtre utilisé dans le modèle TFLES	ν_{kj}	coefficient stœchiométrique global
δ_f	épaisseur de flamme (section 1.2)	ν_t	viscosité turbulente de sous-maille
δ_s	distance moyenne inter-gouttes	Ω	fonction de présence du modèle TFLES (section 4.6)
δ_d	épaisseur de traînée	Ω	paramètre de mélange diphasique
δ_e	épaisseur globale d'évaporation	$\bar{\Sigma}$	densité de surface de flamme filtrée
δ_h	épaisseur de préchauffage	Φ	flux thermique eulérien par conduction
$\delta_{i,j}$	symbole de Kronecker	ϕ	richesse
δ_L	épaisseur thermique de la flamme	ϕ_g	richesse globale
δ_L^b	épaisseur de flamme de Blint	ϕ_l	richesse liquide
δ_v	épaisseur de vaporisation à l'ébullition	ϕ_t	richesse totale (gaz + liquide)
$\dot{\Omega}_F$	taux de réaction intégral du carburant	ϕ_i	flux thermique particulaire dans la phase i
$\dot{\omega}_{kj}$	taux de réaction de l'espèce k dans la réaction j	ρ	masse volumique
$\dot{\omega}_k$	taux de réaction de l'espèce k	τ_c	temps chimique
$\dot{\omega}_T$	taux de dégagement de chaleur	τ_f	temps de combustion (section 1.2)
η_K	échelle de Kolmogorov	τ_p	temps de relaxation particulaire
η_T	rendement thermodynamique	τ_q	temps de coincement
Γ	taux d'évaporation eulérien	τ_v	temps d'évaporation (section 1.2)

LISTE DES SYMBOLES

τ_ε	échelle de temps des grandes structures
τ_e	temps global d'évaporation
τ_h	temps de préchauffage
$\tau_{i,j}$	tenseur des contraintes
τ_v	temps de vaporisation à l'ébullition
Θ	variable d'avancement
Δ	taille du maillage et du filtre LES
ε	taux de dissipation
Ξ	facteur de plissement
ζ_p	température dans l'espace des phases
Nombres sans dimension	
B_M	nombre de Spalding
Da	nombre de Damköhler
Da_e	Damköhler global d'évaporation
Da_h	Damköhler de préchauffage
Da_v	Damköhler de vaporisation à l'ébullition
G	nombre de groupe
Le	nombre de Lewis
N	nombre de gouttes dans le nuage (section 1.2)
Nu	nombre de Nusselt
Pr	nombre de Prandtl
Pr_t	nombre de Prandtl turbulent
Re	nombre de Reynolds
Re_d	nombre de Reynolds moyen des gouttes
Re_p	nombre de Reynolds particulière
Re_t	nombre de Reynolds turbulent
S	nombre de Swirl
S	paramètre de séparation (section 1.2)
Sc_k	nombre de Schmidt de l'espèce k
Sc_k^t	nombre de Schmidt turbulent

Sh	nombre de Sherwood
St	nombre de Stokes
St_c	nombre de Stokes de la flamme

Opérateurs de moyenne / filtrage

$\langle \cdot \rangle_\Omega$	moyenne spatiale sur le volume Ω
$\langle \cdot \rangle_l$	moyenne d'ensemble massique sur les réalisations particulières (moyenne mésoscopique)
$\{ \cdot \}_l$	moyenne d'ensemble sur les réalisations particulières
\check{f}	idem $\langle \cdot \rangle_l$
\bar{f}	filtrage LES au sens de Reynolds
\hat{f}	filtrage LES au sens de Favre pour la phase dispersée
\tilde{f}	filtrage LES au sens de Favre pour le gaz

Indices

0	état initial
1	valeur dans les gaz frais
2	valeur dans les gaz brûlés
∞	à une distance infinie de la goutte
ζ	à la surface de la goutte
F	relatif au carburant
i	composante dans la direction i
j	relatif à la réaction j
k	relatif à l'espèce k
l	relatif à la phase liquide (grandeur eulérienne mésoscopique)
nF	relatif aux espèces autres que le carburant
O	relatif à l'oxydant
p	relatif à la particule (grandeur lagrangienne)
ev	relatif à l'évaporation

rms écart-type des fluctuations (*root mean square*)

Exposants

' relatif à la fluctuation

" relatif au mouvement décorrélé

0 état de référence

c relatif à la conduction thermique

I partie non diffusive

M relatif au mouvement mésoscopique

m valeur molaire

sat état saturé

t contribution de sous-maille

U relatif au mouvement décorrélé

V partie diffusive

ev relatif à l'évaporation

~ valeur tabulée

Abréviations

DNS Direct Numerical Simulation

DTF Dynamically Thickened Flame

FDP Fonction Densité de Présence

LES Large Eddy Simulation

LW Lax-Wendroff

MPI Message Passing Interface

NSCBC Navier-Stokes Characteristic Boundary Condition

PDF Probability Density Function

RANS Reynolds Averaged Navier-Stokes

RUM Random Uncorrelated Motion

SGS Sub-Grid Scale

TF Thickened Flame

TFLES TF model for LES

THI Turbulence Homogène Isotrope

TP-TFLES TFLES model for Two-Phase flames

TTGC Two-step Taylor-Galerkin Colin

Chapitre 1

Introduction générale

1.1 Contexte industriel

En raison de l'épuisement progressif des réserves de pétrole et des problèmes écologiques (pollution atmosphérique et réchauffement climatique), la combustion est concurrencée à juste titre par le développement de modes alternatifs de conversion d'énergie. Cependant, le domaine du transport aérien est un cas particulier où aucune source d'énergie n'est envisagée à moyen terme pour remplacer les hydrocarbures. En effet, la propulsion aéronautique nécessite un rapport puissance/poids que seule la combustion de carburant liquide est capable de fournir aujourd'hui. Ce constat justifie les efforts de recherche dans l'amélioration de la connaissance et de la maîtrise des procédés de combustion afin de concevoir des moteurs plus propres, plus économes et plus performants pour l'aéronautique.

Le travail de thèse présenté ici s'inscrit dans ce contexte via l'étude de la combustion dans les foyers de turbines à gaz. Dans un premier temps, cette introduction décrit la problématique spécifique des chambres de combustion d'hélicoptères qui font l'objet de la partie applicative de ce travail. Via des aspects historiques, technologiques et scientifiques, l'objectif est de montrer que le développement de ce type de foyers nécessite une recherche continue dans le domaine de la combustion turbulente et particulièrement sur les aspects liés aux écoulements diphasiques et à l'allumage. Dans un second temps, on présente un état de l'art en modélisation de la *combustion diphasique* dans le but de positionner ce travail par rapport à la recherche existante. Le choix de l'approche théorique et numérique est alors justifié avant de définir les objectifs précis de cette étude.

1.1.1 Brève histoire de l'hélicoptère

En 1907, en s'élevant d'1m50 au-dessus du sol à bord de son engin de 203 kg, le Français Paul Cornu réalise le premier vol piloté d'un hélicoptère. Par la suite, le concept est perfectionné par plusieurs inventeurs dont l'Argentin Raoul Pateras Pescara qui met au point le système de variation cyclique du pas de l'hélice. Néanmoins, jusqu'aux années 1940, l'hélicoptère reste une machine expérimentale. En 1942,

l'ingénieur américain d'origine ukrainienne Igor Sikorsky fabrique le premier appareil à être produit en série, le R4 (cf. Fig. 1.1), et en vend immédiatement 30 exemplaires à l'armée US. La configuration du R4 constituée d'un rotor principal unique stabilisé par un rotor anti-couple s'impose par la suite chez la plupart des constructeurs.



FIG. 1.1 - Igor Sikorsky en 1944 en compagnie d'un garde-côte américain à bord de son R4 HNSI « Hoverfly » (source : US Coast Guard)



FIG. 1.2 - Couverture de roman illustrant le rôle de l'hélicoptère lors de l'inondation des Pays-Bas en 1953

Une fois opérationnel, l'hélicoptère se retrouve rapidement engagé dans les conflits militaires comme lors des guerres de Corée et d'Indochine. Il est employé massivement durant la guerre d'Algérie pour le transport rapide de petits contingents. La guerre du Vietnam (surnommée parfois « guerre des hélicos ») invente le concept d'hélicoptère de combat avec le Bell AH-1. Actuellement, le domaine militaire représente 53% des ventes du leader mondial Eurocopter (chiffres 2006).

Cette image plutôt martiale est modérée par le rôle des hélicoptères dans la protection des populations civiles. En particulier, les missions de sauvetage sont devenues très vite leur spécialité (cf. Fig. 1.2). Au cours de l'été 2005, après le passage de l'ouragan Katrina, la moitié des 24 000 personnes secourues en situation de détresse dans les zones inondées l'ont été par hélicoptère. Les 3 et 4 août 2006, lors d'un typhon touchant la région de Hong Kong, 91 personnes ont été sauvées en mer grâce à l'intervention d'un seul hélicoptère Super Puma évoluant dans des vents à 170 km/h. Les hélicoptères jouent également un rôle dans la lutte aérienne contre les incendies de forêt. Leur aptitude au vol stationnaire leur permet de remplir leurs réservoirs d'eau à proximité des lieux d'incendie et d'opérer des largages précis. Ces missions de sauvegarde des vies humaines ont fait dire à Igor Sikorsky que « l'hélicoptère est la seule machine qui sauve plus de vie qu'elle n'en coûte ».

1.1.2 Rôle de la turbine à gaz

Depuis la sortie du Sikorsky R4, les progrès technologiques des hélicoptères sont en grande partie liés aux avancées en matière de motorisation. Jusqu'au milieu des années 1950, les hélicoptères étaient propulsés par des moteurs à piston en étoile ou en ligne. En 1955, Sud Aviation met au point l'Alouette II, le premier hélicoptère équipé d'une turbine à gaz, l'Artouste II (410 kW) fabriquée par Turboméca. Ce type de moteur se généralise rapidement car il est particulièrement adapté aux hélicoptères : il possède un rapport puissance/poids élevé et une grande souplesse, en partie grâce à l'utilisation de la turbine libre qui permet des variations de couple pour une vitesse de rotation constante du rotor de sustentation.

Quelques notions de thermodynamique permettent de comprendre les principaux paramètres influençant la performance des turbines à gaz. Comme l'illustre la Fig. 1.3, leur fonctionnement est basé sur le cycle de Brayton (ou cycle de Joule). Dans le cas idéal, le flux \dot{m} d'air dans le moteur subit les transformations suivantes :

1. compression isentropique à travers le compresseur : l'écoulement reçoit le travail \dot{W}_c ;
2. combustion isobare dans la chambre de combustion : l'écoulement reçoit la chaleur \dot{Q}_{ch} dégagée par la réaction chimique ;
3. détente isentropique dans la turbine : l'écoulement libère le travail \dot{W}_t .

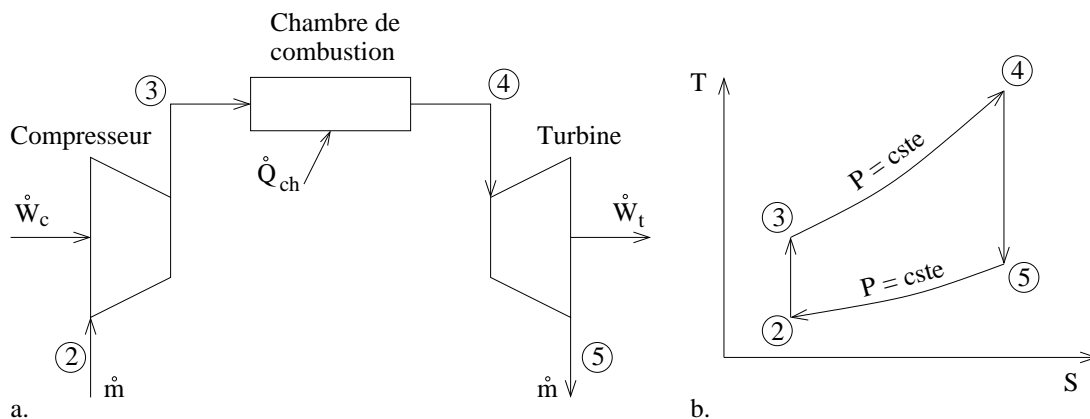


FIG. 1.3 - Schéma simplifié du cycle thermodynamique d'une turbine à gaz (a.). Cycle idéal de Brayton-Joule correspondant dans le diagramme entropie-température (b.). (D'après Mattingly [151])

Les points 2 et 5 étant déterminés par les conditions atmosphériques, le dimensionnement du moteur est globalement fixé par le débit massique \dot{m} et les points 3 et 4. Pour \dot{m} donné, la puissance nette $\dot{W}_{net} = \dot{W}_t - \dot{W}_c$ dégagée par le moteur est proportionnelle à la surface limitée par la courbe 2-3-4-5. Augmenter le rapport de pression P_3/P_2 dans le compresseur et la température en entrée de turbine T_4 permet donc d'augmenter la puissance spécifique \dot{W}_{net}/\dot{m} , un des critères de performance principal du moteur. Ces deux paramètres sont toutefois limités par des contraintes technologiques (cf. section 1.1.4).

Pour un rapport T_4/T_2 donné, il existe un rapport P_3/P_2 qui maximise \dot{W}_{net} . Par ailleurs, la consommation spécifique dépend du rendement thermodynamique du cycle $\eta_T = \dot{W}_{net}/\dot{Q}_{ch}$ qui est lié au

rapport de pression P_3/P_2 suivant la relation : $\eta_T = 1 - (P_2/P_3)^{(\gamma-1)/\gamma}$ où γ est l'exposant polytropique du gaz. Ainsi, l'augmentation du rapport de pression tend à produire un moteur plus économe en carburant. Par rapport au cycle idéal, les transformations comportent des irréversibilités qui se traduisent par des pertes de charge et des pertes thermiques réduisant η_T et \dot{W}_{net}/\dot{m} .

Depuis leur début dans les années 1930-1940, les turbines à gaz ont connu de très fortes améliorations en terme de :

- rendement global,
- puissance absolue,
- rapports puissance sur masse, volume et section transversale,
- durée de vie, endurance et fiabilité,
- réduction des émissions polluantes,
- réduction du bruit, etc.

Ces progrès ont été accomplis principalement grâce à :

- L'amélioration du compresseur par l'augmentation de son rapport de pression et de son rendement polytropique.
- L'amélioration de la chambre de combustion par une meilleure connaissance et maîtrise de l'écoulement et de la combustion. Ainsi, la masse, l'encombrement, les pertes de charge ont été réduits et l'efficacité de combustion (combustible brûlé sur combustible injecté) en régime de croisière est très proche de 100%. Ces progrès doivent beaucoup à la recherche scientifique en combustion.
- L'augmentation du rendement polytropique de la turbine et surtout de sa température d'entrée (T_4) grâce aux progrès des matériaux et des techniques de refroidissement.

1.1.3 Technologie des turbines d'hélicoptères et de leurs foyers

Configuration typique

Le développement des turbines à gaz a produit différentes configurations de moteurs en fonction de l'application. Dans le cas des hélicoptères, on parle de turbomoteurs (*turboshaft* en anglais) : la puissance thermodynamique résiduelle \dot{W}_{net} est intégralement convertie en énergie mécanique de rotation pour assurer la sustentation et la propulsion via le rotor. La puissance de ces moteurs est plus faible que celle des turbo-réacteurs, ce qui conduit souvent au choix technologique suivant :

1. un compresseur comportant peu d'étages dont le dernier est généralement une roue centrifuge ;
2. une chambre de combustion annulaire à flux inversé ;
3. une turbine haute-pression montée sur l'arbre du compresseur et une turbine basse-pression libre liée au rotor.

Cette configuration est typique d'un moteur d'hélicoptère moderne, tel que le moteur Ardiden illustré sur la Fig. 1.4.

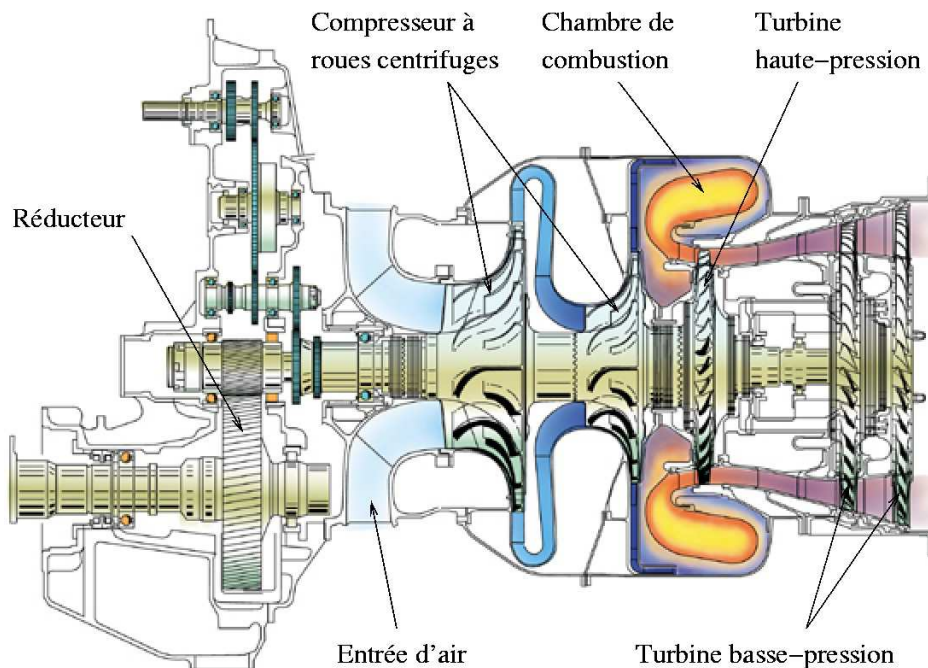


FIG. 1.4 - Vue en coupe du moteur Ardiden de Turboméca (©Turboméca). L'air frais est admis par l'entrée d'air et subit la compression des deux étages de roues centrifuges. La combustion isobare a lieu dans une chambre annulaire à flux inversé. La détente se fait à travers la turbine haute-pression couplée au compresseur puis à travers les deux étages de la turbine de puissance (basse pression) couplée au réducteur (à gauche) via un renvoi par arbre coaxial.

Chambre de combustion

La Fig. 1.5 illustre les principaux composants d'une chambre de combustion à flux inversé. L'écoulement d'air issu de la roue de compresseur centrifuge est ralenti et redressé dans la direction axiale par le diffuseur. En contournant la paroi du foyer, il est prélevé par divers orifices ayant des rôles spécifiques :

- l'injecteur et les trous d'air primaire alimentent la zone primaire où est localisée la flamme ;
- les trous d'air de dilution abaissent la température des gaz brûlés à un niveau acceptable pour la turbine ;
- les films et parois multiperforées créent une couche d'air frais qui limite le flux de chaleur des gaz brûlés vers la paroi du foyer.

L'injecteur a un double rôle : il pulvérise le carburant en générant un spray de fines gouttelettes et génère une zone de recirculation qui augmente le temps de résidence des gaz brûlés et stabilise la combustion. Enfin, le coude redresse l'écoulement issu du foyer dans le sens principal avant qu'il n'entre dans le distributeur de la turbine haute-pression.

Pour les puissances modérées des turbines d'hélicoptères, la chambre à flux inversé est intéressante à plusieurs titres :

- le compresseur centrifuge amène l'écoulement d'air sur un rayon important par rapport à l'axe de rotation. La géométrie coudée permet de ramener cet écoulement au rayon de la turbine haute-pression en conservant un faible encombrement dans la direction axiale.
- les grandes vitesses de rotation de ces petits moteurs nécessitent une faible longueur de l'arbre qui couple la turbine au compresseur afin de limiter les vibrations.
- la disposition géométrique des injecteurs facilite leur accès.

L'inconvénient principal est le rapport surface/volume élevé qui requiert un flux d'air de refroidissement plus important. De plus, le trajet de l'air qui refroidit les parois du rayon interne est complexe (cf. Fig. 1.5), ce qui génère des pertes de charge et rend plus difficile la répartition des débits.

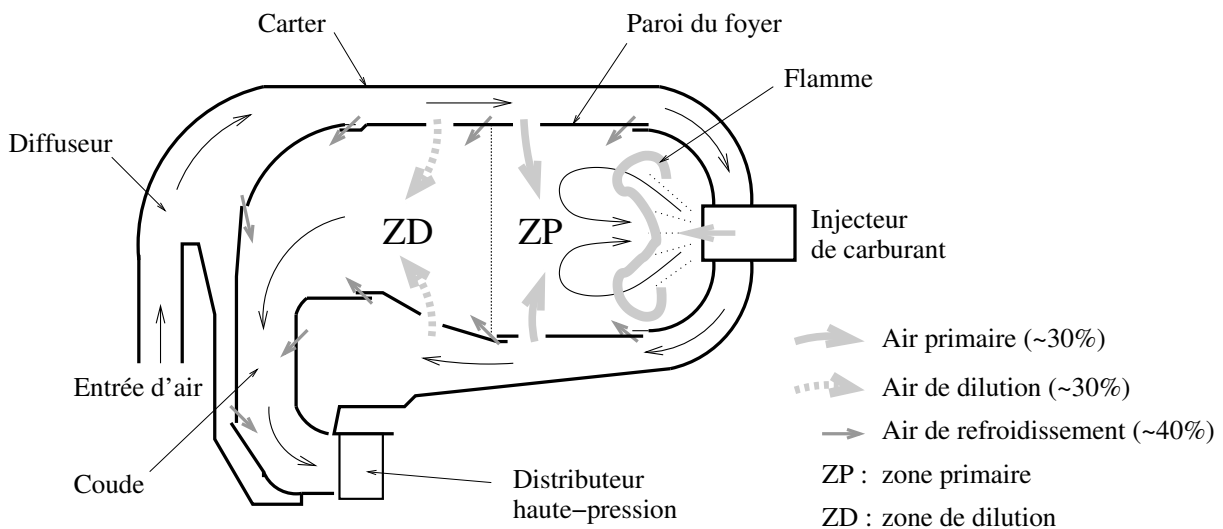


FIG. 1.5 - Coupe schématique d'une chambre de combustion annulaire à flux inversé (d'après Lefebvre [131])

Système d'injection

Le système d'injection représente un des composants essentiels de la chambre de combustion. En plus de fournir le carburant, il joue un rôle important dans l'aérodynamique de l'écoulement interne. Dans les moteurs actuels, on rencontre principalement trois types d'injection (cf. Fig. 1.6) :

L'injection à pré-vaporisation. Le carburant est injecté dans un flux d'air circulant dans des tubes immergés dans la flamme. Au contact de ces tubes chauffés par rayonnement et par convection par les gaz chauds, le carburant s'évapore et le mélange air-vapeur est injecté dans la zone primaire. Ce système a l'avantage d'être simple et de réduire la formation des suies. Toutefois, il peut poser des problèmes lors des variations de débit de carburant et la pression de chambre (P_3) est limitée par la capacité à refroidir les parois du tube de pré-vaporisation. Durant le cycle de démarrage, les tubes sont trop froids pour permettre l'évaporation et des allumeurs-torches sont nécessaires pour initier l'allumage.

L'injection centrifuge. Cette technique est particulière aux chambres dites de « type Turboméca ». Elle consiste à pulvériser le carburant par centrifugation au moyen d'une roue munie de gicleurs entraînée par l'arbre du générateur de gaz. Son avantage est de réaliser une atomisation de qualité sans circuit de carburant haute pression quel que soit le régime du moteur et la viscosité du carburant. Ce système peut toutefois présenter des difficultés pour le rallumage et le refroidissement des parois.

L'injection aérodynamique par préfilm (*prefilming airblast*). Le carburant s'écoule sous forme d'un film liquide arraché par un jet vrillé interne puis atomisé par cisaillement avec un jet vrillé externe coaxial (généralement contra-rotatif). Ce système fonctionne très bien à des pressions d'air élevées et génère un spray fin qui produit une flamme bleue sans suie. Il peut néanmoins se montrer difficile à allumer à faible pression et température.

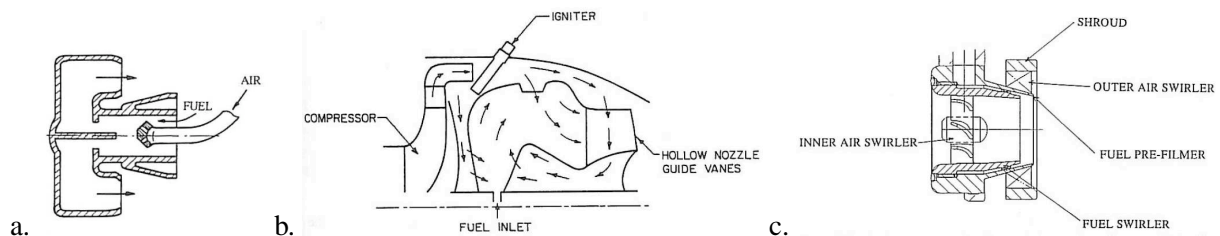


FIG. 1.6 - Principaux types d'injecteurs utilisés dans les moteurs d'hélicoptères : à pré-vaporisation (a.), à roue centrifuge (b.), aérodynamique par préfilm (c.) (extraits de Lefebvre [131])

Système d'allumage

Comme le montre la section 1.1.4, l'allumage du foyer représente un problème crucial pour les constructeurs. À l'heure actuelle, deux technologies d'allumeurs sont majoritairement employées :

La bougie d'allumage. L'idée est de concentrer une faible quantité d'énergie dans un volume restreint et un temps très court afin de porter le mélange inflammable à haute température. On génère alors un noyau d'allumage, capable de se propager si le dégagement de chaleur surpasse les pertes par diffusion thermique et par évaporation du carburant. Les bougies d'allumage de turbines à gaz sont constituées de deux électrodes coaxiales dont l'extrémité est séparée par un semi-conducteur. Une unité électrique spécifique génère une tension élevée qui induit un premier courant de décharge à travers le semi-conducteur afin d'initier l'ionisation du gaz environnant. Une fois ionisé, ce gaz reçoit la décharge principale sous la forme d'un arc électrique intense. Le circuit d'allumage génère entre 1 et 250 cycles par seconde et la quantité d'énergie dégagée à l'extrémité de l'allumeur à chaque cycle est de l'ordre du Joule. Toutefois, en raison de pertes par conduction dans la bougie, par rayonnement et par onde de choc dans le gaz, seule une petite partie de cette énergie est transférée au mélange inflammable. La probabilité de succès de la création du noyau initial d'allumage dépend de cette quantité d'énergie et de la durée de la décharge. Dans le même temps, l'énergie et le nombre de cycles de décharge influencent directement la durée de vie de la bougie en raison de l'érosion provoquée par l'arc électrique. Le dimensionnement de la bougie est donc un compromis entre son efficacité et sa longévité.

L'allumeur-torche. Le principe consiste à associer une bougie d'allumage et un injecteur auxiliaire pressurisé dont l'allumage est facile dans les conditions de démarrage. Cet allumeur crée une flamme-torche continue qui allume le spray de carburant produit par l'injecteur principal. Ce dispositif est couramment employé dans les turbines d'hélicoptère et il est obligatoire pour les foyers à pré-vaporisation. Son principal problème est la production de coke sur l'orifice de l'injecteur. Pour l'éviter, l'injection est coupée après l'allumage de la chambre et le logement de l'allumeur est purgé en continu par un flux d'air frais.

À l'avenir, des systèmes comme l'allumage par laser (LIS pour *laser induced spark*) sont envisagés pour leur capacité à allumer des mélanges plus pauvres que les systèmes conventionnels. Bien que des recherches soient encore nécessaires pour le rendre applicable aux turbines à gaz, l'allumage par laser suscite un intérêt car la tendance actuelle conduit à diminuer la richesse des foyers pour réduire les émissions d'oxydes d'azote.

1.1.4 Critères de conception des turbines aéronautiques

D'un point de vue général, les fabricants de turbines aéronautiques recherchent l'amélioration des performances, de la fiabilité et de la maintenabilité (c'est-à-dire son aptitude à être maintenu en état de fonctionnement) et la réduction des coûts d'acquisition et d'opération.

En conception, l'objectif d'amélioration des performances se heurte à plusieurs contraintes technologiques. Ainsi, l'accroissement de la puissance spécifique par l'augmentation de la température d'entrée de turbine est limitée par la résistance thermo-mécanique de la turbine haute-pression. Cette limite peut être repoussée par les techniques de refroidissement et l'utilisation de matériaux plus performants mais aussi par un meilleur contrôle de l'écoulement dans la chambre de combustion. Dans ce dernier cas, les outils de simulation numérique en mécanique des fluides ont un rôle à jouer dans le processus de conception. À ce sujet, un calcul LES réactif a été réalisé au cours de cette thèse pour répondre à un besoin de Turboméca sur le moteur Makila 2A. Le but était d'étudier l'influence d'un changement de géométrie de la chambre de combustion sur la répartition de température à l'entrée de la turbine haute-pression. Au niveau des pales de turbine, le profil radial de température moyenné en azimut (appelé FRT pour *fonction de distribution radiale de température*) doit être rigoureusement contrôlé car la limite de fluage des matériaux constituant les pales diminue avec la température. Le profil désiré par les concepteurs de la turbine comporte généralement des minima de température en pied de pale où les contraintes mécaniques sont les plus fortes et en tête de pale où le refroidissement est difficile. Les concepteurs de la chambre de combustion doivent ensuite s'assurer que le profil de température du moteur réel est proche de ce profil supposé pour le dimensionnement de la turbine. À l'heure actuelle, la méthode de prédiction de la FRT consiste à calculer l'écoulement réactif dans la chambre de combustion au moyen d'outils 3D de type RANS (pour *Reynolds average Navier-Stokes*). Par rapport au RANS, les méthodes de type LES (pour *large eddy simulation* ou simulation aux grandes échelles) promettent d'améliorer significativement les prédictions et suscitent un intérêt grandissant chez les constructeurs. L'étude de la chambre de combustion Makila, menée en collaboration avec L. Gicquel, est un exemple d'application de la LES au problème industriel décrit ci-dessus. Pour des raisons de confidentialité, ce travail n'est pas développé dans le manuscrit et seules deux figures extraites du rapport de contrat [88] sont montrées ici (cf. Fig. 1.7). L'étude a mis en évidence l'importance de la modélisation précise des entrées d'air et de carburant (roue d'injection, trous, films, surfaces multiperforées, tubes de mélange, etc.). La Fig. 1.7a

illustre la complexité de l'écoulement : la flamme, représentée par une iso-surface de température, interagit fortement avec les jets d'air qui l'alimentent¹. La Fig. 1.7b montre la distribution de température dans une section proche de la sortie. En plus d'améliorer la prédiction du profil moyen de température, la LES fournit les fluctuations de l'écoulement. L'industriel pourrait utiliser cette information pour évaluer les contraintes thermiques instationnaires auxquelles sont exposées les pales de turbine. Ce type d'étude a été poursuivi par Boudier *et al.* [33] à travers une comparaison LES, RANS et expérience dans une chambre Turboméca équipée d'injecteurs à pré-vaporisation. Enfin, sur le même sujet, le groupe Safran s'intéresse à une méthode d'optimisation du FRT basée sur le calcul numérique de l'écoulement réactif dans la chambre de combustion (cf. thèse en cours de F. Duchaine au Cerfacs [66, 67]).

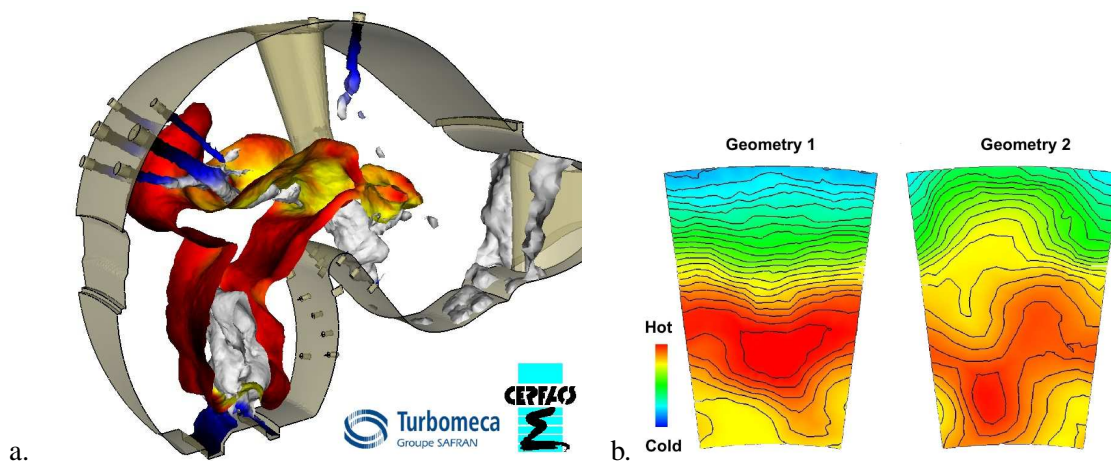


FIG. 1.7 - a) Calcul LES réactif d'un secteur de chambre Turboméca Makila 2A : iso-surface de température colorée par la vitesse (rouge < jaune) représentant la flamme et iso-surfaces de vitesse colorées par la température (bleu < gris) représentant certains jets d'air et le jet de carburant (zone inférieure). b) Champs instantanés de température en sortie de chambre pour deux variantes de géométrie.

D'une manière générale, le dimensionnement d'un moteur aéronautique est dicté par des contraintes diverses dont certaines sont citées ici :

Domaine de vol. Le fonctionnement stable du moteur est prévu dans des conditions de température et de pression (donc d'altitude) qui définissent un domaine de vol.

Domaine de rallumage. L'extinction de la chambre de combustion peut survenir lors de défaillances techniques (pompage, défaut de carburant, etc.) ou dans des conditions atmosphériques hostiles comme lors d'une ingestion excessive d'eau ou de glace. Dans ce cas, le système d'allumage doit assurer un rallumage immédiat du moteur sous certaines conditions de vol (altitude et vitesse) et de température.

Régimes de fonctionnement. À partir du profil de vol d'un appareil donné, on définit un profil d'utilisation pour le moteur où une durée d'opération est attribuée pour chaque régime de puissance. Ainsi, un moteur est dimensionné pour son régime de croisière mais aussi pour le régime de décollage

¹une version animée de cette vue est disponible sur : <http://www.cerfacs.fr/cfd/movies/Makila.mov>

et pour les régimes d'urgence. Par ailleurs, les changements de régime sont limités par la marge vis-à-vis de la ligne de pompage (rapport de pression P_3/P_2 en fonction du débit d'air) et par les limites d'extinction de la chambre de combustion.

Température des gaz chauds. La résistance mécanique des matériaux constituant les pales de turbines décroît avec la température et impose une limite à la température T_4 des gaz produits par la chambre de combustion (cf. ci-dessus).

Limite de démarrage. Durant la séquence de démarrage, l'arbre du générateur de gaz est entraîné par un moteur électrique, le carburant est injecté dans la chambre et le mélange air-carburant est enflammé par un allumeur. En fonction des conditions atmosphériques et de la température initiale du moteur, des limites de durée voire de succès sont fixées pour chaque phase et en particulier l'allumage. De plus, la séquence de démarrage est généralement associée à un pic de température des gaz (T_4) qu'il est nécessaire de prendre en compte.

Émissions de polluants. À l'heure actuelle, les normes d'émissions polluantes concernent uniquement les avions civils propulsés par des turbo-soufflantes de plus de 26.7 kN de poussée [131]. Toutefois, les industriels anticipent le durcissement et l'extension future de ces normes à l'ensemble des appareils en étudiant des solutions technologiques comme les injecteurs LPP (pour *lean pre-mixed prevaporized* ou pauvres prémélangés pré-vaporisés). Les préoccupations concernent surtout les émissions de monoxyde de carbone (CO) et d'hydrocarbures imbrûlés (UHC) produites aux faibles puissances et les émissions d'oxydes d'azote (NO_x) produites aux puissances élevées.

Parmi ces critères, le domaine de rallumage figure parmi les plus contraignants et demande d'importants efforts lors de la phase de développement. En particulier, la certification nécessite de coûteux essais sur des bancs simulant les conditions d'altitude. Les performances du démarrage sont également importantes car elles limitent les conditions atmosphériques (altitude et température) dans lesquelles l'appareil peut espérer stationner. Pour un hélicoptère dont le moteur est froid, démarrer sur un altiport par des températures négatives peut-être particulièrement délicat. La prédiction et l'amélioration de l'allumage représente donc un besoin permanent de la part des constructeurs de turbines aéronautiques. Ces tâches nécessitent de comprendre en détail les facteurs physiques et technologiques qui influencent le phénomène.

1.1.5 Performance en allumage

Un allumage est considéré comme réussi quand le foyer est capable de maintenir une combustion stable une fois que le dispositif d'allumage est éteint. Le succès d'un allumage pour différentes conditions de débit d'air et de richesse définit une courbe (cf. Fig. 1.8) qui représente la performance du foyer en terme d'allumage. Comme le montre la Fig. 1.8, la courbe limitant le domaine où l'allumage est possible se situe à l'intérieur de la courbe de stabilité du foyer. Les performances d'allumage dépendent donc des facteurs influençant la stabilité mais également de facteurs propres au phénomène d'allumage.

Pour comprendre le rôle de chacun de ces facteurs, il est nécessaire de détailler le processus d'allumage. Pour un foyer typique de chambre annulaire, ce processus se décompose en trois phases principales (cf. Fig. 1.9) :

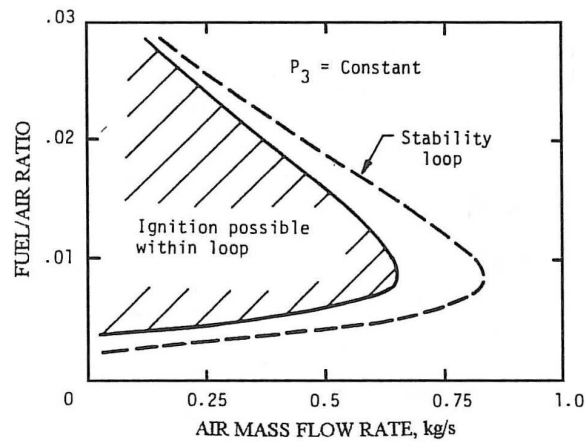


FIG. 1.8 - Courbe d'allumage à pression constante d'un foyer aéronautique typique (extrait de Lefebvre [131])

Phase 1. Dans le cas d'un allumage par bougie, l'étincelle génère un noyau d'allumage suffisamment volumineux et chaud pour être capable de se propager. Dans le cas d'un allumage par allumeur-torche, le jet de carburant auxiliaire est allumé par la bougie et produit une flamme-torche stationnaire.

Phase 2. Le noyau d'allumage ou le front de la flamme-torche se propage vers l'injecteur principal et se stabilise dans la zone primaire. Alors qu'une chambre annulaire comporte une vingtaine d'injecteurs principaux, les allumeurs sont généralement au nombre de deux. Suivant leur position, entre deux et quatre injecteurs principaux peuvent donc être allumés au cours de cette phase.

Phase 3. La flamme se propage d'un injecteur principal à son voisin jusqu'à l'allumage complet du foyer.

Le processus d'allumage décrit ci-dessus est influencé par les facteurs suivants :

L'allumeur. Pour un allumage par bougie, le succès de la *phase 1* dépend fortement des caractéristiques de l'arc électrique :

- l'énergie libérée lors de la décharge influence directement la taille et la température du noyau d'allumage ;
- la durée de la décharge comporte un optimum (de l'ordre de $100 \mu s$) qui minimise l'énergie nécessaire à la création du noyau. À énergie constante, si la décharge est trop courte, les pertes d'énergie lors de l'ionisation (cf. section 1.1.3) sont élevées. Si elle est trop longue, l'énergie déposée est perdue par convection dans l'écoulement.
- la position par rapport à l'écoulement doit respecter plusieurs conditions : une richesse de mélange favorable à l'allumage, un mouillage faible de la bougie par le spray et une vitesse d'écoulement modérée pour limiter les pertes convectives. Enfin, vis-à-vis de la *phase 2*, la bougie doit nécessairement être placée dans la zone primaire afin que le noyau d'allumage ait tendance à être convecté vers l'injection par la recirculation du jet principal.

Dans le cas d'un allumeur-torche, le succès de la création de la flamme-torche (*phase 1*) dépend de la qualité d'atomisation du spray produit par l'injecteur de démarrage. En général, cette condition

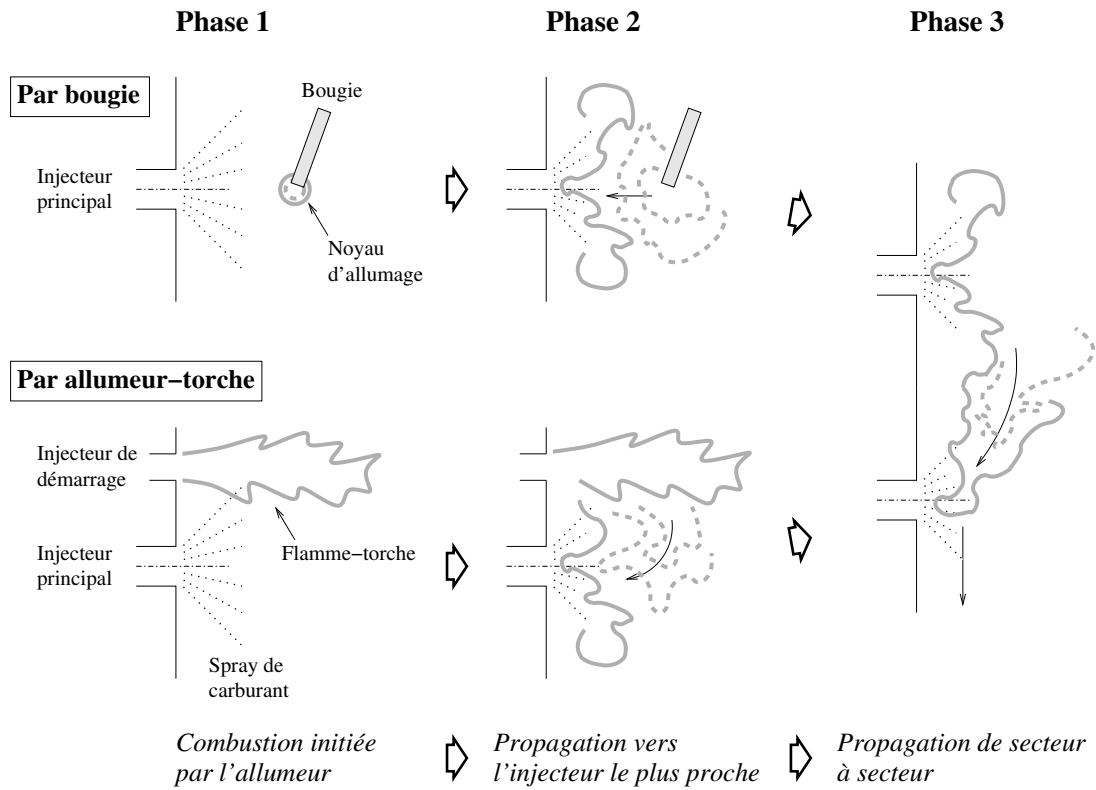


FIG. 1.9 - Processus d'allumage d'une chambre annulaire en trois phases pour un allumage par bougie ou par allumeur-torche

est remplie et l'étape n'est pas limitante dans le processus d'allumage. La *phase 2* dépend de la puissance thermique dégagée par la flamme-torche et de sa position par rapport au jet principal : les gaz chauds produits par l'allumeur doivent être mis en contact avec le spray de carburant principal.

L'écoulement gazeux. Dans le gaz, les principales variables influençant l'allumage sont les suivantes :

- *pression de l'air* : bien que l'évaporation soit favorisée par une faible pression, les effets de la réaction chimique sont prépondérants et la performance d'allumage diminue avec la pression.
- *température de l'air* : en diminuant, la température de l'air défavorise l'allumage par réduction du taux d'évaporation et de réaction.
- *vitesse de l'air* : pour un allumage par bougie, l'augmentation de la vitesse a généralement un effet défavorable sur la *phase 1*. Un allumeur-torche y est moins sensible puisqu'il génère sa propre dynamique de jet. La *phase 2* est généralement défavorisée par une vitesse élevée qui diminue le temps laissé au noyau ou à la flamme-torche pour se propager dans la zone primaire avant d'être convecté vers l'amont. Toutefois, pour un moteur donné, une augmentation de vitesse est associée à une augmentation de température (due au travail du compresseur) et à une meilleure atomisation du spray, deux effets augmentant la probabilité d'allumage.
- *intensité de turbulence* : en augmentant les pertes thermiques par diffusion, une intensité de turbulence élevée a tendance à défavoriser l'allumage.

Le spray de carburant. Les propriétés du spray jouent un rôle crucial dans toutes les phases de l'allumage :

- *propriétés physiques du carburant liquide* : la viscosité, en influençant la taille des gouttes, et la volatilité déterminent la quantité de carburant pré-vaporisé dans la zone d'allumage. Lors de l'allumage, ces deux paramètres déterminent également le taux d'évaporation des gouttes n'ayant pas subi une vaporisation totale. La volatilité est fortement dépendante de la présence d'espèces légères dans le mélange d'hydrocarbures liquides composant le kérosène.
- *richesse du mélange* : dans le cas de l'allumage, la richesse gazeuse produite par pré-évaporation compte plus que la richesse totale (liquide + vapeur). Sa valeur optimale dans la zone primaire se situe proche de la stœchiométrie.
- *Atomisation du spray* : les carburants courants ne sont pas assez volatiles pour être allumés et brûlés si leur surface de contact avec l'air n'est pas largement augmenté par pulvérisation (taille de gouttes inférieure à la centaine de microns). Les propriétés du spray ont donc un impact direct sur les différentes phases du processus d'allumage. D'une part, le minimum d'énergie permettant l'allumage varie fortement avec la taille des gouttes [131]. Ainsi, dans un spray contenant une large distribution de diamètres, un nombre suffisant de petites gouttes peut favoriser sensiblement l'allumage. D'autre part, la dispersion des gouttes dans la zone primaire influence directement la richesse locale. Par rapport aux autres modes d'injection, les injecteurs de type *airblast* produisent une distribution spatiale de gouttes relativement uniforme garantissant une richesse suffisante près de l'allumeur (favorable à la *phase 1*) et dans l'axe de l'injecteur (favorable à la *phase 2*).
- *température du carburant* : une augmentation de la température initiale du carburant liquide favorise l'allumage en stimulant l'évaporation par augmentation de la volatilité et par amélioration de l'atomisation due à une plus faible viscosité.

La géométrie de la chambre. La distance entre deux injecteurs principaux influence la *phase 3* : plus les injecteurs sont espacés, plus la progression de la flamme dans la direction azimutale est lente. Dans certains foyers à pré-vaporisation munis d'allumeurs-torches, il est nécessaire de placer des injecteurs pilotes supplémentaires (sans bougie d'allumage) afin de favoriser la progression de la flamme.

Dans le cas d'un allumage par bougie, on rappelle que le succès de la *phase 1* est lié à la capacité du noyau d'allumage à dégager plus d'énergie par combustion qu'il n'en perd par transfert thermique avec le gaz environnant et par évaporation des gouttes. Ce problème a été étudié sur le plan expérimental et théorique par Ballal et Lefebvre [14, 15, 16, 17]. Ces travaux montrent que les aspects diphasiques jouent un rôle essentiel dans le processus. Les *phases 2 et 3*, quant à elles, mettent en jeu des flammes diphasiques instationnaires. L'étude détaillée de la *combustion diphasique* est donc indispensable pour aborder la question de l'allumage. La section 1.2 fournit un état de l'art dans ce domaine. Le phénomène est d'abord décrit de façon générale (section 1.2.1) puis à travers différentes tentatives de classification (section 1.2.2). Les approches actuelles en modélisation (section 1.2.3) et certaines études expérimentales (section 1.2.3) sont ensuite présentées.

1.2 État de l'art en combustion diphasique

1.2.1 Description générale du phénomène

La complexité de la combustion diphasique réside dans l'interaction forte entre trois principaux phénomènes : la réaction chimique de combustion, les écoulements diphasiques et la turbulence (cf. Fig. 1.10). Son étude nécessite une approche interdisciplinaire où l'analyse des couplages est aussi importante que celle des phénomènes pris séparément.

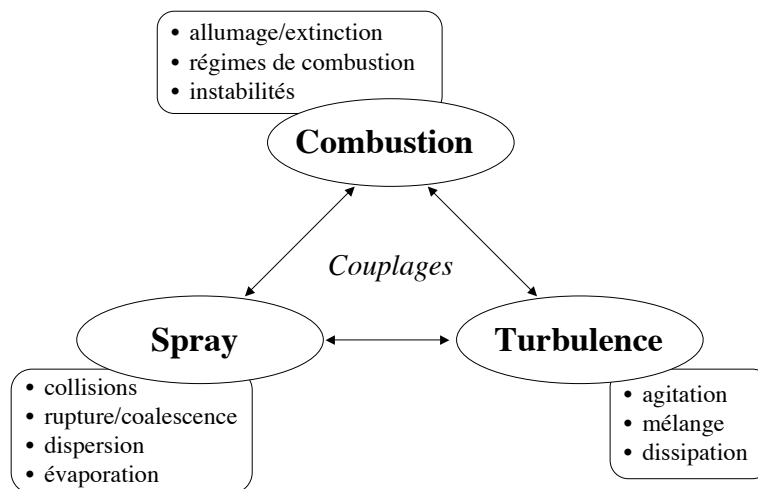


FIG. 1.10 - La combustion diphasique turbulente : triple interaction spray-combustion-turbulence

Combustion/turbulence. La combustion laminaire est déjà 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. Par ailleurs, la turbulence est assurément le phénomène le plus complexe en mécanique des fluides non réactive. Pour étudier le couplage entre combustion et turbulence, la stratégie consiste à comparer leurs échelles temporelles et spatiales respectives afin de distinguer différents régimes d'interactions [61]. Lorsqu'une flamme interagit avec un écoulement turbulent, la turbulence est modifiée par l'accélération et l'augmentation de viscosité dans l'épaisseur du front de flamme. Selon les cas, ce mécanisme peut aussi bien générer de la turbulence (appelée alors *flame-generated turbulence* [108]) où l'atténuer (re-laminarisation par la combustion). D'un autre côté, l'agitation turbulente modifie la structure de flamme, en fonction du rapport d'échelles turbulence-chimie. Généralement, la turbulence augmente la réaction par accroissement de la surface de flamme mais elle peut aussi provoquer l'extinction dans les cas extrêmes.

Turbulence/spray. Les propriétés du spray varient fortement selon la phase du processus d'atomisation. Dans la région d'atomisation primaire, sous l'effet des forces aérodynamiques, la phase liquide continue (jet ou nappe liquide) se déstabilise et se désagrège sous la forme de filaments et de grosses gouttes. L'atomisation secondaire produit ensuite des gouttes sphériques de petites tailles

stabilisées par la tension superficielle. Lors de ces deux phases, les échelles turbulentes jouent un rôle essentiel dans les processus de collisions, rupture et coalescence, mécanismes fondamentaux de l'atomisation. Une fois l'atomisation secondaire achevée, la dynamique du spray est liée à la densité volumique de gouttes : un spray dense est contrôlé par les collisions entre particules alors qu'un spray dilué est contrôlé par les interactions fluides/particules. Pour un spray dilué, suivant sa charge massique (masse des gouttes sur la masse de gaz), on distingue deux types d'interactions turbulence/spray :

- à faible charge ($< 10\%$), le couplage est essentiellement direct : la turbulence contribue à la dispersion du spray mais ne subit pas l'action des gouttes en retour ;
- à forte charge ($> 10\%$), le couplage est réciproque (*two-way coupling* en anglais) : l'effet de dispersion est toujours présent mais la turbulence gazeuse est fortement perturbée par le spray. Cet effet retour peut aussi bien représenter une atténuation qu'une augmentation² de la turbulence.

L'étude de l'atomisation est un problème ardu qui fait appel à plusieurs niveaux de modélisation. Dans ce travail, le spray est supposé totalement atomisé et en régime dilué. Les efforts de modélisation se concentrent alors sur la représentation correcte des phénomènes de dispersion turbulente et d'évaporation dont le rôle dans l'interaction spray/combustion est essentiel.

Spray/combustion. La réaction chimique de combustion ayant lieu uniquement en phase gazeuse, la production de vapeur de carburant à partir de la forme liquide est une étape obligatoire dans la combustion de spray. Selon le rapport entre les temps d'évaporation et de convection du spray, la combustion a lieu en milieu monophasique ou diphasique. Dans le premier cas, le taux de réaction dépend uniquement de la répartition de vapeur de carburant résultant de la dispersion/évaporation du spray. Dans le second cas, on observe un couplage intime entre le spray et la flamme. La structure de flamme dépend alors fortement des paramètres du spray et de la réaction chimique. L'analyse de cette structure fait l'objet de la section 1.2.2.

Finalement, l'analyse de la combustion diphasique peut se faire selon trois niveaux :

1. les phénomènes isolés de combustion, turbulence et écoulements diphasiques ;
2. les phénomènes couplés de façon binaire ;
3. le processus global couplant les trois phénomènes.

Le premier niveau représente en lui-même plus d'un siècle de travaux de recherche dans chaque domaine et tous les questionnements qu'il suscite sont loin d'être résolus. Le second reste délicat à appréhender du point de vue analytique mais bénéficie des progrès de l'expérimentation et de l'avènement du calcul numérique. Le dernier niveau correspond à l'ultime degré de complexité : il représente une forme hybride des analyses précédentes plus que leur simple addition. Là encore, le potentiel des simulations numériques promet de belles avancées. Pour comprendre les besoins de ces simulations en terme de modélisation, il est nécessaire de décrire le phénomène de combustion diphasique du point de vue des structures de flamme.

²Dans le cas de l'injection Diesel, l'aérodynamique interne de la chambre de combustion et le mélange air-carburant sont fortement conditionnés par l'entraînement d'air par le spray sous l'effet du couplage inverse.

1.2.2 Structures des flammes diphasiques

Dans leur article, Réveillon et Vervisch [205] fournissent une synthèse des précédentes descriptions des structures des flammes diphasiques et proposent un niveau supplémentaire de classification à partir de résultats de simulation numérique directe. La section suivante s'inspire de la partie descriptive de leur étude.

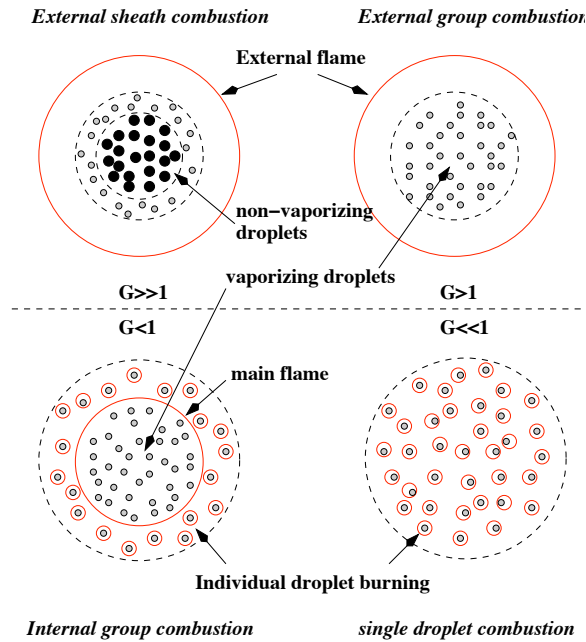


FIG. 1.11 - Modes de combustion d'après la classification de Chiu (extrait de Réveillon et Vervisch [205])

À partir de l'observation expérimentale selon laquelle les gouttes de carburant brûlent rarement de façon individuelle, Chiu et ses collaborateurs [50, 51, 53, 254] sont les premiers à avoir proposé une classification des flammes de spray. En raisonnant sur un nuage de gouttes plongé dans une atmosphère d'oxydant chaud, ils distinguent les régimes de combustion suivant le nombre de groupe G (cf. Fig. 1.11). Ce nombre sans dimension représente le rapport entre la vitesse d'évaporation et la vitesse de diffusion des gaz chauds à l'intérieur du nuage. Pour les grands nombres de Péclet, le nombre de groupe peut-être évalué par la relation : $G \approx 5N^{2/3}/S$ où N est le nombre de gouttes dans le nuage et S est le paramètre de séparation. S représente le rapport entre la distance moyenne inter-gouttes δ_s et le rayon de la flamme qui enveloppe potentiellement chaque goutte δ_{r_f} (cf. Kerstein *et al.* [119]). Dans le cas d'un spray très dilué, δ_s ne dépend que de la densité volumique de gouttes n : $\delta_s = n^{-1/3}$. S permet de distinguer les situations favorables à la combustion de gouttes isolées (S élevé) des situations propices à la combustion de groupe (S faible). L'utilisation du nombre de groupe G permet une distinction supplémentaire. Pour $G \gg 1$, le nuage est trop dense pour permettre la diffusion de la chaleur : le cœur du nuage est saturé et seules les gouttes proches de la frontière du nuage s'évaporent. La combustion se fait alors dans une flamme de diffusion maintenue à distance de cette frontière (*régime de combustion externe enveloppante*). Pour

la limite opposée, $G \ll 1$, les gouttes sont suffisamment éparées pour permettre aux gaz chauds de pénétrer dans le cœur du nuage. On observe alors un *régime de combustion interne* où évaporation et combustion ont lieu autour de chaque goutte. La transition entre ces limites extrêmes se fait via des régimes intermédiaires (cf. Fig. 1.11). Pour G légèrement supérieur à 1, la flamme reste à l'extérieur du groupe de gouttelettes mais le transport des gaz chauds y est suffisamment efficace pour que l'évaporation affecte le cœur du nuage. Pour $G < 1$, le cœur du nuage brûle en combustion externe alors que les gouttes de la périphérie brûlent de façon isolée.

Borghi et ses collaborateurs [30, 31, 32] ainsi que Chang [43] proposent un autre niveau d'analyse faisant appel au temps d'évaporation τ_v , au temps caractéristique de la flamme τ_f et à son épaisseur δ_f . Quand $\tau_v \ll \tau_f$, les gouttes sont évaporées dans la zone de préchauffage de la flamme et le front de flamme se propage dans un écoulement monophasique telle une flamme de prémélange gazeuse (cf. Fig. 1.12a). Toutefois, 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 (cf. Fig. 1.12b). Dans le cas où le temps d'évaporation est long devant le temps de la flamme, la situation devient plus complexe. Pour $\delta_f > \delta_s$, les gouttes se retrouvent dispersées à l'intérieur du front de flamme et ont tendance à l'épaissir (cf. Fig. 1.12c). Pour $\delta_f < \delta_s$, les gouttes ayant traversé le front de prémélange primaire brûlent dans une zone réactive secondaire. La forme de cette zone dépend du facteur de séparation S . Pour les faibles valeurs de S , on retrouve un régime de combustion de groupe où les gouttes brûlent individuellement ou en petits groupes entourés par une flamme. Pour des valeurs croissantes de S , Borghi [30] distingue un régime de combustion *percolante* puis de combustion *en poches* (cf. Fig. 1.13).

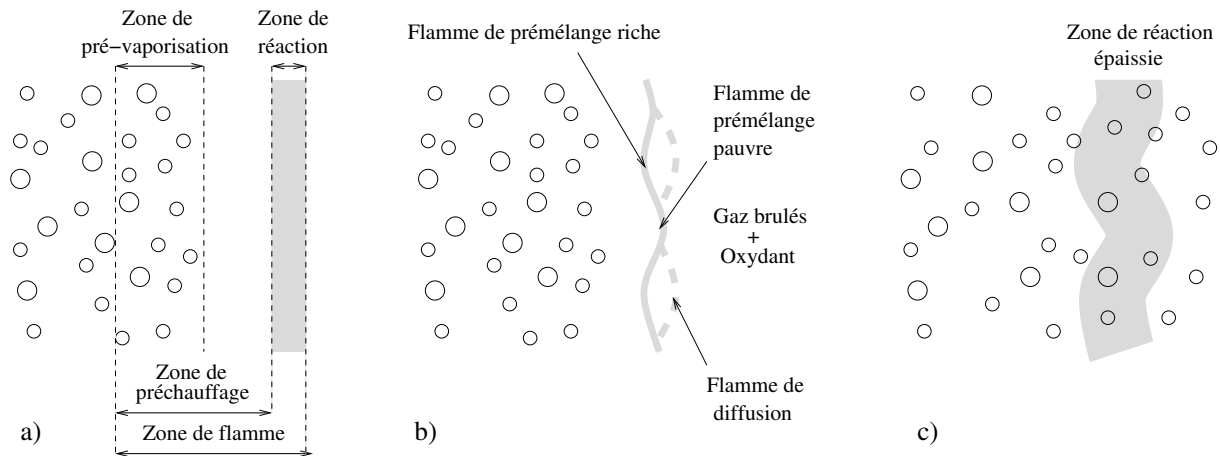


FIG. 1.12 - Flamme prévaporisée (a). Effet des fluctuations locales de richesse sur la flamme prévaporisée (b). Flamme diphasique épaissie (c) (d'après Borghi [30])

Réveillon et Vervisch [205] notent que les représentations de Chiu *et al.* et Borghi *et al.* ne prennent pas en compte les variations de richesses et les effets de la turbulence. En réponse, ils proposent d'étendre l'analyse à partir de résultats de simulations numériques directes 2D de flammes de spray faiblement turbulentes obtenus pour différentes valeurs de la richesse du spray (définie à partir du rapport entre la masse de liquide sur la masse d'oxydant), de δ_s/δ_f et de τ_v/τ_f . Les différentes topologies observées sont

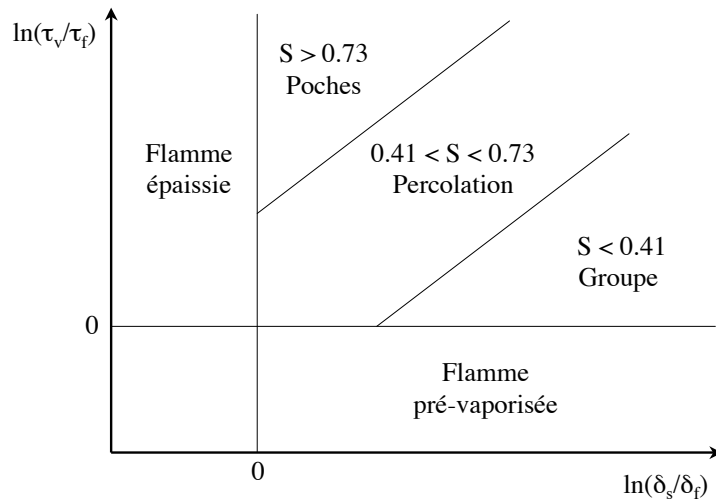


FIG. 1.13 - Diagramme de Borghi pour les flammes laminaires diphasiques [30]

schématisées par la Fig. 1.14 représentant la configuration d'un spray à richesse initiale ϕ_l^0 variable qui rencontre un écoulement d'air co-courant. En fonction de ϕ_l^0 , trois principaux régimes de flammes sont distingués :

Régime de combustion externe. Pour les valeurs extrêmes de la richesse, la réaction se fait suivant un front de flamme continu :

- en régime de *combustion fermée* (ϕ_l^0 faible) où le front, principalement prémélangé, est capable de consommer l'intégralité du carburant liquide et gazeux (Fig. 1.14a) ;
- en régime de *combustion ouverte* (ϕ_l^0 élevé) où le carburant brûle essentiellement en diffusion avec l'air externe (Fig. 1.14d).

Régime de combustion de groupe. Les gouttes s'organisent en groupes dont la combustion se fait de façon indépendante par des flammes de prémélange riches souvent suivies de flammes de diffusion (Fig. 1.14b).

Régime de combustion hybride. Entre la combustion de groupe et la combustion externe ouverte, un régime intermédiaire est observé (Fig. 1.14c) : 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.

1.2.3 Modélisation des flammes diphasiques turbulentes

Modèles pour l'écoulement gazeux

L'ensemble des analyses décrites ci-dessus montre que les flammes diphasiques peuvent prendre des formes diverses en fonction de nombreux paramètres. Dans tous les cas, la structure fine de ces flammes ne peut être résolue de façon précise qu'avec des méthodes de type simulation numérique directe (ou

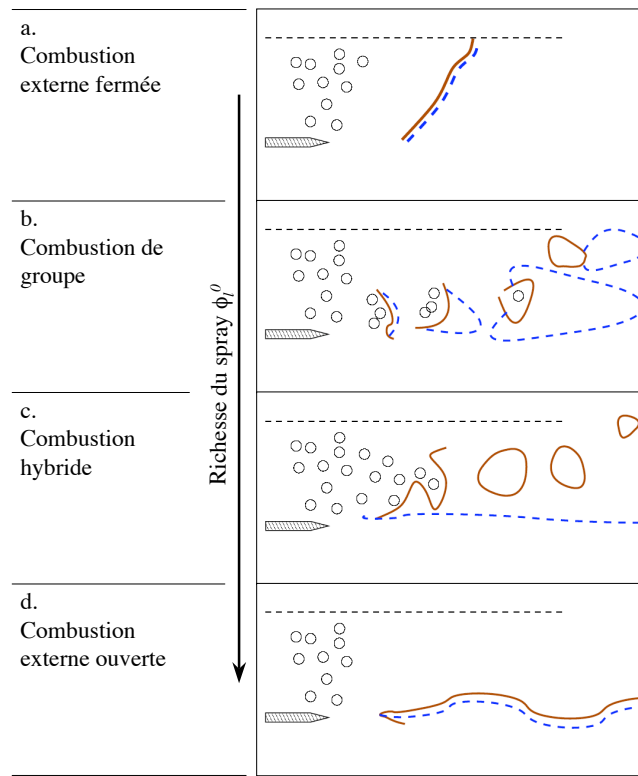


FIG. 1.14 - Régimes de combustion diphasique en fonction de la richesse du spray ϕ_1^0 selon Réveillon et Vervisch [205]. Trait continu : flamme de prémélange. Trait interrompu : flamme de diffusion.

DNS pour *direct numerical simulation*) telles que celles employées par Réveillon et Vervisch [205] ou Nakamura *et al.* [176]. À ce niveau, il est important de préciser qu'il ne s'agit cependant pas de véritables DNS dans le sens où l'écoulement n'est pas résolu à l'échelle de la goutte mais à l'échelle turbulente de Kolmogorov. Les gouttes étant représentées de manière ponctuelle, il s'agit en réalité de DNS de la phase gazeuse uniquement. Bien qu'elles fournissent de précieuses informations sur la physique, ces méthodes sont réservées aux écoulements à faible nombre de Reynolds ou à deux dimensions. À l'inverse, le monde industriel utilise traditionnellement l'approche RANS afin de calculer les configurations réalistes pour un faible coût informatique. La méthode RANS consiste à résoudre les équations moyennées en temps en utilisant des modèles pour les termes instationnaires. Bien que d'importants efforts de modélisation l'ont dotée d'un grand niveau de maturité, cette méthode reste imprécise pour les écoulements fortement détachés rencontrés dans les foyers aéronautiques. De plus, elle prédit difficilement les phénomènes fortement instationnaires tels que les détachements de tourbillons et la formation de grandes structures cohérentes. Enfin, en combustion turbulente, les termes dus à la réaction chimique requièrent un niveau supplémentaire de modélisation qui ajoutent un degré d'incertitude aux prédictions. La simulation aux grandes échelles (LES) est une approche intermédiaire entre DNS et RANS. Les équations de conservation sont filtrées en espace et seuls les phénomènes se déroulant à une échelle inférieure à la taille du filtre nécessitent d'être modélisés. À cette échelle (appelée échelle de sous-maille), le mouvement turbulent

ne représente qu'une faible portion de l'énergie cinétique totale et son caractère relativement universel le rend plus facile à modéliser. Les avantages de l'approche LES sur l'approche RANS sont discutés en détail dans l'ouvrage de Poinsot et Veynante [197]. En particulier, l'interaction turbulence/combustion (cf. section 1.2.1) est mieux décrite en LES. Toutefois, la LES nécessite des schémas numériques d'ordre élevé et des maillages raffinés pour bien représenter les plus petites échelles résolues. De plus, un grand nombre d'itérations temporelles sont requises pour obtenir la convergence des propriétés statistiques de l'écoulement. Ainsi, le coût d'une LES représente facilement 100 à 1000 fois celui d'un calcul RANS équivalent. Comme on le verra par la suite, ce coût de calcul élevé impose une stratégie informatique particulière pour réaliser une LES avec un temps de restitution raisonnable.

Sous-modèles pour la combustion diphasique en LES

Comme en combustion gazeuse, les échelles de coupure de la LES sont supérieures aux échelles caractéristiques des flammes diphasiques, quels que soient le ou les modes de combustion observés. Une étape de modélisation est donc indispensable pour représenter les interactions spray/turbulence/combustion à l'échelle de la sous-maille. Chaque niveau de description de l'écoulement nécessite un traitement particulier faisant appel à un *modèle de sous-maille* spécifique :

Modèle de goutte individuelle. Dans la mesure où chaque goutte est vue de manière ponctuelle (cf. ci-dessus), les transferts de masse, quantité de mouvement et d'énergie avec le gaz porteur doivent être intégralement modélisés. Pour une goutte individuelle, Chiu [52] distingue quatre états possibles : le préchauffage, l'évaporation, la saturation et la combustion. Dans la majorité des cas, le dernier état est peu ou pas observé en raison des effets de groupe décrits dans la section précédente. La modélisation précise des trois premiers états est loin d'être une tâche aisée. En effet, si le problème de l'évaporation d'une goutte monocomposant isolée dans une atmosphère au repos est bien connu [219, 220], la situation se complique rapidement lorsqu'on inclut les effets d'écoulement relatif gaz/goutte, d'interactions entre gouttes, de carburants multicomposants, de fortes instationnarités, d'état supercritique, etc. Afin de prendre en compte un certain nombre de ces effets, Chiu [52] propose de regrouper les théories existantes au sein d'un formalisme unifié. Enfin, le modèle de goutte isolée doit également représenter l'échange de quantité de mouvement sous la forme d'une force de traînée, éventuellement corrigée par les effets d'évaporation [167].

Modèle d'atomisation du spray. La phase initiale d'atomisation représente une étape particulièrement délicate et pourtant cruciale car elle détermine la distribution en diamètre, concentration et vitesse de gouttes, paramètres essentiels de la dispersion et de la combustion du spray. Concernant la phase d'atomisation primaire, le coût de calcul que représente le suivi de l'interface liquide/gaz place ce type de simulation hors de portée des calculs en géométrie réaliste. L'état de l'art actuel consiste au mieux à simuler la phase d'atomisation secondaire en considérant la rupture de gouttes comme un processus stochastique [9]. Dans la plupart des cas, les caractéristiques initiales du spray sont fournies par des mesures expérimentales en aval de la zone d'atomisation. En l'absence de données expérimentales, le diamètre moyen de Sauter et l'angle du spray peuvent être obtenus en fonction du type d'injecteur à partir de corrélations empiriques [131]. La modélisation de l'atomisation représente clairement un des points durs de la simulation des sprays.

Modèle de dispersion turbulente du spray. La plupart des études LES d'écoulements gaz-particules

adoptent l'approche Euler-Lagrange (EL ou lagrangienne) consistant à calculer la trajectoire lagrangienne de chaque particule (DPS pour *discrete particle simulation* en anglais). Ces études ont montré la capacité de la LES à prédire la concentration préférentielle des particules par la turbulence [265] et la nécessité d'un modèle de sous-maille pour les particules lorsqu'elles interagissent avec les structures non résolues du fluide [11, 199, 71]. Concernant l'évaporation, Réveillon et Vervisch [204] proposent un modèle pour la variance non résolue de la vapeur de carburant. Développé plutôt dans le contexte RANS, ce modèle a été étendu à la variance de sous-maille en LES par Péra [185]. Par ailleurs, de façon récente, le formalisme Euler-Euler (EE ou eulérien) consistant à décrire le spray comme un milieu statistiquement continu a été étendu au contexte de la LES par Riber [206] et Riber *et al.* [207, 208].

Modèle de combustion turbulente. En combustion turbulente gazeuse, les modèles de flammelettes sont largement répandus [186, 188]. Ils se basent essentiellement sur la connaissance du scalaire passif z et du taux de dissipation scalaire χ . Dans les flammes diphasiques, z n'est plus un scalaire passif en raison du transfert de masse par évaporation. De plus, on y rencontre généralement les deux régimes de combustion, prémélange et diffusion, au sein d'une même structure de flamme [205, 266]. Enfin, dans un calcul DNS de flamme diphasique contre-courant, Watanabe *et al.* [266] observent des niveaux de χ largement inférieurs à ceux d'une flamme gazeuse équivalente. Ainsi, les traditionnels modèles de flammelettes basés sur z et χ sont incapables de représenter la structure d'une flamme diphasique. Une voie possible est l'approche combinée flammelette/variable d'avancement (ou FPV pour *flamelet/progress variable*) proposée par Pierce et Moin [192] et capable de traiter les régimes partiellement prémélangés. Savoir si le modèle de combustion doit prendre en compte la combustion de groupe n'est pas clair : ce phénomène peut aussi bien se manifester à l'échelle résolue comme à l'échelle de sous-maille en fonction du nombre de gouttes dans le groupe. Bien que des comportements de type combustion de groupe aient été observés dans des calculs LES [127], la capacité de cette méthode à représenter correctement le phénomène reste à prouver.

Études numériques existantes en LES

En raison des difficultés de modélisation, des coûts de calcul élevés et du manque de données expérimentales pour la validation, les simulations aux grandes échelles des flammes diphasiques sont rares. En 2001, Sankaran et Menon [217] sont les premiers à présenter une telle étude à travers un calcul dans une configuration de jet vrillé. Le spray est traité en approche lagrangienne, le domaine de calcul axy-symétrique est maillé avec une grille structurée et très peu d'informations sont fournies sur le modèle de combustion. Cette étude met en évidence le fort potentiel de la LES pour reproduire l'interaction entre l'écoulement vrillé, la dispersion et le mélange air-carburant ainsi que la modification de l'aérodynamique par le dégagement de chaleur. Depuis 2002, une étude LES diphasique réactive d'une chambre aéronautique menée dans le cadre du programme ASCI (Accelerated Strategic Computing Initiative) a donné lieu à plusieurs publications [57, 97, 141, 142, 170]. Les simulations sont réalisées au moyen du code de calcul CDP développé par le CTR (Université de Stanford). Le modèle lagrangien a été validé en dispersion [10] et en évaporation [142] à partir des expériences respectives de Sommerfeld et Qiu [245] et [246]. Les prédictions du modèle stochastique de rupture pour l'atomisation secondaire (cf. ci-dessus) ont été confrontées aux résultats expérimentaux de Hiroyasu et Kudota [103] pour une

injection Diesel. Pour valider l'approche diphasique globale (atomisation-dispersion-évaporation), un calcul d'injection en géométrie complexe a été comparé aux données expérimentales d'un injecteur Pratt & Whitney. Le calcul LES diphasique réactif à proprement parler représente un secteur simple ($1/18^e$) de chambre annulaire Pratt & Whitney incluant le contournement du foyer et les détails géométriques de l'injecteur. Le domaine de calcul a été maillé au moyen d'une grille de 1.9 million d'éléments hybrides. La réaction chimique est prise en compte par le modèle FPV (cf. ci-dessus) à partir de tables chimiques pour un carburant de substitution du jet-A (type de kérosène) constitué d'un mélange de deux hydrocarbures. La simulation prédit une flamme non prémélangée produisant des gaz chauds refroidis en aval par les jets de dilution. Le profil radial de température (FRT, cf. section 1.1.4) obtenu en sortie de chambre reproduit de façon satisfaisante le profil expérimental. Afin de calculer les quelque 0.6 million de trajectoires de particules (numériques et physiques) sur la grille non structurée, un effort particulier a été accompli dans le développement de l'algorithme de suivi lagrangien [10]. Malgré une méthode de répartition de la charge de calcul en fonction de la densité de particules, le nombre de processeurs parallèles utilisables semble limité et la simulation reste très coûteuse : plus de 25 jours de temps d'exécution sur 80 processeurs ASC Frost (IBM SP3) pour environ 4 temps convectifs.

Ces études en LES constituent l'état de l'art en simulation numérique de la combustion diphasique turbulente en géométrie réaliste. Leur faiblesse réside dans l'absence de validation expérimentale en écoulement réactif. La section suivante décrit quelques expérimentations de flammes diphasiques turbulentes bien documentées.

Études expérimentales

En combustion turbulente diphasique, l'expérimentation est particulièrement délicate, en partie en raison des difficultés à générer un spray reproductible et bien caractérisé. Pour étudier la physique d'un phénomène aussi complexe, l'approche expérimentale est cependant indispensable. Par ailleurs, la validation des modèles numériques requiert des expériences suffisamment détaillées pour définir les paramètres d'entrée des codes de calcul et fournir des comparaisons abondantes dans le domaine simulé. Parmi ces études plutôt rares, on peut citer les références suivantes :

- Akamatsu *et al.* [3, 4] ont étudié le comportement détaillé d'une flamme-jet diphasique grâce à différentes mesures optiques. Le dispositif d'injection produit un spray central parfaitement atomisé et dilué qui est allumé et stabilisé par un brûleur pilote coaxial. Cette configuration permet de négliger les zones de spray fortement chargé où ont lieu des phénomènes complexes tels que la rupture, la coalescence et les collisions de gouttes.
- Pour un brûleur basé sur le même principe, Michou *et al.* [163] et Michou [164] fournissent des champs de température et des taux d'évaporation pour différentes conditions de richesse et de diamètre de gouttes. Cette étude a été prolongée par Pichard *et al.* [190] et Pichard [189] qui ont caractérisé le spray en terme de granulométrie et de fraction volumique de liquide pour des variations de température et débit d'air, de richesse et de type de carburant.
- Widmann et Presser [268] proposent une base de données expérimentale destinée à la validation des codes de mécanique des fluides en combustion diphasique. Le dispositif est un injecteur pressurisé produisant un spray conique creux dans un jet d'air co-axial vrillé. La giration modérée du jet d'air génère une zone de recirculation centrale qui stabilise la flamme, comme dans la plupart des

brûleurs aéronautiques. Les conditions aux limites sont bien définies et les propriétés du spray sont mesurées en détail. Les auteurs fournissent également les champs de vitesse de l'écoulement gazeux ainsi que la température et la composition des gaz brûlés en sortie.

1.3 Objectif de l'étude et choix méthodologiques

1.3.1 Besoin d'un outil numérique

La section 1.1 a mis en évidence la nécessité d'un outil de prédiction de la combustion dans les foyers aéronautiques, en particulier pour les moteurs d'hélicoptères. Un tel outil doit prendre en compte les phénomènes physiques complexes et couplés que sont la turbulence, la combustion et les sprays (cf. sections 1.2.1 et 1.2.2). Il s'agit donc d'un code de calcul de mécanique des fluides (CFD pour *computational fluid dynamics* en anglais) incluant un modèle pour la chimie et pour les écoulements à phase dispersée. Comme on l'a montré dans la section 1.2.3, l'approche LES constitue une des voies les plus prometteuses dans ce domaine. Ayant prouvé son potentiel pour la combustion turbulente gazeuse [194], il est naturel d'envisager l'extension de cette méthode à la combustion diphasique. De plus, par son caractère intrinsèquement instationnaire, elle semble particulièrement adaptée aux simulations d'allumages. Outre les problèmes de modélisation, le développement de cet outil numérique est soumis à deux contraintes particulières : la capacité à traiter les géométries complexes des foyer réels ainsi qu'une performance élevée en temps d'exécution.

1.3.2 Contexte de travail

Depuis plusieurs années, le Cerfacs, en collaboration avec l'IFP, développe le code de calcul AVBP qui a fait l'objet de plusieurs applications en combustion turbulente gazeuse sur des géométries complexes [86, 213, 229, 231, 232]. En 2004, les travaux de thèse de A. Kaufmann [110] ont permis d'implanter un module diphasique (appelé TPF) capable de traiter les écoulements à phase dispersée dans un contexte de simulation numérique directe. En 2005, la thèse de J.-B. Mossa [173] propose une extension de ces développements aux effets de polydispersion dans les sprays. En 2006, la thèse de S. Pascaud [181] montre la capacité de l'outil AVBP TPF à traiter la combustion diphasique en configuration réaliste. En 2007, la thèse de E. Riber [206] développe et valide une approche LES pour la phase dispersée dans les écoulements non réactifs. Dans ce contexte d'élaboration d'un outil numérique en combustion diphasique, le travail de thèse présenté ici poursuit le développement du module diphasique existant et le consolide. Sur le plan pratique, le module TPF initialement développé par A. Kaufmann et J.-B. Mossa a été implanté dans une version récente d'AVBP. Ce travail, mené en collaboration avec E. Riber, a produit une version de code qui constitue le cœur de la version actuelle d'AVBP (AVBP v6.X). En terme de modélisation, l'effort s'est porté sur le modèle d'évaporation de gouttes et la mise en place d'un couplage robuste avec la phase gazeuse et le modèle de combustion. La présentation de l'outil LES diphasique réactif développé dans cette thèse a fait l'objet d'une publication collective dans *Flow, Turbulence and Combustion* [28] (cf. annexe B).

1.3.3 Stratégie et méthodes

Dès le début, le développement du code AVBP a été guidé par certains choix de méthodes qui répondent aux exigences en terme de modélisation et de performance de calcul. L'ensemble des contraintes liées à la présente étude (cf. section 1.3.1) conduisent à la stratégie résumée par la Fig. 1.15. La simulation aux grandes échelles représente le cœur de l'approche autour duquel gravitent des méthodes théoriques ou numériques plus spécifiques. Le choix du formalisme Euler-Euler pour la phase dispersée représente une option majeure. La justification de ce choix est détaillée dans le chapitre 3 et peut se résumer à quatre raisons principales :

- la formulation continue permet d'utiliser les mêmes algorithmes de résolution pour la phase gazeuse et pour la phase dispersée ;
- la grille de calcul eulérienne étant la même pour les deux phases, le couplage informatique est immédiat ;
- grâce aux deux bénéfices précédents, la parallélisation par décomposition de domaine est efficace ;
- le coût de calcul pour le spray ne dépend pas du nombre de particules à transporter et reste de l'ordre du coût de calcul pour la phase gazeuse.

Dans le gaz, le mélange est pris en compte par une formulation multi-espèces des propriétés thermodynamiques et de la diffusion moléculaire. La réaction chimique est représentée par un schéma cinétique simplifié ajusté quantitativement sur des propriétés propagatives et possédant le bon comportement vis-à-vis de l'allumage (loi d'Arrhenius) (cf. section 4.7). L'interaction turbulence-flamme à l'échelle non résolue par la LES est modélisée par le modèle de flamme épaissie dynamique (cf. section 4.6). Le choix de la formulation totalement compressible et de l'intégration temporelle explicite contraint à avancer au pas de temps acoustique ce qui nécessite un grand nombre d'itérations temporelles. En contre-partie, les phénomènes acoustiques sont bien décrits et l'efficacité de parallélisme est maximale. Par conséquent, le temps d'exécution peut être largement réduit par l'utilisation d'un grand nombre de processeurs parallèles (cf. section 5.5). D'un point de vue général, la stratégie adoptée peut se résumer de la façon suivante :

1. une description précise de l'aérodynamique de l'écoulement en géométrie complexe au moyen d'une approche LES ;
2. un choix de méthodes et de modèles plutôt simples pour capturer l'essentiel de la physique des flammes turbulentes diphasiques et de l'allumage tout en conservant des performances élevées en calcul parallèle.

1.3.4 Objectifs de l'étude

Les écoulements turbulents diphasiques réactifs sont des systèmes complexes dont la modélisation numérique nécessite plusieurs niveaux de validation (cf. section 1.2.3). Concernant la dispersion du spray par la turbulence du fluide, l'approche Euler-Euler adoptée dans AVBP a été validée par Riber *et al.* [207] et Riber [206] sur l'expérience de Borée *et al.* [29] et par Mossa [173] et Boileau *et al.* [28] sur l'expérience de Sommerfeld et Qiu [245]. Dans cette thèse, les efforts de validation se sont portés sur l'effet de la turbulence sur l'évaporation d'un nuage de goutte, d'une part, et sur le rôle de l'interaction évaporation-combustion sur la propagation de flamme, d'autre part. La première partie est une étude DNS de l'évaporation d'un nuage de gouttes dans une turbulence homogène isotrope décroissante. Le

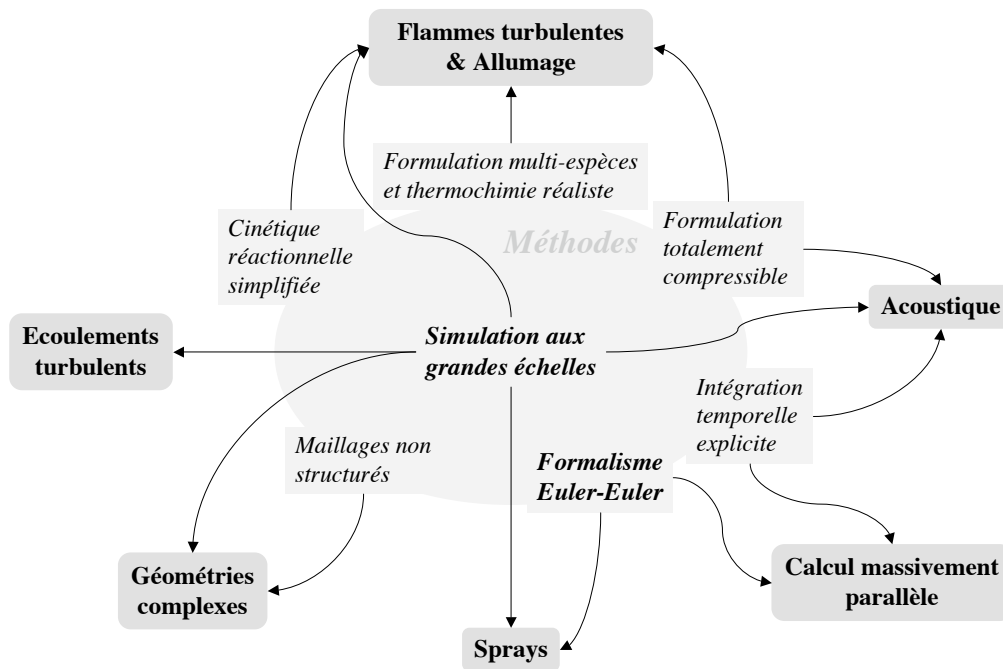


FIG. 1.15 - Description des principaux choix de méthodes en fonction des exigences de modélisation et de parallélisme

but est de reproduire l'effet de la turbulence du gaz sur la ségrégation des particules et la variance de vapeur. La seconde étude porte sur des flammes planes laminaires et se divise en deux cas tests :

- une flamme diphasique dite homogène (spray évaporé avant la flamme) que l'on compare à une solution analytique ;
- une flamme diphasique saturée (spray évaporé dans la flamme) dont la structure révèle le couplage fort entre l'évaporation, la réaction chimique et les transferts thermiques. L'objectif est de montrer que ce couplage, mécanisme clé de la propagation de la flamme, est bien pris en compte par le modèle. Ce cas test sert également à évaluer le modèle de flamme épaissie étendu aux flammes diphasiques.

Ces études ne représentent qu'une première étape et une validation complète de l'approche nécessiterait une comparaison avec les résultats d'une expérience de référence telle que celles décrites dans la section 1.2.3. Toutefois, avant de chercher à reproduire précisément une flamme de laboratoire, il est intéressant de tester la méthode sur une des configurations réalistes auxquelles l'outil numérique est destiné. Dans ce but, l'approche complète (LES diphasique réactive) a été appliquée à la combustion dans un foyer typique de turbine d'hélicoptère. Dans un premier temps, l'étude s'est portée sur le régime stationnaire et sur une phase d'allumage dans un secteur unique de chambre annulaire (séquence correspondant à la *phase 2* définie dans la section 1.1.5). Dans un second temps, le domaine de calcul a été étendu à la chambre complète afin d'analyser le processus d'allumage par propagation de flamme de secteur à secteur (*phase 3*). En raison des grandes ressources informatiques qu'elle nécessite, cette

configuration permet de tester la performance du code (et des machines) sur des calculs parallèles avec un grand nombre de processeurs. Ainsi, cette étude a donné lieu à plusieurs projets impliquant des fabricants ou des propriétaires de machines massivement parallèles. Dans une étude préliminaire, IBM a fourni un accès à son supercalculateur BlueGene/L (Rochester, US) sur lequel des calculs parallèles sur 2048 processeurs ont été réalisés [6, 26]. Le calcul présenté ici a été réalisé sur 700 processeurs du Cray XT3 (États Unis) prêté par Cray. Des tests ont également été effectués sur la machine Bull Tera-10 du CEA (Saclay, France) et sur l'IBM Marenostrum du BSC (Barcelone, Espagne). Le but est de montrer la faisabilité et l'apport de l'approche LES sur le problème pratique de l'allumage d'un foyer d'hélicoptère (cf. section 1.1) et d'identifier les possibilités et les limites du calcul parallèle dans une stratégie de maîtrise du temps de restitution pour de telles simulations [251].

1.4 Organisation du manuscrit

La première partie contient une description de l'approche théorique et numérique employées dans la thèse. Le chapitre 2 présente les équations de conservation de la phase gazeuse (équations de Navier-Stokes) dans le contexte multi-espèces réactif compressible. Le chapitre 3 développe le formalisme Euler-Euler pour la modélisation de la phase dispersée et détaille les modèles de fermeture utilisés. Le chapitre 4 fournit les équations de la simulation aux grandes échelles obtenus par filtrage des équations présentées dans les deux chapitres précédents. La fermeture des termes non résolus est présentée, le modèle de combustion turbulente est détaillé et une modélisation de la chimie du kérosène est proposée. Enfin, le chapitre 5 décrit l'approche numérique de façon générale et aborde la stratégie de calcul parallèle.

La seconde partie traite de la validation du code de calcul et de l'exploration de la physique de certains phénomènes clés de la combustion diphasique à travers des cas tests académiques. Ainsi, le chapitre 6 analyse l'interaction entre un nuage de gouttes en évaporation et une turbulence homogène isotrope alors que le chapitre 7 s'intéresse à la propagation de flammes planes laminaires dans un spray de carburant.

La troisième partie présente une application de l'approche LES diphasique réactive à un secteur isolé de foyer de turbine d'hélicoptère. Le chapitre 8 décrit le régime d'écoulement stationnaire en terme de mécanisme de stabilisation et de structure de flamme. Le chapitre 9 analyse l'allumage du secteur pour en identifier le processus détaillé.

La quatrième et dernière partie est consacrée à l'allumage d'une chambre de combustion complète et se présente sous la forme d'un article en préparation pour l'*AIAA Journal*.

Première partie

Équations et modèles pour les écoulements turbulents diphasiques réactifs

Table des Matières

2	Équations de conservation pour les écoulements gazeux réactifs	47
2.1	Équations et variables conservatives	47
2.2	Variables thermodynamiques	48
2.3	Équation d'état des gaz parfaits	49
2.4	Diffusion moléculaire multi-espèces	50
2.5	Diffusion de la chaleur	51
2.6	Coefficients de transport diffusif	51
2.7	Cinétique chimique	52
3	Équations de conservation pour la phase dispersée	55
3.1	Introduction	55
3.1.1	Approche lagrangienne	55
3.1.2	Approche eulérienne	57
	Filtrage volumique	57
	Filtrage statistique	57
	Discussion	58
3.2	De la description statistique du spray aux équations de conservation eulériennes	59
3.2.1	Équation de transport de la fonction densité de présence	59
3.2.2	Moyennes de phase et mouvement mésoscopique	60
	Moyenne d'ensemble	60
	Moyenne d'ensemble massique	61
	Grandeurs mésoscopiques et grandeurs décorrélées	61
3.2.3	Équation générale d'Enskog	63
3.2.4	Équations de conservation	64
	Conservation de la densité de particules	64
	Conservation de la fraction volumique	64
	Conservation de la quantité de mouvement	64
	Conservation de l'énergie décorrélée	65
	Conservation de l'enthalpie sensible	65
3.2.5	Résumé des hypothèses et des équations de conservation de la phase dispersée	65
	Hypothèses simplificatrices	65

TABLE DES MATIÈRES

	Équations de conservation	66
3.3	Modèles de fermeture	69
3.3.1	Traînée	69
3.3.2	Évaporation	70
	Modèles existants	70
	Description du modèle de température uniforme	72
	Taux de transfert de masse	72
	Taux de transfert de chaleur	74
	Valeur de référence pour l'enthalpie liquide	75
	Coefficients de transport diffusif	75
	Échanges thermiques et température d'équilibre	76
	Traitement numérique de l'ébullition	77
3.3.3	Mouvement décorrélé	78
3.3.4	Récapitulatif des termes modélisés	79
4	Équations pour la LES diphasique réactive	81
4.1	Simulation aux grandes échelles (SGE ou LES)	81
4.2	Équations LES pour la phase gazeuse	82
4.2.1	Filtrage LES des équations de Navier-Stokes	82
4.2.2	Flux convectifs résolus	83
4.2.3	Flux diffusifs résolus en écoulement non réactif	84
4.2.4	Termes de sous-maille	85
4.3	Modèles de sous-maille	86
4.3.1	Modèle de Smagorinsky	87
4.3.2	Modèle de Smagorinsky filtré	87
4.3.3	Modèle WALE	87
4.4	Équations LES pour la phase dispersée	88
4.4.1	Filtrage LES des équations de conservation	88
4.4.2	Flux mésoscopiques résolus	89
4.4.3	Flux décorrélés résolus	89
4.4.4	Flux de sous-maille	90
4.4.5	Termes sources filtrés	90
4.5	Modèles de sous-maille pour la phase dispersée	93
4.5.1	Tenseur de sous-maille des vitesses mésoscopiques	93
4.5.2	Flux de sous-maille d'énergie décorrélée	93
4.5.3	Terme de production de sous-maille d'énergie décorrélée	93
4.6	Modèle de combustion turbulente	94
4.6.1	Modélisation de la combustion turbulente	94
	Modèles de combustion prémélangée en LES	94

Modèles de combustion non prémélangée en LES	95
4.6.2 Flamme laminaire épaissie (TF)	97
4.6.3 Modèle de flamme épaissie en LES (TFLES)	98
Fonction d'efficacité E	98
Estimation de la constante α	99
Implantation	100
4.6.4 Modèle de flamme épaissie dynamique	100
Principe de fonctionnement	100
Facteur d'épaississement dépendant de la résolution locale	102
4.6.5 Modèle de flamme épaissie diphasique	102
Modèle de flamme diphasique épaissie en DNS (TP-TF)	102
Modèle de flamme diphasique épaissie en LES (TP-TFLES)	102
4.7 Modélisation de la chimie du kérosène	103
4.7.1 Choix d'un carburant de substitution	104
4.7.2 Élaboration du schéma réactionnel simplifié	106
Schéma complexe du JP10	107
Ajustement du schéma simplifié par optimisation	107
5 Approche numérique	113
5.1 Discrétisation <i>Cell-Vertex</i>	113
5.1.1 Approche des résidus pondérés	113
5.1.2 Calcul du pas de temps	115
5.1.3 Calcul des gradients	115
5.2 Schémas numériques	115
5.3 Modèles de viscosité artificielle	116
5.3.1 Introduction	116
5.3.2 Senseurs	116
Senseur de Jameson	116
Senseur de Colin	117
5.3.3 Opérateurs	118
5.4 Maillages	118
5.5 Parallélisme et performance	120
5.5.1 Intérêt du calcul parallèle en LES	120
5.5.2 Parallélisme dans AVBP	121
5.6 Conditions aux limites	124
5.6.1 Conditions aux limites de la phase gazeuse	124
5.6.2 Conditions aux limites de la phase liquide	125

TABLE DES MATIÈRES

Chapitre 2

Équations de conservation pour les écoulements gazeux réactifs

2.1 Équations et variables conservatives

On écrit les équations de conservation d'un écoulement multi-espèces réactif sous la forme suivante :

$$\frac{\partial \mathbf{w}}{\partial t} + \nabla \cdot \mathbf{F} = \mathbf{s} \quad (2.1)$$

$\mathbf{w} = (\rho u, \rho v, \rho w, \rho E, \rho_k)^T$ est le vecteur des variables conservatives avec respectivement ρ , u , v , w , E et ρ_k , la masse volumique, les trois composantes du vecteur vitesse $\mathbf{u} = (u, v, w)^T$, l'énergie totale non chimique et $\rho_k = \rho Y_k$ avec Y_k la fraction massique de l'espèce k , k variant de 1 à N , N étant le nombre d'espèces. \mathbf{F} est le tenseur des flux que l'on décompose de façon classique en une partie non diffusive et une partie diffusive :

$$\mathbf{F} = \mathbf{F}^I(\mathbf{w}) + \mathbf{F}^V(\mathbf{w}, \nabla \mathbf{w}) \quad (2.2)$$

\mathbf{s} est le vecteur des termes sources qui se compose de deux parties :

$$\mathbf{s} = \mathbf{s}_c + \mathbf{s}_{l-g} \quad (2.3)$$

où \mathbf{s}_c est le terme source lié à la réaction chimique (cf. section 2.7) et \mathbf{s}_{l-g} est le terme source dû aux effets de la phase liquide sur la phase gazeuse (cf. section 3.2.5).

Les trois composantes du tenseur des flux non diffusifs $\mathbf{F}^I(\mathbf{w})$ s'écrivent :

$$\mathbf{f}^I = \begin{pmatrix} \rho u^2 + P \\ \rho uv \\ \rho uw \\ (\rho E + P)u \\ \rho_k u \end{pmatrix}, \quad \mathbf{g}^I = \begin{pmatrix} \rho vw \\ \rho v^2 + P \\ \rho vw \\ (\rho E + P)v \\ \rho_k v \end{pmatrix}, \quad \mathbf{h}^I = \begin{pmatrix} \rho wv \\ \rho vw \\ \rho w^2 + P \\ (\rho E + P)w \\ \rho_k w \end{pmatrix} \quad (2.4)$$

où la pression hydrostatique P est déterminée par l'équation d'état des gaz parfaits (Eq. 2.16).

Les trois composantes du tenseur des flux diffusifs $\mathbf{F}^V(\mathbf{w}, \nabla \mathbf{w})$ s'écrivent :

$$\begin{aligned}
 \mathbf{f}^V &= \begin{pmatrix} -\tau_{xx} \\ -\tau_{xy} \\ -\tau_{xz} \\ -(u\tau_{xx} + v\tau_{xy} + w\tau_{xz}) + q_x \\ J_{x,k} \end{pmatrix} \\
 \mathbf{g}^V &= \begin{pmatrix} -\tau_{xy} \\ -\tau_{yy} \\ -\tau_{yz} \\ -(u\tau_{xy} + v\tau_{yy} + w\tau_{yz}) + q_y \\ J_{y,k} \end{pmatrix} \\
 \mathbf{h}^V &= \begin{pmatrix} -\tau_{xz} \\ -\tau_{yz} \\ -\tau_{zz} \\ -(u\tau_{xz} + v\tau_{yz} + w\tau_{zz}) + q_z \\ J_{z,k} \end{pmatrix}
 \end{aligned} \tag{2.5}$$

où τ est le tenseur des contraintes visqueuses, μ est la viscosité dynamique (cf. section 2.6), $J_{i,k}$ est le flux diffusif de l'espèce k dans la direction i (cf. section 2.4) et q_i est le flux diffusif de chaleur (cf. section 2.5). τ est défini par :

$$\tau_{ij} = 2\mu \left(S_{ij} - \frac{1}{3} \delta_{ij} S_{ll} \right) \tag{2.6}$$

$$\text{avec : } S_{ij} = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial u_j}{\partial x_i} + \frac{\partial u_i}{\partial x_j} \right) \tag{2.7}$$

où S_{ij} est le tenseur des vitesses de déformation.

Note : Par la suite, en l'absence de précision, les indices i, j et l désignent l'une des trois directions de l'espace. Leur répétition implique une sommation sur ces trois directions (notation d'Einstein). Dans tout ce document, l'indice k représente uniquement la $k^{\text{ième}}$ espèce et ne suit pas la règle de sommation (sauf dans les cas mentionnés).

2.2 Variables thermodynamiques

L'état de référence est pris à la pression $P_0 = 1 \text{ bar}$ et à la température $T_0 = 0 \text{ K}$. Les enthalpies $\tilde{h}_{s,k}$ et entropies \tilde{s}_k sensibles de chaque espèce sont tabulées tous les 100 K de 0 à 5000 K et sont définies respectivement par les Eq. 2.8 et 2.9. Le symbole $\tilde{}$ correspond à la valeur tabulée d'indice i et l'exposant m représente une valeur molaire. $\tilde{h}_{s,k}^m, \tilde{s}_k^m$ et la masse molaire W_k sont déterminées à partir de

la table JANAF [253]. Enfin, l'énergie sensible de l'espèce k est donnée par l'Eq. 2.10 où r_k est fourni par l'Eq. 2.18.

$$\tilde{h}_{s,k}(T_i) = \int_{T_0=0K}^{T_i} C_{p,k} dT = \frac{\tilde{h}_{s,k}^m(T_i) - \tilde{h}_{s,k}^m(T_0)}{W_k}, \quad i = 1, 51 \quad (2.8)$$

$$\tilde{s}_k(T_i) = \frac{\tilde{s}_k^m(T_i) - \tilde{s}_k^m(T_0)}{W_k}, \quad i = 1, 51 \quad (2.9)$$

$$\tilde{e}_{s,k}(T_i) = \int_{T_0=0K}^{T_i} C_{v,k} dT = \tilde{h}_{s,k}(T_i) - r_k T_i \quad i = 1, 51 \quad (2.10)$$

Les capacités calorifiques à pression constante $C_{p,k}$ et à volume constant $C_{v,k}$ sont supposées constantes entre T_i et $T_{i+1} = T_i + 100 \text{ K}$. Elles sont respectivement déterminées par les Eq. 2.11 et 2.12. L'énergie sensible de l'espèce k est définie par une interpolation linéaire via la température (Eq. 2.13). L'énergie sensible et l'enthalpie sensible du mélange sont respectivement définies par les Eq. 2.14 et 2.15.

$$C_{p,k} = \frac{\partial h_{s,k}}{\partial T} \quad (2.11)$$

$$C_{v,k} = \frac{\partial e_{s,k}}{\partial T} \quad (2.12)$$

$$e_{s,k}(T) = \tilde{e}_{s,k}(T_i) + (T - T_i) \frac{\tilde{e}_{s,k}(T_{i+1}) - \tilde{e}_{s,k}(T_i)}{T_{i+1} - T_i} \quad (2.13)$$

$$\rho e_s = \sum_{k=1}^N \rho_k e_{s,k} = \rho \sum_{k=1}^N Y_k e_{s,k} \quad (2.14)$$

$$\rho h_s = \sum_{k=1}^N \rho_k h_{s,k} = \rho \sum_{k=1}^N Y_k h_{s,k} \quad (2.15)$$

2.3 Équation d'état des gaz parfaits

L'équation d'état d'un mélange de gaz parfaits s'écrit :

$$P = \rho \frac{\mathcal{R}}{\overline{W}} T \quad (2.16)$$

$$\text{avec : } \frac{1}{\overline{W}} = \sum_{k=1}^N \frac{Y_k}{W_k} \quad (2.17)$$

où \bar{W} est la masse molaire du mélange. La constante du mélange \bar{r} et les capacités calorifiques \bar{C}_p et \bar{C}_v dépendent des fractions massiques :

$$\bar{r} = \frac{\mathcal{R}}{\bar{W}} = \sum_{k=1}^N \frac{Y_k}{\bar{W}_k} \mathcal{R} = \sum_{k=1}^N Y_k r_k \quad (2.18)$$

$$\bar{C}_p = \sum_{k=1}^N Y_k C_{p,k} \quad (2.19)$$

$$\bar{C}_v = \sum_{k=1}^N Y_k C_{v,k} \quad (2.20)$$

où $\mathcal{R} = 8.3143 \text{ J.mol}^{-1}.\text{K}^{-1}$ est la constante universelle des gaz parfaits. L'exposant polytropique du mélange est donné par $\gamma = \bar{C}_p/\bar{C}_v$. La constante du mélange, les capacités calorifiques et l'exposant polytropique dépendent de la composition locale du mélange définie par les fractions massiques $Y_k(x, t)$. Elles sont donc dépendantes de l'espace et du temps :

$$\bar{r} = \bar{r}(x, t), \quad \bar{C}_p = \bar{C}_p(x, t), \quad \bar{C}_v = \bar{C}_v(x, t), \quad \text{et} \quad \gamma = \gamma(x, t) \quad (2.21)$$

À partir de l'énergie sensible, on déduit la température en utilisant les Eq. 2.13 et 2.14. Enfin, les conditions limites (cf. section 5.6) nécessitent le calcul de la vitesse du son du mélange c définie par :

$$c^2 = \gamma \bar{r} T \quad (2.22)$$

2.4 Diffusion moléculaire multi-espèces

Dans un écoulement multi-espèces, la conservation de la masse totale implique que l'Eq. 2.23 soit satisfaite. \mathbf{V}^k représente la vitesse de diffusion de l'espèce k ($k = 1, \dots, N$) et s'exprime en utilisant l'approximation d'Hirschfelder-Curtis (Eq. 2.24). L'Eq. 2.24 fait intervenir les gradients des fractions molaires X_k définies par $X_k = Y_k \bar{W} / W_k$. Exprimée en terme de fractions massiques, l'Eq. 2.24 devient l'Eq. 2.25.

$$\sum_{k=1}^N Y_k V_i^k = 0 \quad (2.23)$$

$$X_k V_i^k = -D_k \frac{\partial X_k}{\partial x_i} \quad (2.24)$$

$$Y_k V_i^k = -D_k \frac{W_k}{\bar{W}} \frac{\partial X_k}{\partial x_i} \quad (2.25)$$

Si on somme les k Eq. 2.25, la conservation de la masse totale exprimée par l'Eq. 2.23 n'est pas nécessairement respectée. On ajoute alors la contribution d'une vitesse de diffusion corrective \mathbf{V}^c pour

assurer la conservation de la masse totale de gaz (Eq. 2.26) [197]. Le flux de diffusion des espèces \mathbf{J}_k qui prend en compte cette correction est défini par l'Eq. 2.27.

$$V_i^c = \sum_{k=1}^N D_k \frac{W_k}{\bar{W}} \frac{\partial X_k}{\partial x_i} \quad (2.26)$$

$$J_{i,k} = \rho Y_k \left(V_i^k + V_i^c \right) = -\rho \left(D_k \frac{W_k}{\bar{W}} \frac{\partial X_k}{\partial x_i} - Y_k V_i^c \right) \quad (2.27)$$

où D_k est la diffusivité de l'espèce k dans le mélange définie en section 2.6.

2.5 Diffusion de la chaleur

Le flux de chaleur total \mathbf{q} est la somme de deux termes : le flux de chaleur par conduction, que l'on modélise par une loi de Fourier, et le flux de chaleur dû à la diffusion des espèces (cf. section 2.4). Ces deux termes sont détaillés dans l'Eq. 2.29.

$$q_i = -\lambda \frac{\partial T}{\partial x_i} + \sum_{k=1}^N J_{i,k} h_{s,k} \quad (2.28)$$

$$q_i = \underbrace{-\lambda \frac{\partial T}{\partial x_i}}_{\text{conduction}} + \underbrace{-\rho \sum_{k=1}^N \left(D_k \frac{W_k}{\bar{W}} \frac{\partial X_k}{\partial x_i} - Y_k V_i^c \right) h_{s,k}}_{\text{diffusion des espèces}} \quad (2.29)$$

où λ est la conductivité thermique du mélange définie en section 2.6.

2.6 Coefficients de transport diffusif

Dans la plupart des codes de mécanique des fluides utilisant un mélange de plusieurs espèces, la viscosité dynamique μ est supposée indépendante de la composition du mélange et proche de celle de l'air¹. La loi puissance (Eq. 2.30) est une approximation réaliste qui prend en compte les variations de la viscosité dynamique en fonction de la température.

$$\mu = \mu_{ref} \left(\frac{T}{T_{ref}} \right)^b \quad (2.30)$$

où μ_{ref} est la viscosité mesurée à la température T_{ref} généralement dans le mélange de gaz frais. L'exposant b est typiquement dans la plage 0.5-1.0 (air : $b = 0.76$).

¹Les erreurs liées à cette hypothèse sont faibles tant que le mélange est un gaz parfait

La conductivité thermique du mélange est définie par l'Eq. 2.31 qui utilise un nombre de Prandtl Pr supposé constant. La diffusivité thermique est définie par l'Eq. 2.32.

$$\lambda = \frac{\mu \overline{C_p}}{Pr} \quad (2.31)$$

$$D_{th} = \frac{\mu}{\rho Pr} \quad (2.32)$$

La diffusivité moléculaire D_k est exprimée à l'aide des coefficients binaires D_{ij} obtenus à l'aide de la théorie cinétique des gaz [105]. La diffusivité moléculaire D_k est définie par l'Eq. 2.33 [22].

$$D_k = \frac{1 - Y_k}{\sum_{j \neq k}^N X_j / D_{jk}} \quad (2.33)$$

Les coefficients binaires D_{ij} sont des fonctions complexes dépendant des intégrales de collision et des variables thermodynamiques. Dans un code DNS utilisant une chimie complexe, utiliser l'Eq. 2.33 a un sens. À l'inverse, les codes LES qui utilisent un schéma cinétique simplifié ne nécessitent pas une modélisation aussi précise. On adopte donc une approche simplifiée en faisant l'hypothèse que les nombres de Schmidt de chaque espèce Sc_k sont constants. La diffusivité moléculaire D_k est alors définie par :

$$D_k = \frac{\mu}{\rho Sc_k} \quad (2.34)$$

où Sc_k est le nombre de Schmidt de l'espèce k supposé constant.

Pr et Sc_k modélisent la diffusion laminaire thermique et moléculaire. Leurs valeurs sont obtenues à l'aide du logiciel PREMIX, inclus dans l'ensemble logiciel CHEMKIN [113], en calculant leur valeur dans les gaz brûlés dans un calcul de flamme plane laminaire de prémélange.

2.7 Cinétique chimique

Le terme source s_c de l'Eq. 2.1 est défini par : $s_c = (0, 0, 0, \dot{\omega}_T, \dot{\omega}_k)^T$ avec $\dot{\omega}_T$ le taux de dégagement de chaleur et $\dot{\omega}_k$ le taux de réaction de l'espèce k . Le modèle de combustion implanté dans AVBP est une loi d'Arrhénius écrite pour N réactifs \mathcal{M}_{k_j} et M réactions. Les réactions se mettent sous la forme définie par l'Eq. 2.35. Le taux de réaction $\dot{\omega}_k$ de l'espèce k est défini par l'Eq. 2.36 comme la somme des taux de réaction $\dot{\omega}_{k,j}$ de l'espèce k dans chaque réaction j , j variant de 1 à M . Les coefficients stoechiométriques des réactifs $\nu'_{k,j}$ et des produits $\nu''_{k,j}$ permettent de calculer les coefficients globaux $\nu_{k,j} = \nu''_{k,j} - \nu'_{k,j}$. \mathcal{Q}_j est le taux d'avancement de la réaction j définie par l'Eq. 2.37. $K_{f,j}$ et $K_{r,j}$ sont les constantes des réactions directe et inverse définies respectivement par les Eq. 2.38 et 2.39. $A_{f,j}$ est le facteur pré-exponentiel et

$E_{a,j}$ est l'énergie d'activation. $K_{r,j}$ est imposé par l'hypothèse d'équilibre thermodynamique.

$$\sum_{k=1}^N \nu'_{kj} \mathcal{M}_{kj} \rightleftharpoons \sum_{k=1}^N \nu''_{kj} \mathcal{M}_{kj}, \quad j = 1, M \quad (2.35)$$

$$\dot{\omega}_k = \sum_{j=1}^M \dot{\omega}_{kj} = W_k \sum_{j=1}^M \nu_{kj} \mathcal{Q}_j \quad (2.36)$$

$$\mathcal{Q}_j = K_{f,j} \prod_{k=1}^N \left(\frac{\rho Y_k}{W_k} \right)^{\nu'_{kj}} - K_{r,j} \prod_{k=1}^N \left(\frac{\rho Y_k}{W_k} \right)^{\nu''_{kj}} \quad (2.37)$$

$$K_{f,j} = A_{f,j} \exp\left(-\frac{E_{a,j}}{\mathcal{R}T}\right) \quad (2.38)$$

$$K_{r,j} = \frac{K_{f,j}}{K_{eq}} \quad (2.39)$$

Dans l'Eq. 2.39, K_{eq} est la constante d'équilibre [125] définie par l'Eq. 2.40. La pression de référence est égale à $P_0 = 1 \text{ bar}$. ΔH_j^0 est la variation d'enthalpie (sensible + chimique) définie par l'Eq. 2.41 et ΔS_j^0 la variation d'entropie pour la réaction j définie par l'Eq. 2.42. $\Delta h_{f,k}^0$ est l'enthalpie de formation de l'espèce k à la température $T_0 = 0 \text{ K}$. Le dégagement de chaleur $\dot{\omega}_T$ est donné par l'Eq. 2.43.

$$K_{eq} = \left(\frac{P_0}{\mathcal{R}T} \right)^{\sum_{k=1}^N \nu_{kj}} \exp\left(\frac{\Delta S_j^0}{\mathcal{R}} - \frac{\Delta H_j^0}{\mathcal{R}T} \right) \quad (2.40)$$

$$\Delta H_j^0 = h_j(T) - h_j(0) = \sum_{k=1}^N \nu_{kj} (h_{s,k}(T) + \Delta h_{f,k}^0) \quad (2.41)$$

$$\Delta S_j^0 = \sum_{k=1}^N \nu_{kj} s_k(T) \quad (2.42)$$

$$\dot{\omega}_T = - \sum_{k=1}^N \dot{\omega}_k \Delta h_{f,k}^0 \quad (2.43)$$

Chapitre 3

Équations de conservation pour la phase dispersée

3.1 Introduction

Contrairement aux écoulements de fluides newtoniens qui sont majoritairement décrits par une théorie des milieux continus avec un point de vue eulérien, la dynamique des sprays peut être abordée sous différentes approches théoriques. Dans l'approche lagrangienne (notée L), on considère la phase dispersée comme un ensemble de particules discrètes de petite taille auxquelles on applique la mécanique du point. Dans l'approche eulérienne (notée E), le spray est vu comme un milieu continu analogue à un fluide et constitué des propriétés moyennes locales de l'ensemble des particules. Afin de comprendre le choix fait dans cette étude, les approches lagrangienne et eulériennes sont présentées de manière succincte dans les sections 3.1.1 et 3.1.2. La suite de ce chapitre (sections 3.2 à 3.3) est consacrée à la description du formalisme eulérien statistique.

Note : Par la suite, on parle indifféremment de phase dispersée ou de phase liquide pour définir le spray de gouttelettes (appelées particules dans le formalisme eulérien statistique). Par opposition, l'écoulement gazeux est appelé phase continue, phase porteuse ou phase gazeuse.

3.1.1 Approche lagrangienne

La description Euler-Lagrange (EL) du spray consiste à suivre la trajectoire lagrangienne (L) de chaque gouttelette en lui appliquant les transferts de quantité de mouvement, de masse et de chaleur avec le gaz porteur dont l'écoulement est décrit du point de vue eulérien (E). À chaque instant, on résout

le système suivant pour chaque gouttelette (k) présente dans l'écoulement :

$$\frac{dX_{p,i}^{(k)}}{dt} = V_{p,i}^{(k)} \quad (3.1)$$

$$\frac{d}{dt} \left(m_p^{(k)} V_{p,i}^{(k)} \right) = F_{p,i}^{(k)} \quad (3.2)$$

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

$$\frac{d}{dt} \left(m_p^{(k)} C_p^{(k)} T_p^{(k)} \right) = \dot{Q}_p^{(k)} \quad (3.4)$$

avec $\vec{X}_p^{(k)}$ la position de la goutte, $\vec{V}_p^{(k)}$ sa vitesse, $m_p^{(k)}$ sa masse, $C_p^{(k)}$ sa chaleur spécifique à pression constante, $T_p^{(k)}$ sa température, $\mathbf{F}_p^{(k)}$ les forces extérieures agissant sur la goutte, $\dot{m}_p^{(k)}$ le taux d'évaporation et $\dot{Q}_p^{(k)}$ le taux de transfert de chaleur avec le gaz porteur.

Le principal avantage de la méthode EL est l'absence de modélisation nécessaire pour traiter des problèmes tels que les effets de polydispersion (particules de différents diamètres) et de croisement de trajectoires. Ainsi, elle est couramment employée dans les codes RANS et son potentiel en LES a été démontré [141, 149, 180]. Sur le plan numérique, la localisation des particules sur la grille eulérienne nécessite des algorithmes performants. Dans le cas de calculs parallèles par décomposition de domaine, l'échange de particules entre processeurs est une tâche délicate [84]. Une fois les particules repérées, des interpolations sont nécessaires pour transférer les termes de couplage de la grille eulérienne aux particules et inversement. Si l'on souhaite éviter une diffusion numérique importante lors de ces interpolations, des schémas d'ordre élevé donc coûteux en temps de calcul sont requis.

Sur le plan informatique, le suivi instantané de plusieurs millions voire centaines de millions de particules¹ impliquent des ressources de calculs qui dépassent les capacités des calculateurs d'aujourd'hui et des prochaines années. Ce problème est généralement résolu en adoptant une approche lagrangienne stochastique où les particules physiques dont les propriétés statistiques sont supposées identiques sont regroupées au sein d'une particule numérique appelée *particule stochastique*. Le nombre de particules à suivre est alors considérablement réduit mais une modélisation supplémentaire devient nécessaire [169]. De plus, afin de maintenir la précision requise par la LES, l'approche lagrangienne stochastique doit conserver un grand nombre de particules stochastiques ce qui nécessite le recours au parallélisme.

Pour un calcul LES parallèle, il est facile de montrer que seule la décomposition en domaine est efficace lorsqu'on utilise un grand nombre de processeurs. Toutefois, un maillage découpé pour le solveur gazeux n'est pas optimisé pour le solveur lagrangien. En effet, la distribution de particules dans le domaine de calcul peut être très différente de la distribution de cellules eulériennes et varie généralement au cours du temps. Un très grand nombre de trajectoires lagrangiennes sont alors calculées par quelques processeurs, ce qui réduit fortement l'efficacité du calcul parallèle. Dans une séquence d'allumage, par exemple, la chambre est initialement remplie de gouttelettes de carburant de manière plus ou moins uniforme. Durant le calcul, la propagation de la flamme de la zone d'allumage vers la zone où elle se stabilise modifie considérablement la distribution des gouttelettes car ces dernières disparaissent par évaporation dans le front de flamme. Pour conserver un parallélisme efficace sur des milliers de processeurs, il est

¹120 millions de gouttes dans le calcul de la chambre *Vesta* (cf. partie IV)

alors nécessaire de re-découper le domaine au cours du calcul au moyen d'une méthode d'équilibrage dynamique [97].

3.1.2 Approche eulérienne

Les difficultés numériques et informatiques de l'approche EL ont motivé la modélisation des sprays par des approches Euler-Euler (EE). Dans ce cas, on ne s'intéresse pas à l'histoire de chaque particule mais à leurs propriétés moyennes en regardant le spray comme un fluide continu. Le type de moyenne — volumique ou statistique — conduit à deux formalismes qui diffèrent par leurs hypothèses, la définition des grandeurs transportées et la nature des modèles de fermeture mais qui produisent un système d'équations présentant de fortes similitudes.

Filtrage volumique

Simonin [236] et Kaufmann [110] fournissent une description détaillée du formalisme eulérien en filtrage volumique (appelé aussi *modèle à deux fluides*). La méthode suppose que les équations de Navier-Stokes sont valables dans la phase gazeuse et dans la phase dispersée. Les différentes étapes conduisant aux équations filtrées se résument ainsi :

1. on multiplie les équations dans chaque phase par une fonction indicatrice de phase χ_ϕ valant 1 dans la phase ϕ et 0 sinon ;
2. on applique les relations de commutation entre les opérateur de dérivation et χ_ϕ ;
3. on applique l'opérateur de moyenne volumique $\langle \cdot \rangle_\Omega$ sur le volume de contrôle Ω ;
4. on modélise les termes non résolus.

Si on ne s'intéresse qu'à la conservation de la masse et de la quantité de mouvement, le système obtenu se présente sous la forme suivante :

$$\frac{\partial}{\partial t} \alpha_\phi \rho_\phi + \frac{\partial}{\partial x_j} \alpha_\phi \rho_\phi U_{\phi,j} = S_{\alpha,\phi} \quad (3.5)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} \alpha_\phi \rho_\phi U_{\phi,i} + \frac{\partial}{\partial x_j} \alpha_\phi \rho_\phi U_{\phi,j} U_{\phi,i} = S_{u,\phi} \quad (3.6)$$

où $\alpha_\phi = \langle \chi_\phi \rangle_\Omega$ est la fraction volumique de la phase ϕ , ρ_ϕ sa masse volumique et $U_{\phi,i}$ sa vitesse moyenne filtrée au sens de Favre ($\alpha_\phi \rho_\phi U_{\phi,i} = \langle \rho_\phi u_\phi \chi_\phi \rangle_\Omega$). $S_{\alpha,\phi}$ et $S_{u,\phi}$ sont des termes à modéliser comprenant les effets de la pression, de la viscosité, des échanges entre phases et des fluctuations d'échelles inférieures à Ω .

Filtrage statistique

Les équations Euler-Euler en moyenne statistique sont obtenues à partir d'un formalisme issu de la théorie cinétique des gaz formulée par Chapman et Cowling [44]. On trouve une démonstration détaillée

de cette méthode dans les thèses de Kaufmann [110] et Mossa [173]. Dans cette thèse, on se limite à décrire les principales étapes (cf. sections 3.2 à 3.3) résumées ici de la façon suivante :

1. on définit une fonction densité de présence de particules (FDP) conditionnée par une réalisation du fluide porteur ;
2. on écrit l'équation de transport décrivant l'évolution de cette FDP ;
3. au moyen de cette FDP, on définit une moyenne statistique locale des propriétés du spray ;
4. on multiplie cette équation par une fonction quelconque Ψ du spray, puis on la filtre grâce à la moyenne définie précédemment afin d'établir l'équation générale d'Enskog ;
5. en remplaçant Ψ par les quantités appropriées, on établit un système d'équation de conservation pour le mouvement moyen dit *mésoscopique* ;
6. on recherche des modèles de fermeture pour le mouvement décorrélé et pour les termes d'échange avec la phase porteuse.

Discussion

L'inconvénient de la description EE en moyenne volumique est de négliger les échelles inférieures à la taille caractéristique du volume de contrôle. Contrairement à la LES pour l'écoulement gazeux, il n'existe pas d'approche claire pour modéliser les effets de ces petites échelles [110]. On peut cependant espérer augmenter la précision de la méthode en diminuant la taille du volume de contrôle. Cependant, l'hypothèse de milieu continu limite la taille minimale de ce volume en y imposant un nombre suffisant de particules. La description EE statistique, quant à elle, n'impose pas de longueur caractéristique et reste valide *a priori* pour toutes les échelles (supérieures bien entendu à la taille des particules). Par construction, la contrainte sur la statistique du volume de contrôle ne se pose pas. Par ailleurs, le mouvement non résolu qui représente l'écart par rapport au mouvement mésoscopique peut être modélisé [76, 237]. Dans la présente étude, le choix s'est donc porté sur l'approche Euler-Euler en moyenne statistique.

Contrairement à l'approche EL, les équations obtenues par la méthode EE sont proches des équations de la phase gazeuse, ce qui permet d'utiliser les mêmes algorithmes informatiques que le solveur gazeux et de profiter pleinement des capacités de parallélisme. De plus, le couplage informatique ne pose aucun problème puisque la grille de calcul est la même pour les deux phases. En d'autres termes, le code de calcul résolvant l'écoulement diphasique en Euler-Euler n'est qu'une extension du code gazeux auquel on ajoute un jeu de variables à transporter ainsi que des modèles pour les termes de fermeture et de couplage. Le temps de calcul n'est alors plus lié aux nombres de particules à transporter mais au nombre d'équations eulériennes décrivant la phase dispersée et la complexité des modèles de fermeture. En général, il ne dépasse pas le double du temps requis pour un calcul monophasique équivalent.

La principale faiblesse de l'approche EE est sa difficulté à modéliser les configurations où les grandeurs moyennes ne permettent pas de représenter le spray de façon réaliste. C'est le cas en particulier lorsque le spray présente des caractéristiques polydisperses, c.-à-d. en présence d'une distribution de diamètres de gouttes pour une même position. À partir de l'approche initialement décrite par Greenberg *et al.* [94], Laurent et Massot [128] et Laurent *et al.* [129] proposent une méthode sectionnelle dans laquelle le spray est divisé en sections contenant une classe de diamètre, chaque section nécessitant son

propre jeu d'équations eulériennes. Les auteurs montrent que quelques sections suffisent pour représenter de façon réaliste une large distribution de diamètres. Dans sa thèse, Mossa [173] propose un modèle où la distribution des tailles est présumée et où une équation de transport pour la densité de surface de gouttes permet de prendre en compte les effets polydispersés sur la dynamique du spray. L'approche EE se heurte également aux cas où les trajectoires de gouttes au sein d'un même volume de contrôle eulérien sont très différentes². Toutefois, Desjardins *et al.* [63] montrent qu'il est possible d'utiliser la méthode *DQMOM* [144] pour prédire le croisement de trajectoires en formulation eulérienne. Concernant la LES d'écoulements gaz-particules, l'étude comparative de Riber *et al.* [207] montre que l'approche EE statistique donne des résultats équivalents à l'approche EL bien que les fluctuations turbulentes de la phase dispersée soient mieux prédites en EL. Enfin, le spray possédant des propriétés analogues à un fluide fortement compressible, la méthode eulérienne doit transporter des fronts très raides qui peuvent poser des problèmes numériques. La solution consiste à utiliser des schémas peu dispersifs et un opérateur de diffusion artificielle [206] (cf. section 5.3).

3.2 De la description statistique du spray aux équations de conservation eulériennes

3.2.1 Équation de transport de la fonction densité de présence

On considère une particule quelconque dont la vitesse \mathbf{u}_p , la température T_p , la masse m_p et la position \mathbf{x}_p à l'instant t peuvent prendre les valeurs respectives \mathbf{c}_p , ζ_p , μ_p et \mathbf{x} dans l'espace des phases (c.-à-d. l'espace des possibles). On définit la fonction $W_p(\mathbf{c}_p, \zeta_p, \mu_p, \mathbf{x}, t)$ de l'espace des phases décrivant l'histoire de cette particule au cours du temps :

$$W_p(\mathbf{c}_p, \zeta_p, \mu_p, \mathbf{x}, t) = \delta(\mathbf{c}_p - \mathbf{u}_p(t)) \delta(\zeta_p - T_p(t)) \delta(\mu_p - m_p(t)) \delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}_p(t)) \quad (3.7)$$

avec :

$$\begin{aligned} \delta(\phi - \phi_p(t)) &= 1 \quad \text{si} \quad \phi = \phi_p(t) \\ \delta(\phi - \phi_p(t)) &= 0 \quad \text{sinon} \end{aligned}$$

ϕ représentant \mathbf{c}_p , ζ_p , μ_p ou \mathbf{x} et ϕ_p la variable particulière correspondante.

On définit la réalisation \mathcal{H}_p du spray comme l'ensemble des fonctions W_p décrivant le mouvement des N_p particules. En prenant la moyenne d'ensemble des réalisations \mathcal{H}_p conditionnée par une réalisation \mathcal{H}_f de la phase porteuse, on définit la fonction densité volumique de présence de particules³ (FDP) :

$$f_p(\mathbf{c}_p, \zeta_p, \mu_p, \mathbf{x}, t, \mathcal{H}_f) = \langle W_p(\mathbf{c}_p, \zeta_p, \mu_p, \mathbf{x}, t) | \mathcal{H}_f \rangle \quad (3.8)$$

²Dans le cas extrême où les trajectoires sont opposées, définir une vitesse moyenne n'a plus de sens...

³On trouve fréquemment cette fonction désignée comme *fonction densité de probabilité* (ou *pdf* pour *probability density function* en anglais). Cette appellation n'est pas rigoureuse dans la mesure où la fonction f_p représente une concentration probable de particules et non une probabilité au sens strict : contrairement à une véritable *pdf*, son intégration dans l'espace des phases n'est pas égale à l'unité mais au nombre total moyen de particules sur l'ensemble des réalisations possibles.

où la moyenne statistique $\langle \cdot | \mathcal{H}_f \rangle$ s'obtient en prenant un grand nombre \mathcal{N}_p de réalisations \mathcal{H}_p du spray pour une réalisation unique \mathcal{H}_f de la phase gazeuse :

$$f_p(\mathbf{c}_p, \zeta_p, \mu_p, \mathbf{x}, t | \mathcal{H}_f) = \lim_{\mathcal{N}_p \rightarrow \infty} \left[\frac{1}{\mathcal{N}_p} \sum_{m=1}^{\mathcal{N}_p} W_p^{(m)}(\mathbf{c}_p, \zeta_p, \mu_p, \mathbf{x}, t) \right] \quad (3.9)$$

La quantité $f_p(\mathbf{c}_p, \zeta_p, \mu_p, \mathbf{x}, t | \mathcal{H}_f) d\mathbf{c}_p d\zeta_p d\mu_p d\mathbf{x}$ représente le nombre probable de particules à l'instant t ayant une position \mathbf{x}_p , une vitesse \mathbf{u}_p , une température T_p et une masse m_p telles que $\mathbf{x} \leq \mathbf{x}_p < \mathbf{x} + d\mathbf{x}$, $\mathbf{c}_p \leq \mathbf{u}_p < \mathbf{c}_p + d\mathbf{c}_p$, $\zeta_p \leq T_p < \zeta_p + d\zeta_p$ et $\mu_p \leq m_p < \mu_p + d\mu_p$.

La fonction f_p est une FDP eulérienne qui vérifie une équation de transport de type Boltzmann :

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} f_p + \frac{\partial}{\partial x_j} c_{p,j} f_p &= \left(\frac{\partial f_p}{\partial t} \right)_{coll} \\ &- \frac{\partial}{\partial c_{p,j}} \left\langle \frac{du_{p,j}}{dt} | \mathbf{c}_p, \zeta_p, \mu_p \right\rangle f_p \\ &- \frac{\partial}{\partial \zeta_p} \left\langle \frac{dT_p}{dt} | \mathbf{c}_p, \zeta_p, \mu_p \right\rangle f_p \\ &- \frac{\partial}{\partial \mu_p} \left\langle \frac{dm_p}{dt} | \mathbf{c}_p, \zeta_p, \mu_p \right\rangle f_p \end{aligned} \quad (3.10)$$

$\left(\frac{\partial f_p}{\partial t} \right)_{coll}$ représente la variation temporelle de la FDP due aux interactions entre particules (collisions, coalescence, rupture, etc.). $\frac{d}{dt}$ est la variation lagrangienne due aux échanges avec le gaz (traînée, changement de phase, transfert de chaleur, etc.) ou à des effets volumiques (gravité, rayonnement, etc.). $\langle \cdot | \mathbf{c}_p, \zeta_p, \mu_p \rangle$ est la moyenne d'ensemble sur les particules telles que $\mathbf{u}_p = \mathbf{c}_p$, $T_p = \zeta_p$ et $m_p = \mu_p$.

3.2.2 Moyennes de phase et mouvement mésoscopique

Par la suite, on utilise la notation indiquée l pour désigner les grandeurs moyennes de la phase dispersée constituée dans cette étude de gouttelettes de carburant liquide.

Moyenne d'ensemble

La moyenne de phase d'une fonction particulière quelconque $\Psi(\mathbf{u}_p, T_p, m_p)$ correspond à la moyenne de la grandeur Ψ sur l'ensemble des réalisations particulières possibles. Elle est obtenue par intégration sur l'espace des phases — c'est-à-dire l'espace des propriétés des particules — pondérée par la fonction densité de présence :

$$\{\Psi\}_l = \frac{1}{\check{n}_l} \int \Psi(\mathbf{c}_p, \zeta_p, \mu_p) f_p(\mathbf{c}_p, \zeta_p, \mu_p, \mathbf{x}, t | \mathcal{H}_f) d\mathbf{c}_p d\zeta_p d\mu_p \quad (3.11)$$

où \check{n}_l est le nombre moyen de particules par unité de volume appelé aussi densité de particules et défini par :

$$\check{n}_l(\mathbf{x}, t) = \int f_p(\mathbf{c}_p, \zeta_p, \mu_p, \mathbf{x}, t | \mathcal{H}_f) d\mathbf{c}_p d\zeta_p d\mu_p \quad (3.12)$$

Moyenne d'ensemble massique

De même que la moyenne de Fabre est plus adaptée dans les écoulements turbulents compressibles gazeux (cf. section 4.2.1), il est pratique de définir une moyenne de phase pondérée par la masse de la particule lorsque celle-ci varie (par évaporation, par exemple) :

$$\check{\Psi} = \langle \Psi \rangle_l = \frac{1}{\rho_l \check{\alpha}_l} \int \mu_p \Psi(\mathbf{c}_p, \zeta_p, \mu_p) f_p(\mathbf{c}_p, \zeta_p, \mu_p, \mathbf{x}, t | \mathcal{H}_f) d\mathbf{c}_p d\zeta_p d\mu_p \quad (3.13)$$

où ρ_l est la masse volumique du liquide et $\check{\alpha}_l$ est la fraction volumique de la phase dispersée dans le mélange diphasique définie par :

$$\rho_l \check{\alpha}_l = \check{n}_l \{m_p\}_p = \int \mu_p f_p(\mathbf{c}_p, \zeta_p, \mu_p, \mathbf{x}, t | \mathcal{H}_f) d\mathbf{c}_p d\zeta_p d\mu_p \quad (3.14)$$

On note la relation suivante utile pour les développements ultérieurs :

$$\rho_l \check{\alpha}_l \langle \Psi \rangle_l = \check{n}_l \{m_p \Psi\}_l \quad (3.15)$$

$$\text{avec : } m_p = \rho_l \frac{\pi}{6} d^3 \quad (3.16)$$

où d est le diamètre de particule. Dans le cas d'un spray monodisperse, on a $m_p = \rho_l \frac{\pi}{6} d^3 = cste$ à la position \mathbf{x} et à l'instant t . Les deux moyennes sont alors équivalentes :

$$\langle \Psi \rangle_l = \{\Psi\}_l \quad (3.17)$$

et $\check{\alpha}_l$ et \check{n}_l sont liés par la relation suivante :

$$\check{\alpha}_l = \frac{\pi}{6} \check{n}_l d^3 \quad (3.18)$$

où d représente le diamètre local instantané commun à toutes les particules. Ainsi, dans les développements ultérieurs où l'hypothèse de spray monodisperse sera utilisée, d pourra aussi bien désigner une propriété de la particule lagrangienne qu'une grandeur eulérienne du spray.

Grandeurs mésoscopiques et grandeurs décorréelées

Lorsqu'on remplace Ψ par la vitesse de particulaire \mathbf{u}_p dans l'Eq. 3.13, on obtient la vitesse moyenne locale instantanée du spray liquide conditionnée par la réalisation \mathcal{H}_f de l'écoulement gazeux :

$$\check{\mathbf{u}}_l(\mathbf{x}, t | \mathcal{H}_f) = \langle \mathbf{u}_p \rangle_l = \frac{1}{\rho_l \check{\alpha}_l} \int \mu_p \mathbf{c}_p f_p d\mathbf{c}_p d\zeta_p d\mu_p \quad (3.19)$$

$\check{\mathbf{u}}_l$ est une vitesse moyenne eulérienne appelée *vitesse mésoscopique*. Pour toute particule individuelle située en \mathbf{x} à l'instant t , on peut exprimer la vitesse propre \mathbf{u}_p de cette particule comme la somme de cette *vitesse mésoscopique* et d'une composante résiduelle \mathbf{u}_p'' appelée *vitesse décorrélée* :

$$\mathbf{u}_p = \check{\mathbf{u}}_l + \mathbf{u}_p'' \quad \text{avec} \quad \langle \mathbf{u}_p'' \rangle_l = 0 \quad (3.20)$$

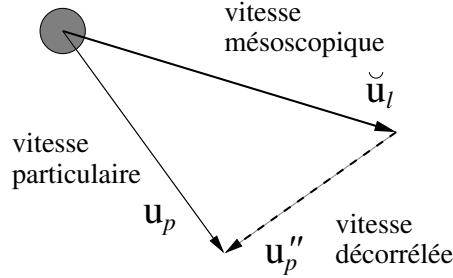


FIG. 3.1 - Décomposition de la vitesse particulaire lagrangienne \mathbf{u}_p en une partie mésoscopique $\check{\mathbf{u}}_l$ et une partie décorrélée \mathbf{u}_p''

Cette décomposition permet de voir le spray comme un ensemble de particules mues par un mouvement de groupe appelé *mouvement mésoscopique* où chaque particule se distingue de ce mouvement par sa *vitesse décorrélée* (cf. Fig. 3.1).

Dans la section 3.2.4, on constate que le mouvement décorrélé ou RUM (pour *random uncorrelated motion* en anglais) a un effet sur le mouvement mésoscopique (Eq. 3.33). Février *et al.* [76] proposent donc une approche où le RUM est pris en compte dans la modélisation du spray. On définit ainsi plusieurs grandeurs qui jouent un rôle dans cette approche :

Le tenseur des vitesses décorrélées $\delta\check{R}_l$:

$$\delta\check{R}_{l,ij}(\mathbf{x}, t|\mathcal{H}_f) = \langle u_{p,i}'' u_{p,j}'' \rangle_l = \frac{1}{\rho_l \check{\alpha}_l} \int \mu_p (c_{p,i} - \check{u}_{l,i}) (c_{p,j} - \check{u}_{l,j}) f_p d\mathbf{c}_p d\zeta_p d\mu_p \quad (3.21)$$

L'énergie décorrélée $\delta\check{\theta}_l$:

$$\delta\check{\theta}_l = \frac{1}{2} \langle u_{p,i}'' u_{p,i}'' \rangle_l \quad (3.22)$$

$\delta\check{\theta}_l$ correspond à la demi-trace du tenseur des vitesses décorrélées et s'obtient en écrivant son équation de transport (cf. section 3.2.4).

La partie déviatorique du tenseur des vitesses décorrélées $\delta\check{R}_l^*$:

$$\delta\check{R}_{l,ij}^* = \delta\check{R}_{l,ij} - \frac{2}{3} \delta\check{\theta}_l \delta_{ij} \quad (3.23)$$

Le tenseur triple des vitesses décorrélées $\delta\check{S}_l$:

$$\begin{aligned} \delta\check{S}_{l,ijk}(\mathbf{x}, t|\mathcal{H}_f) &= \langle u_{p,i}'' u_{p,j}'' u_{p,k}'' \rangle_l \\ &= \frac{1}{\rho_l \check{\alpha}_l} \int \mu_p (c_{p,i} - \check{u}_{l,i}) (c_{p,j} - \check{u}_{l,j}) (c_{p,k} - \check{u}_{l,k}) f_p d\mathbf{c}_p d\zeta_p d\mu_p \end{aligned} \quad (3.24)$$

Enfin, dans le but de connaître la température des gouttes qui conditionne leur taux d'évaporation (cf. section 3.3.2), on définit l'enthalpie sensible particulaire $h_{s,p}$ qui se compose de deux parties :

L'enthalpie sensible mésoscopique $\check{h}_{s,l} = C_{p,l} (\check{T}_l - T_{l,ref})$:

$$\check{h}_{s,l}(\mathbf{x}, t | \mathcal{H}_f) = \frac{1}{\rho_l \check{\alpha}_l} \int \mu_p C_{p,l} (\zeta_p - T_{l,ref}) f_p d\mathbf{c}_p d\zeta_p d\mu_p \quad (3.25)$$

où $C_{p,l}$ est la chaleur massique à pression constante du liquide et \check{T}_l est la température liquide mésoscopique. $T_{l,ref}$ est une température de référence fixée à une valeur proche de \check{T}_l de sorte que $C_{p,l}$ puisse être supposée constante entre \check{T}_l et $T_{l,ref}$.

L'enthalpie sensible décorrélée $h_p'' = C_{p,l} T_p''$:

$$h_p'' = h_{s,p} - \check{h}_{s,p} \quad \text{avec} \quad \langle h_p'' \rangle_l = 0 \quad (3.26)$$

3.2.3 Équation générale d'Enskog

En multipliant l'équation de Boltzmann (Eq. 3.10) par une fonction particulière quelconque Ψ et en l'intégrant par partie sur l'espace des phases (opérateur $\int \cdot d\mathbf{c}_p d\zeta_p d\mu_p$), on obtient l'équation générale d'Enskog pour la fonction Ψ :

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} \rho_l \check{\alpha}_l \langle \Psi \rangle_l + \frac{\partial}{\partial x_i} \rho_l \check{\alpha}_l \langle u_{p,i} \Psi \rangle_l &= \mathbb{C}(m_p \Psi) \\ &+ \rho_l \check{\alpha}_l \left\langle \frac{du_{p,j}}{dt} \frac{\partial \Psi}{\partial u_{p,j}} \right\rangle_l + \rho_l \check{\alpha}_l \left\langle \frac{dT_p}{dt} \frac{\partial \Psi}{\partial T_p} \right\rangle_l \\ &+ \rho_l \check{\alpha}_l \left\langle \frac{dm_p}{dt} \left(\frac{\partial \Psi}{\partial m_p} + \frac{\Psi}{m_p} \right) \right\rangle_l \end{aligned} \quad (3.27)$$

où $\mathbb{C}(m_p \Psi)$ est la variation de $\rho_l \check{\alpha}_l \check{\Psi}$ due aux interactions entre particules et sera négligée par la suite. En notant que $\langle u_{p,i} \Psi \rangle_l = \langle u_{p,i} \rangle_l \langle \Psi \rangle_l + \langle u_{p,i}'' \Psi \rangle_l$, on peut réécrire l'Eq. 3.27 sous la forme suivante :

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} \rho_l \check{\alpha}_l \check{\Psi} + \frac{\partial}{\partial x_i} \rho_l \check{\alpha}_l \check{u}_{l,i} \check{\Psi} &= \mathbb{T}(\Psi) + \mathbb{C}(m_p \Psi) \\ &+ \rho_l \check{\alpha}_l \left\langle \frac{du_{p,j}}{dt} \frac{\partial \Psi}{\partial u_{p,j}} \right\rangle_l + \rho_l \check{\alpha}_l \left\langle \frac{dT_p}{dt} \frac{\partial \Psi}{\partial T_p} \right\rangle_l \\ &+ \rho_l \check{\alpha}_l \left\langle \frac{dm_p}{dt} \left(\frac{\partial \Psi}{\partial m_p} + \frac{\Psi}{m_p} \right) \right\rangle_l \end{aligned} \quad (3.28)$$

où $\mathbb{T}(\Psi)$ est l'opérateur de flux décorrélé défini par :

$$\mathbb{T}(\Psi) = - \frac{\partial}{\partial x_i} \rho_l \check{\alpha}_l \langle u_{p,i}'' \Psi \rangle_l \quad (3.29)$$

Lorsque la fonction Ψ dépend également du temps et de l'espace (cas où l'on dérive l'équation de l'énergie décorrélée Eq. 3.34), les termes suivants viennent s'ajouter au membre de droite des Eq. 3.27 et 3.28 :

$$\rho_l \check{\alpha}_l \left\langle \frac{\partial \Psi}{\partial t} \right\rangle_l + \rho_l \check{\alpha}_l \left\langle u_{p,i} \frac{\partial \Psi}{\partial x_i} \right\rangle_l \quad (3.30)$$

3.2.4 Équations de conservation

Les équations de conservations eulériennes pour la phase dispersée sont obtenues en appliquant l'équation générale d'Enskog (Eq. 3.28) à différentes fonctions particulières.

Conservation de la densité de particules

En prenant $\Psi = \frac{1}{m_p}$, on obtient :

$$\frac{\partial}{\partial t} \check{n}_l + \frac{\partial}{\partial x_i} \check{n}_l \check{u}_{l,i} = \mathbb{T}(m_p^{-1}) + \mathbb{C}(1) \quad (3.31)$$

On note que dans le cas d'un spray monodisperse, toutes les particules ont localement une masse identique ($m_p = cste$) d'où : $\mathbb{T}(m_p^{-1}) = -\frac{\partial}{\partial x_i} \rho_l \check{\alpha}_l \left\langle \frac{u_{p,i}''}{m_p} \right\rangle_l = 0$.

Conservation de la fraction volumique

En prenant $\Psi = 1$, on obtient :

$$\frac{\partial}{\partial t} \rho_l \check{\alpha}_l + \frac{\partial}{\partial x_i} \rho_l \check{\alpha}_l \check{u}_{l,i} = \mathbb{T}(1) + \mathbb{C}(m_p) + \Gamma_l \quad (3.32)$$

où $\mathbb{T}(1) = 0$ et $\Gamma_l = -\Gamma = \rho_l \check{\alpha}_l \left\langle \frac{1}{m_p} \frac{dm_p}{dt} \right\rangle_l = \check{n}_l \left\{ \frac{dm_p}{dt} \right\}_l$ est le taux de variation de masse par changement de phase (évaporation).

Conservation de la quantité de mouvement

En prenant $\Psi = \mathbf{u}_p$, on obtient :

$$\frac{\partial}{\partial t} \rho_l \check{\alpha}_l \check{u}_{l,i} + \frac{\partial}{\partial x_j} \rho_l \check{\alpha}_l \check{u}_{l,i} \check{u}_{l,j} = \mathbb{T}(u_{p,i}'') + \mathbb{C}(m_p \mathbf{u}_p) + F_{d,i} + \Gamma_{u,i} \quad (3.33)$$

$\mathbb{T}(u_{p,i}'')$ représente le transport de quantité de mouvement par la vitesse décorrélée. $\mathbb{C}(m_p \mathbf{u}_p)$ est l'échange de quantité de mouvement entre particules (collisions, rupture, coalescence, etc.). $F_{d,i} = \rho_l \check{\alpha}_l \left\langle \frac{F_{p,i}}{m_p} \right\rangle_l = \check{n}_l \{F_{p,i}\}_l$ est l'échange de quantité de mouvement avec la phase gazeuse via la force de traînée \mathbf{F}_p exercée sur chaque particule. $\Gamma_{u,i} = \rho_l \check{\alpha}_l \left\langle \frac{u_{p,i}}{m_p} \frac{dm_p}{dt} \right\rangle_l = \check{n}_l \left\{ u_{p,i} \frac{dm_p}{dt} \right\}_l$ est l'échange de quantité de mouvement avec la phase gazeuse par changement de phase. Dans le cas d'un spray constitué de gouttes ayant localement le même diamètre (spray monodisperse) et la même température, on a : $\Gamma_{u,i} = \Gamma_l \check{u}_{l,i}$.

Conservation de l'énergie décorrelée

En prenant $\Psi = \frac{1}{2}(u_{p,i} - \check{u}_{l,i})(u_{p,i} - \check{u}_{l,i}) = \frac{1}{2}u''_{p,i}u''_{p,i}$ et en ajoutant les termes de l'Eq. 3.30 à l'équation d'Enskog (Eq. 3.28), on obtient :

$$\frac{\partial}{\partial t}\rho_l\check{\alpha}_l\delta\check{\theta}_l + \frac{\partial}{\partial x_i}\rho_l\check{\alpha}_l\check{u}_{l,i}\delta\check{\theta}_l = \mathbb{T}\left(\frac{1}{2}u''_{p,i}u''_{p,i}\right) + \mathbb{C}\left(\frac{1}{2}m_p u''_{p,i}u''_{p,i}\right) + W_\theta + \Gamma_\theta + \mathbb{U}_\theta \quad (3.34)$$

$\mathbb{T}\left(\frac{1}{2}u''_{p,i}u''_{p,i}\right)$ représente le transport d'énergie décorrelée par la vitesse décorrelée. $\mathbb{C}(m_p \mathbf{u}_p)$ est l'échange d'énergie décorrelée entre particules. $W_\theta = \rho_l\check{\alpha}_l\left\langle u''_{p,i}\frac{F_{p,i}}{m_p}\right\rangle_l = \check{n}_l\left\{u''_{p,i}F_{p,i}\right\}_l$ est la variation d'énergie décorrelée due à traînée. $\Gamma_\theta = \rho_l\check{\alpha}_l\left\langle \frac{1}{2}\frac{u''_{p,i}u''_{p,i}}{m_p}\frac{dm_p}{dt}\right\rangle_l = \check{n}_l\left\{\frac{1}{2}u''_{p,i}u''_{p,i}\frac{dm_p}{dt}\right\}_l$ est la variation d'énergie décorrelée due au transfert de masse avec la phase gazeuse. Dans le cas d'un spray constitué de gouttes localement mono-diamètre et mono-température, on a : $\Gamma_\theta = \Gamma_l\delta\check{\theta}_l$. Enfin, $\mathbb{U}_\theta = -\rho_l\check{\alpha}_l\delta\check{R}_{l,ij}\frac{\partial\check{u}_{l,i}}{\partial x_j}$ provient des termes additionnels (Eq. 3.30) et inclut les effets du tenseur décorrelé $\delta\check{R}_l$ sur l'énergie décorrelée.

Conservation de l'enthalpie sensible

En prenant $\Psi = h_{s,p}$, on obtient :

$$\frac{\partial}{\partial t}\rho_l\check{\alpha}_l\check{h}_{s,l} + \frac{\partial}{\partial x_j}\rho_l\check{\alpha}_l\check{u}_{l,j}\check{h}_{s,l} = \mathbb{T}(h''_p) + \mathbb{C}(m_p h_{s,p}) + \Lambda_l + \Phi_l \quad (3.35)$$

$\mathbb{T}(h''_p)$ représente le transport d'enthalpie sensible par la vitesse décorrelée. $\mathbb{C}(m_p \mathbf{u}_p)$ est l'échange d'enthalpie sensible entre particules. $\Phi_l = \rho_l\check{\alpha}_l\left\langle \frac{dh_{s,p}}{dt}\right\rangle_l$ est la variation d'enthalpie sensible due au transfert de chaleur par conduction dans la phase liquide. $\Lambda_l = \rho_l\check{\alpha}_l\left\langle \frac{h_{s,p}}{m_p}\frac{dm_p}{dt}\right\rangle_l = \check{n}_l\left\{h_{s,p}\frac{dm_p}{dt}\right\}_l$ est la variation d'enthalpie sensible due au transfert de masse avec la phase gazeuse. Dans le cas d'un spray constitué de gouttes localement mono-diamètre et mono-température, on a : $\mathbb{T}(h''_p) = 0$ et $\Lambda_l = \Gamma_l h_{s,l}$.

3.2.5 Résumé des hypothèses et des équations de conservation de la phase dispersée

Hypothèses simplificatrices

H1 - Les particules sont des gouttes sphériques indéformables⁴

H2 - Le rapport de masse volumique entre le liquide et le gaz permet de supposer que la seule force exercée par le fluide porteur sur les gouttes est la traînée.

⁴Cette hypothèse revient à supposer que les phases d'atomisation primaire et secondaire sont achevées. Dans un spray, le phénomène de rupture de goutte est caractérisé par le nombre de Weber $We = \rho|\mathbf{u} - \mathbf{u}_p|^2 d/\sigma$ où σ est la tension superficielle du liquide. Les gouttes sont stables en-dessous d'une valeur critique $We_c \approx 12$. Pour $We < 5$, les déformations de l'interface sont négligeables et l'hypothèse de sphéricité est vérifiée [238].

- H3** - La température (donc l'enthalpie sensible) est homogène à l'intérieur de chaque goutte. Cela revient à supposer une conductivité infinie dans la phase liquide.
- H4** - L'effet de la gravité est négligeable⁵.
- H5** - L'écoulement est dilué ($\check{\alpha}_l < 0.01$). Par conséquent, les effets d'encombrement volumique de la phase dispersée sur la phase porteuse sont négligeables : la fraction volumique gazeuse vaut $1 - \check{\alpha}_l \equiv 1$.
- H6** - En vertu de l'hypothèse H5, les interactions goutte-goutte sont négligeables : $\mathbb{C} \equiv 0$.
- H7** - En vertu de l'hypothèse H5, la phase porteuse est faiblement altérée par la présence du spray ce qui permet d'utiliser une FDP conditionnée par une réalisation unique de la phase porteuse⁶.
- H8** - Toutes les gouttes possèdent localement le même diamètre : le spray est dit monodisperse⁷.
- H9** - Toutes les gouttes possèdent localement la même température⁸. Les hypothèses H8 et H9 autorisent une expression simplifiée des termes Γ_l , $\Gamma_{u,i}$, Γ_θ , Λ_l et Φ_l (cf. section 3.3.2).

Équations de conservation

Sous les hypothèses énoncées ci-dessus, les équations de conservation eulériennes qui régissent la phase dispersée se résument ainsi :

$$\frac{\partial}{\partial t} \check{n}_l + \frac{\partial}{\partial x_j} \check{n}_l \check{u}_{l,j} = 0 \quad (3.36)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} \rho_l \check{\alpha}_l + \frac{\partial}{\partial x_j} \rho_l \check{\alpha}_l \check{u}_{l,j} = -\Gamma \quad (3.37)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} \rho_l \check{\alpha}_l \check{u}_{l,i} + \frac{\partial}{\partial x_j} \rho_l \check{\alpha}_l \check{u}_{l,i} \check{u}_{l,j} = \mathbb{T}(u''_{p,i}) - \Gamma \check{u}_{l,i} + F_{d,i} \quad (3.38)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} \rho_l \check{\alpha}_l \delta \check{\theta}_l + \frac{\partial}{\partial x_i} \rho_l \check{\alpha}_l \check{u}_{l,i} \delta \check{\theta}_l = \mathbb{T}\left(\frac{1}{2} u''_{p,i} u''_{p,i}\right) + \mathbb{U}_\theta - \Gamma \delta \check{\theta}_l + W_\theta \quad (3.39)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} \rho_l \check{\alpha}_l \check{h}_{s,l} + \frac{\partial}{\partial x_i} \rho_l \check{\alpha}_l \check{u}_{l,i} \check{h}_{s,l} = -\Gamma \check{h}_{s,l} + \Phi_l \quad (3.40)$$

temporel + mvt mésoscopique = mvt décorrélé + évaporation + traînée + conduction

On regroupe les Eq. 3.36–3.40 sous la forme compacte utilisée pour la phase gazeuse (cf. section 2.1) :

$$\frac{\partial \mathbf{w}_l}{\partial t} + \nabla \cdot \mathbf{F}_l = \mathbf{s}_l \quad (3.41)$$

⁵Cette hypothèse peut être facilement relaxée par l'ajout d'un terme source dans l'équation de quantité de mouvement (Eq. 3.33) [208]

⁶Sa validité devra toutefois être discutée dans le cadre de la combustion diphasique où la présence de la flamme crée des échanges importants de masse, de quantité de mouvement et de chaleur entre le gaz porteur et le spray (cf. remarque en fin de section).

⁷Pour l'extension de cette méthode aux sprays polydispersés, se reporter à la thèse de Mossa [173].

⁸Cette hypothèse est raisonnable dans la configuration industrielle étudiée dans la partie III. En effet, le spray se trouve dans les conditions de saturation qui induisent une température identique pour le gaz et les gouttes. Il vérifie donc cette hypothèse en dehors de la zone de flamme qui représente un faible volume dans l'écoulement.

où $\mathbf{w}_l = (\check{n}_l, \rho_l \check{\alpha}_l, \rho_l \check{\alpha}_l \check{u}_l, \rho_l \check{\alpha}_l \check{v}_l, \rho_l \check{\alpha}_l \check{w}_l, \rho_l \check{\alpha}_l \check{\delta}\theta_l, \rho_l \check{\alpha}_l \check{h}_{s,l})^T$ est le vecteur des variables conservatives mésoscopiques de la phase liquide avec \check{u}_l, \check{v}_l et \check{w}_l les trois composantes de la vitesse mésoscopique liquide : $\check{\mathbf{u}}_l = (\check{u}_l, \check{v}_l, \check{w}_l)^T$. \mathbf{F}_l est le tenseur des flux de la phase liquide composé d'une partie due à la convection par le mouvement mésoscopique \mathbf{F}_l^M et d'une partie due au mouvement décorrélé \mathbf{F}_l^U :

$$\mathbf{F}_l = \mathbf{F}_l^M(\mathbf{w}_l) + \mathbf{F}_l^U(\mathbf{u}_p'') \quad (3.42)$$

Les tenseurs \mathbf{F}_l^M et \mathbf{F}_l^U s'écrivent respectivement :

$$\mathbf{F}_l^M = (\mathbf{f}_l^M, \mathbf{g}_l^M, \mathbf{h}_l^M)^T \quad (3.43)$$

$$\mathbf{F}_l^U = (\mathbf{f}_l^U, \mathbf{g}_l^U, \mathbf{h}_l^U)^T \quad (3.44)$$

Les trois composantes $\mathbf{f}_l^M, \mathbf{g}_l^M$ et \mathbf{h}_l^M sont définies par :

$$\mathbf{f}_l^M = \begin{pmatrix} \check{n}_l \check{u}_l \\ \rho_l \check{\alpha}_l \check{u}_l \\ \rho_l \check{\alpha}_l \check{u}_l^2 \\ \rho_l \check{\alpha}_l \check{u}_l \check{v}_l \\ \rho_l \check{\alpha}_l \check{u}_l \check{w}_l \\ \rho_l \check{\alpha}_l \check{u}_l \check{\delta}\theta_l \\ \rho_l \check{\alpha}_l \check{u}_l \check{h}_{s,l} \end{pmatrix}, \mathbf{g}_l^M = \begin{pmatrix} \check{n}_l \check{v}_l \\ \rho_l \check{\alpha}_l \check{v}_l \\ \rho_l \check{\alpha}_l \check{u}_l \check{v}_l \\ \rho_l \check{\alpha}_l \check{v}_l^2 \\ \rho_l \check{\alpha}_l \check{v}_l \check{w}_l \\ \rho_l \check{\alpha}_l \check{v}_l \check{\delta}\theta_l \\ \rho_l \check{\alpha}_l \check{v}_l \check{h}_{s,l} \end{pmatrix}, \mathbf{h}_l^M = \begin{pmatrix} \check{n}_l \check{w}_l \\ \rho_l \check{\alpha}_l \check{w}_l \\ \rho_l \check{\alpha}_l \check{u}_l \check{w}_l \\ \rho_l \check{\alpha}_l \check{v}_l \check{w}_l \\ \rho_l \check{\alpha}_l \check{w}_l^2 \\ \rho_l \check{\alpha}_l \check{w}_l \check{\delta}\theta_l \\ \rho_l \check{\alpha}_l \check{w}_l \check{h}_{s,l} \end{pmatrix} \quad (3.45)$$

Les trois composantes du tenseur des flux du mouvement décorrélé $\mathbf{f}_l^U, \mathbf{g}_l^U$ et \mathbf{h}_l^U sont :

$$\mathbf{f}_l^U = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ \rho_l \check{\alpha}_l \delta \check{R}_{l,xx} \\ \rho_l \check{\alpha}_l \delta \check{R}_{l,xy} \\ \rho_l \check{\alpha}_l \delta \check{R}_{l,xz} \\ \rho_l \check{\alpha}_l \delta \check{S}_{l,ii} \\ 0 \end{pmatrix}, \mathbf{g}_l^U = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ \rho_l \check{\alpha}_l \delta \check{R}_{l,xy} \\ \rho_l \check{\alpha}_l \delta \check{R}_{l,yy} \\ \rho_l \check{\alpha}_l \delta \check{R}_{l,yz} \\ \rho_l \check{\alpha}_l \delta \check{S}_{l,ii} \\ 0 \end{pmatrix}, \mathbf{h}_l^U = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ \rho_l \check{\alpha}_l \delta \check{R}_{l,xz} \\ \rho_l \check{\alpha}_l \delta \check{R}_{l,yz} \\ \rho_l \check{\alpha}_l \delta \check{R}_{l,zz} \\ \rho_l \check{\alpha}_l \delta \check{S}_{l,ii} \\ 0 \end{pmatrix} \quad (3.46)$$

\mathbf{s}_l est le vecteur des termes sources composé d'une partie liée aux échanges avec le gaz \mathbf{s}_{g-l} et d'une partie liée au mouvement décorrélé \mathbf{s}_θ :

$$\mathbf{s}_l = \mathbf{s}_{g-l} + \mathbf{s}_\theta \quad (3.47)$$

\mathbf{s}_{g-l} regroupe les termes de transfert de masse, de quantité de mouvement et d'énergie avec la phase gazeuse :

$$\mathbf{s}_{g-l} = \begin{pmatrix} 0 \\ -\Gamma \\ -\Gamma \check{u}_l + F_{d,x} \\ -\Gamma \check{v}_l + F_{d,y} \\ -\Gamma \check{w}_l + F_{d,z} \\ -\Gamma \check{\delta}\theta_l + W_\theta \\ -\Gamma \check{h}_{s,l} + \Phi_l \end{pmatrix} \quad (3.48)$$

\mathbf{s}_θ contient uniquement le terme additionnel apparaissant lors de la dérivation de l'équation de l'énergie décorrélée :

$$\mathbf{s}_\theta = (0, 0, 0, 0, 0, \mathbb{U}_\theta, 0)^T \quad (3.49)$$

Les différentes composantes des vecteurs \mathbf{F}_l^U , \mathbf{s}_{g-l} et \mathbf{s}_θ nécessitent des modèles de fermeture qui sont présentés dans la section 3.3. Finalement, par conservation de la masse, de la quantité de mouvement et de l'énergie à l'interface, on peut écrire le terme source des équations gazeuses dû aux effets de la phase liquide :

$$\mathbf{s}_{l-g} = \begin{pmatrix} \Gamma \check{u}_l - F_{d,x} \\ \Gamma \check{v}_l - F_{d,y} \\ \Gamma \check{w}_l - F_{d,z} \\ \Lambda + \Phi + u_i (\Gamma \check{u}_{l,i} - F_{d,i}) \\ \Gamma \delta_{k,F} \end{pmatrix} \quad (3.50)$$

$u_i \Gamma \check{u}_{l,i}$ et $-u_i F_{d,i}$ représentent respectivement les effets de l'évaporation et de la traînée sur l'énergie cinétique gazeuse. Λ et Φ correspondent au transfert d'énergie interne sensible par évaporation et par conduction thermique gaz-liquide respectivement (cf. section 3.3).

Remarque : Pour obtenir les termes d'échange *gaz* \rightarrow *liquide* (couplage direct) qui composent \mathbf{s}_{g-l} , on a fait l'hypothèse que le filtrage statistique de la phase dispersée est basé sur une réalisation unique de la phase gazeuse (cf. section 3.2.5, H7). Or, chaque réalisation particulière introduit une perturbation de la phase gazeuse via ces échanges interfaciaux. La Fig. 3.2 montre l'effet du transfert *liquide* \rightarrow *gaz* (couplage inverse) sur le traitement statistique de la phase liquide. L'erreur provient du fait que la réalisation \mathcal{H}_f qui conditionne la moyenne d'ensemble des réalisations particulières n'est pas indépendante de ces dernières mais se trouve modifiée par \mathbf{s}_{l-g} à chaque instant. L'effet de ce couplage inverse est d'autant plus important que la charge massique liquide est élevée. De façon rigoureuse, il faudrait recourir à la probabilité jointe fluide-particules pour définir la fonction densité de présence de particule intervenant dans l'équation de Boltzmann du spray (Eq. 3.10) [74]. Si l'on prend l'exemple où seule la quantité de mouvement du gaz est perturbée par la particule, la fonction densité de présence en probabilité jointe gaz-particules s'écrit :

$$f_{gp}(\mathbf{c}_p, \mathbf{c}_g, \zeta_p, \mu_p, \mathbf{x}, t) = \langle \mathcal{H}_p(\mathbf{c}_p, \mathbf{c}_g, \zeta_p, \mu_p, \mathbf{x}, t) \rangle \quad (3.51)$$

où \mathbf{c}_g est la vitesse du gaz à l'endroit de la particule. Par rapport à l'Eq. 3.10, l'équation de Boltzmann de f_{gp} fait apparaître le terme supplémentaire :

$$\frac{\partial}{\partial c_{g,i}} \left\langle \frac{du_i}{dt} \middle| \mathbf{c}_p, \mathbf{c}_g, \zeta_p, \mu_p \right\rangle f_{gp} \quad (3.52)$$

L'Eq. 3.52 représente la variation de la FDP jointe f_{gp} due à l'accélération lagrangienne du gaz $\frac{d\mathbf{u}}{dt}$ le long des trajectoires de particules. Le terme correspondant dans l'équation de conservation de la vitesse mésoscopique (Eq. 3.38) s'écrit alors :

$$\rho_l \check{\alpha}_l \left\langle \frac{du_j}{dt} \frac{\partial u_{p,i}}{\partial u_j} \right\rangle_l \quad (3.53)$$

La modélisation du terme de l'Eq. 3.53 dépasse le cadre de cette étude et ce type de contribution est négligé par la suite.

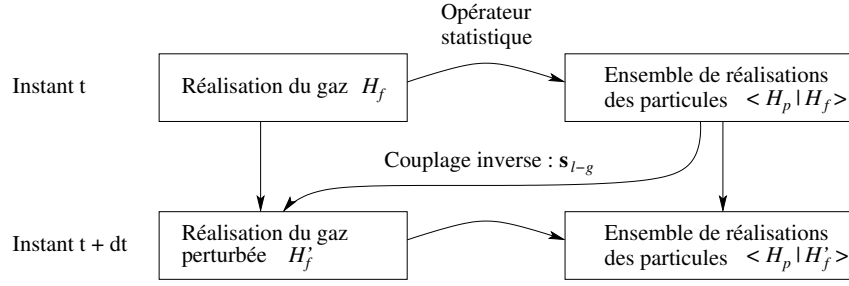


FIG. 3.2 - Effet du couplage inverse sur la description statistique de la phase dispersé

3.3 Modèles de fermeture

3.3.1 Traînée

On rappelle que le terme \mathbf{F}_d dans l'Eq. 3.38 s'exprime en fonction de la force \mathbf{F}_p exercée sur une goutte individuelle :

$$F_{d,i} = \rho_l \check{\alpha}_l \left\langle \frac{F_{p,i}}{m_p} \right\rangle_l \quad (3.54)$$

Pour des particules denses ($\rho_l \gg \rho_{gaz}$) et de petits diamètres ($d \leq 50 \mu m$), toutes les forces autres que la traînée peuvent être négligées (cf. section 3.2.5, H2) [110]. La force de traînée exercée par le gaz ayant une vitesse \mathbf{u} sur une particule sphérique isolée de masse m_p et de vitesse \mathbf{u}_p est telle que :

$$\frac{F_{p,i}}{m_p} = \frac{1}{\tau_p} (u_i - u_{p,i}) \quad (3.55)$$

où τ_p est le temps de relaxation de la particule exprimé par :

$$\tau_p = (1 + 0.15 Re_p^{0.687}) \tau'_p \quad (3.56)$$

$$\text{avec } \tau'_p = \frac{\rho_l d^2}{18\mu} \quad (3.57)$$

où Re_p est le Reynolds de goutte défini par :

$$Re_p = \frac{\rho |\mathbf{u} - \mathbf{u}_p| d}{\mu} \quad (3.58)$$

L'Eq. 3.56 est une corrélation empirique proposée par Schiller et Naumann [222] permettant de corriger le temps de relaxation prédit par le modèle de traînée de Stokes (Eq. 3.57) lorsque Re_p n'est pas petit devant l'unité. Malgré la dépendance de Re_p vis-à-vis de la vitesse particulaire, on suppose que le temps de relaxation est le même pour toutes les particules à la position \mathbf{x} et au temps t . D'après la moyenne définie par l'Eq. 3.54, le terme de traînée \mathbf{F}_d s'exprime alors en fonction de la vitesse mésoscopique de la façon suivante :

$$F_{d,i} = \rho_l \check{\alpha}_l \frac{u_i - \check{u}_{l,i}}{\tau_p} \quad (3.59)$$

Afin d'évaluer les effets de la traînée sur la phase dispersée, on définit le nombre de Stokes comparant le temps caractéristique de la traînée τ_p au temps caractéristique de l'écoulement :

$$St = \frac{\tau_p}{\tau_L} \quad (3.60)$$

où $\tau_L = L/|\mathbf{u}|$ avec L une échelle caractéristique de l'écoulement gazeux. St est un indicateur de la réponse de la particule aux variations de vitesse de l'écoulement. Pour $St \ll 1$, la particule se comporte comme un traceur vis-à-vis de l'écoulement gazeux. Pour $St \gg 1$, la particule suit une trajectoire de type « boulet de canon » et ne voit pas les perturbations du gaz. Enfin, pour des Stokes de l'ordre de l'unité, les effets de concentration préférentielle des gouttes dans certaines régions de l'écoulement sont maximaux [74, 73, 264]. Ce régime est associé à un mouvement décorrélé important.

On écrit le terme dû à la traînée W_θ dans l'équation de l'énergie décorrélée (Eq. 3.39) à partir de l'expression de la force de traînée pour une goutte individuelle (Eq. 3.55) :

$$W_\theta = \rho_l \check{\alpha}_l \left\langle u''_{p,i} \frac{1}{\tau_p} (u_i - u_{p,i}) \right\rangle_l \quad (3.61)$$

En notant que $\langle u''_{p,i} u_i \rangle_l = u_i \langle u''_{p,i} \rangle_l = 0$, on obtient après calcul :

$$W_\theta = -\rho_l \check{\alpha}_l \frac{2}{\tau_p} \delta \check{\theta}_l \quad (3.62)$$

La traînée est donc un terme de destruction de l'énergie décorrélée. En effet, elle tend à imposer à l'ensemble des particules une vitesse proche de celle du gaz en atténuant les écarts vis-à-vis de cette vitesse suivant la loi de Stokes.

3.3.2 Évaporation

Le taux d'évaporation du spray Γ intervenant dans les Eq. 3.36 à 3.40 s'exprime en fonction du taux de variation de masse lagrangien $\dot{m}_p = dm_p/dt$ de la façon suivante :

$$\Gamma = -\check{n}_l \{ \dot{m}_p \}_l \quad (3.63)$$

Modèles existants

Comme pour la traînée (cf. section 3.3.1), on écrit le modèle d'évaporation en considérant le cas d'une goutte isolée sans combustion au sein d'un écoulement de gaz. Ce problème a fait l'objet de nombreuses études théoriques, expérimentales et numériques. Shazin [219] fait une revue des modèles théoriques applicables aux codes de mécanique des fluides en distinguant :

- le modèle hydrodynamique classique basé sur l'approche initialement proposée par Spalding [247, 248] et ses variantes incluant les améliorations par Ambrazon et Sirignano [1] ou Yao *et al.* [271] ;

- les modèles multi-composants adaptés à l'évaporation de carburants réalistes comme le diesel ou le kérosène. Shazin [219] cite en particulier les modèles à *thermodynamique continue* comme celui proposé par Harstad et Bellan [99] et le modèle à *courbe de distillation* de Burger *et al.* [37] ;
- les modèles cinétiques adaptés aux petits diamètres de gouttes ($< 5\mu m$) lorsque l'hypothèse de milieu continu n'est plus valable.

Principalement pour des raisons de coûts de calculs, les codes de CFD actuels se limitent aux modèles de type hydrodynamique. Dans [220], Shazin *et al.* comparent différents modèles hydrodynamiques en fonction des corrections utilisées pour modéliser les effets convectifs dus à la vitesse relative entre la goutte et le gaz environnant par rapport au problème à symétrie sphérique (sans vitesse relative). Concernant la modélisation du transfert de chaleur dans la goutte, Shazin *et al.* [220] distinguent les approches suivantes classées par ordre croissant de complexité :

- modèle à température de goutte uniforme et constante dans le temps (*loi du d^2* , voir plus loin) ;
- modèle à température de goutte uniforme mais variable dans le temps (*modèle de température uniforme* noté UT). Ce modèle suppose une conductivité thermique infinie donc une absence de gradient de température dans la goutte ;
- modèle à conductivité thermique finie dans la goutte sans prise en compte de l'écoulement liquide à l'intérieur de la goutte ;
- modèle à conductivité thermique effective qui introduit une correction au modèle précédant pour tenir compte de l'écoulement interne ;
- modèle décrivant l'écoulement interne par un modèle de tourbillon ;
- solution complète des équations de Navier-Stokes dans le gaz et dans la goutte.

On trouve une description détaillée de ces différentes approches dans l'ouvrage de Sirignano [238]. Ces modèles nécessitent la connaissance de la fraction de carburant gazeux à l'interface gaz/goutte $Y_{F,\zeta}$ (cf. Fig. 3.3) qui est généralement donnée par une hypothèse d'équilibre thermodynamique à l'interface. Miller *et al.* [167] proposent un modèle de non-équilibre basé sur la loi de Langmuir-Kundsen afin de mieux prédire l'évaporation de petites gouttes dans les gaz chauds.

Quelle que soit la complexité de ces modèles, il est nécessaire de comparer leurs prédictions à des données expérimentales précises pour des conditions physiques variables. Nomura *et al.* [178] fournissent des mesures expérimentales d'évolution temporelle du diamètre pour des gouttes de *n*-heptane en évaporation dans du diazote à des conditions variables de température et de pression. Des mesures simultanées du diamètre et de la température de gouttes de décane en évaporation dans un écoulement d'air chaud ont été réalisées par Wong et Lin [270]. Elles se limitent toutefois à l'étude de forts diamètres de gouttes (de l'ordre du millimètre) qui sont peu représentatifs des tailles caractéristiques des applications aéronautiques situées entre 10 et 100 μm . Castanet *et al.* [41] ont étudié expérimentalement les transferts de chaleur dans un train de gouttes en évaporation dans une couche limite thermique d'air. Par mesure Laser, ils accèdent à la fois au diamètre (de l'ordre de la centaine de μm) et à la température des gouttes. Toutefois, la complexité de l'aérothermie du gaz ambiant introduit des incertitudes dans l'exploitation des mesures. En faisant varier l'espace inter-gouttes, ils étudient l'influence des interactions goutte-goutte sur les transferts de masse et de chaleur dus à l'évaporation. En complément de ces études expérimentales, les études numériques détaillées de l'aérothermie de gouttelettes fournissent des données de référence intéressantes. Citons en particulier les travaux de Chiang *et al.* [47] qui ont résolu le problème couplé de l'écoulement externe et interne d'une goutte en translation et en évaporation dans l'air en utilisant des propriétés de transport variables. Dans Chiang et Sirignano [48], on trouve une

extension de cette étude au cas de deux gouttes en interaction.

Description du modèle de température uniforme

Dans la présente étude, le choix s'est porté sur le modèle de type *hydrodynamique à température uniforme* parce qu'il représente un compromis satisfaisant entre un faible coût de calcul et la prise en compte du phénomène de dépendance entre la température des gouttes et le taux d'évaporation. Ce phénomène physique est important dans le cas de la combustion où les variations de température importantes induisent des effets de préchauffage du liquide qui conditionnent le temps d'évaporation [106] donc de combustion (cf. section 7.3.5). Les deux hypothèses principales de ce modèle sont les suivantes :

- la conductivité thermique de la phase liquide est infinie d'où une température uniforme au sein de chaque goutte ;
- l'interface liquide/gaz est à l'équilibre thermodynamique ce qui permet d'utiliser la loi de Clausius-Clapeyron.

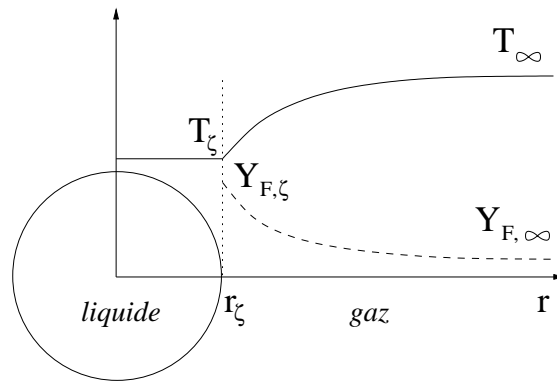


FIG. 3.3 - Schéma d'une goutte isolée à la température T_ζ qui s'évapore dans un gaz possédant une température T_∞ et une fraction massique de carburant $Y_{F,\infty}$

Taux de transfert de masse

Kuo [125] décrit comment obtenir le taux d'évaporation \dot{m}_p d'une gouttelette isolée (Fig. 3.3) en intégrant l'équation de conservation de la fraction massique de carburant gazeux (indice F) entre le rayon d'interface r_ζ et un rayon infini. Cette méthode aboutit à une expression de \dot{m}_p qui ne dépend que des variables en $r = r_\zeta$ et en $r \rightarrow \infty$:

$$\dot{m}_p = -\pi d Sh [\rho D_F] \ln(1 + B_M) \quad (3.64)$$

Sh est le nombre de Sherwood donné par la corrélation de Ranz-Marshall :

$$Sh = 2 + 0.55 Re_p^{1/2} Sc_F^{1/3} \quad (3.65)$$

où $0.55Re_p^{1/2}Sc_F^{1/3}$ est la correction traduisant les effets convectifs liés à la vitesse relative entre la goutte et le gaz porteur.

Le produit $[\rho D_F]$ s'obtient à partir du nombre de Schmidt du carburant Sc_F :

$$[\rho D_F] = \frac{\mu}{Sc_F} \quad (3.66)$$

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 :

$$B_M = \frac{Y_{F,\zeta} - Y_{F,\infty}}{1 - Y_{F,\zeta}} \quad (3.67)$$

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

$$Y_{F,\zeta} = \frac{X_{F,\zeta} W_F}{X_{F,\zeta} W_F + (1 - X_{F,\zeta}) \bar{W}_{nF,\zeta}} \quad (3.68)$$

où $\bar{W}_{nF,\zeta}$ est la 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 :

$$\bar{W}_{nF,\zeta} = \bar{W}_{nF,\infty} = \frac{1 - Y_{F,\infty}}{1 - Y_{F,\infty} \frac{\bar{W}}{W_F}} \bar{W} \quad (3.69)$$

$X_{F,\zeta}$ est fourni par la loi de Dalton pour un mélange idéal de gaz parfaits :

$$X_{F,\zeta} = \frac{P_{F,\zeta}}{P} \quad (3.70)$$

où $P_{F,\zeta}$ est la pression partielle de carburant gazeux à l'interface donnée par la relation de Clausius-Clapeyron :

$$P_{F,\zeta} = P_{cc} \exp\left(\frac{W_F L_v}{\mathcal{R}} \left(\frac{1}{T_{cc}} - \frac{1}{T_\zeta}\right)\right) \quad (3.71)$$

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} :

$$L_v = \Delta h_{s,F}(T_{ref}) = h_{s,F}(T_{ref}) - h_{s,p}(T_{ref}) \quad (3.72)$$

Dans l'Eq. 3.71, la variable manquante est la température de l'interface T_ζ que l'on suppose égale à celle de la goutte : $T_\zeta = T_p$ (cf. section 3.2.5, H3). Dans les Eq. 3.67 et 3.69, la condition ∞ correspond à l'état du gaz non perturbé par la présence de la goutte. Dans le cadre des écoulements dilués (cf. section 3.2.5, H5), on suppose que la distance inter-gouttes est suffisamment grande pour que les gouttes ne s'influencent pas mutuellement. Par conséquent, l'état ∞ est représenté par la valeur locale eulérienne dans la phase gazeuse.

D'après l'hypothèse H9 (cf. section 3.2.5), à la position \mathbf{x} et à l'instant t , toutes les gouttes possèdent la même température T_p donc le même nombre de Spalding B_M . Par ailleurs, malgré la dépendance de

Re_p vis-à-vis de la vitesse particulière, on suppose que le nombre de Sherwood (Eq. 3.65) est également constant à \mathbf{x} et t donnés. En rappelant que le spray est supposé monodisperse (cf. section 3.2.5, H8), le taux d'évaporation moyen du spray Γ est finalement obtenu à partir du taux d'évaporation lagrangien \dot{m}_p donné par l'Eq. 3.64 en appliquant la moyenne définie par l'Eq. 3.63 :

$$\Gamma = \pi \bar{n}_l d Sh [\rho D_F] \ln(1 + B_M) \quad (3.73)$$

Taux de transfert de chaleur

Le taux de transfert de masse \dot{m}_p étant connu, on cherche à déterminer le taux de transfert de chaleur entre phases. On estime le flux conductif gazeux à l'interface à partir de l'expression dérivée pour une particule en l'absence de changement de phase :

$$\phi_g^c = \pi d Nu \lambda (T_\zeta - T_\infty) \quad (3.74)$$

Nu est le nombre de Nusselt que l'on exprime de façon analogue au nombre de Sherwood (Eq. 3.65) en utilisant la corrélation de Ranz-Marshall :

$$Nu = 2 + 0.55 Re_p^{1/2} Pr^{1/3} \quad (3.75)$$

La conductivité thermique du gaz λ est obtenue à partir du nombre de Prandtl Pr :

$$\lambda = \frac{\mu \bar{C}_p}{Pr} \quad (3.76)$$

Le bilan d'énergie à l'interface s'écrit :

$$\phi_p^t + \phi_g^t = 0 \quad (3.77)$$

$$\text{soit : } \phi_p^{\text{ev}} + \phi_p^c + \phi_g^{\text{ev}} + \phi_g^c = 0 \quad (3.78)$$

$$\text{avec : } \phi_p^{\text{ev}} = \dot{m}_p h_{s,p}(T_\zeta) \quad \text{et} \quad \phi_g^{\text{ev}} = -\dot{m}_p h_{s,F}(T_\zeta) \quad (3.79)$$

ϕ_p^t et ϕ_g^t sont les flux totaux d'enthalpie entrant dans la goutte et dans le gaz respectivement. ϕ_p^c et ϕ_g^c sont les flux conductifs entrant dans la goutte et dans le gaz respectivement. ϕ_p^{ev} et ϕ_g^{ev} sont les flux d'enthalpie par changement de phase dans la goutte et dans le gaz respectivement, dont la somme vaut ϕ^{ev} :

$$\phi^{\text{ev}} = \dot{m}_p (h_{s,p}(T_\zeta) - h_{s,F}(T_\zeta)) = \dot{m}_p \Delta h_{s,F}(T_\zeta) = \phi_g^c + \phi_p^c \quad (3.80)$$

L'Eq. 3.80 signifie que l'enthalpie absorbée par évaporation ($\phi^{\text{ev}} < 0$) imposée par la loi de Spalding (Eq. 3.64) est puisée dans le gaz via le flux conductif ϕ_g^c (généralement, le gaz est plus chaud que la goutte d'où : $\phi_g^c < 0$). L'excès/le défaut d'enthalpie est fourni/prélevé à la phase liquide via le flux conductif ϕ_p^c .

Les différents taux de variation d'énergie dans le spray et dans le gaz sont notés de la façon suivante :

Taux de transfert de chaleur	<i>vers le gaz</i>	<i>vers le liquide</i>
<i>par changement de phase</i>	Λ	Λ_l
<i>par conduction thermique</i>	Φ	Φ_l
<i>total</i>	$\Pi = \Lambda + \Phi$	$\Pi_l = \Lambda_l + \Phi_l$

À partir de la moyenne d'ensemble $\{\cdot\}_l$ des flux d'enthalpie par conduction et évaporation d'une goutte isolée, on exprime les taux de transferts de chaleur du spray Λ , Λ_l , Φ et Φ_l en fonction des variables lagrangiennes, soit respectivement :

$$\Lambda = \check{n}_l \{-\dot{m}_p h_{s,F}(T_\zeta = T_p)\}_l \quad (3.81)$$

$$\Lambda_l = \check{n}_l \{\dot{m}_p (h_{s,p}(T_\zeta = T_p) + h_{s,corr})\}_l \quad (3.82)$$

$$\Phi = \check{n}_l \{\phi_g^c\}_l \quad (3.83)$$

$$\Phi_l = \check{n}_l \{\phi_p^c\}_l \quad (3.84)$$

La signification de la correction de référence de l'enthalpie $h_{s,corr}$ dans l'Eq. 3.82 est précisée dans la sous-section suivante. Le bilan interfacial d'enthalpie à l'échelle du spray s'écrit de la façon suivante :

$$\Pi + \Pi_l = \Lambda + \Phi + \Lambda_l + \Phi_l = 0 \quad (3.85)$$

Malgré la dépendance de Re_p vis-à-vis de la vitesse particulière, on suppose que le nombre de Nusselt (Eq. 3.65) est constant pour toutes les particules à la position \mathbf{x} et au temps t . On obtient alors les taux de transfert de chaleur du spray en fonction des variables moyennes liquides et des variables gazeuses :

$$\Lambda = \Gamma h_{s,F}(\check{T}_l) \quad (3.86)$$

$$\Lambda_l = -\Gamma (\check{h}_{s,l} - h_{s,corr}) \quad (3.87)$$

$$\Phi = \pi \check{n}_l d N u \lambda (\check{T}_l - T_\infty) \quad (3.88)$$

$$\Phi_l = -(\Lambda + \Phi + \Lambda_l) \quad (3.89)$$

Valeur de référence pour l'enthalpie liquide

Une précaution est nécessaire lorsqu'on calcule le flux d'enthalpie dans la phase liquide via le bilan interfacique faisant intervenir les enthalpies gazeuses (Eq. 3.79). En effet, l'enthalpie liquide $h_{s,p}(T_\zeta)$ est définie à partir d'une valeur de référence différente de celle de l'enthalpie gazeuse $h_{s,F}(T_\zeta)$. Pour tenir compte de cet écart de référence, on ajoute le terme suivant au flux d'enthalpie dans la phase liquide :

$$+ \dot{m}_p h_{s,corr} \quad \text{avec} \quad h_{s,corr} = h_{s,F}(T_{l,ref}) - L_v \quad (3.90)$$

L'Eq. 3.90 assure que le saut interfacial d'enthalpie sensible est bien égal à l'enthalpie latente d'évaporation.

Coefficients de transport diffusif

Dans les Eq. 3.64 et 3.74, les propriétés de transport diffusif sont supposées constantes lors de l'intégration des équations de conservation. En réalité, les coefficients $[\rho D_F]$ 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 :

$$T_{ref} = (1 - a) T_\zeta + a T_\infty \quad (3.91)$$

$$Y_{k,ref} = (1 - a) Y_{k,\zeta} + a Y_{k,\infty} \quad (3.92)$$

Hubbard *et al.* [106] préconisent la valeur $a = 1/3$. La validité de cette règle appelée *règle du 1/3* est confirmée par Versaevel [259] qui a résolu numériquement les équations de transport autour de la goutte avec des coefficients de diffusion variables. Toutefois, la règle $a = 1$ a été appliquée ici par souci de simplicité. Ce choix entraîne une surestimation du taux d'évaporation mais ne modifie pas le comportement qualitatif du modèle. Pour les calculs futurs, l'utilisation de la règle du 1/3 est recommandée.

Échanges thermiques et température d'équilibre

On considère l'équation lagrangienne de l'enthalpie d'une goutte isolée de masse m_p :

$$\frac{d}{dt} (m_p h_{s,p}(T_p)) = \phi_p^c + \phi_p^{ev} \quad (3.93)$$

$$\text{soit : } m_p \frac{d}{dt} h_{s,p}(T_p) + h_{s,p}(T_p) \frac{d}{dt} m_p = \phi_p^c - \dot{m}_p h_{s,p}(T_\zeta) \quad (3.94)$$

En notant que $dh_{s,p}(T_p) = C_{p,l} dT_p$ et $h_{s,p}(T_p) = h_{s,p}(T_\zeta)$, l'Eq. 3.94 devient :

$$m_p C_{p,l} \frac{dT_p}{dt} = \phi_p^c \quad (3.95)$$

L'Eq. 3.95 montre que seul le flux conductif liquide est responsable des variations de température dans la goutte. Afin de comprendre le rôle de ces variations, on teste le modèle de température uniforme (UT) au moyen d'un code 0D. Ce code résout le problème temporel de l'évaporation d'une gouttelette isolée grâce à l'intégration temporelle explicite au premier ordre des termes de transferts de masse et d'énergie prédits par les Eq. 3.64 et 3.74 respectivement⁹. Le modèle UT est comparé aux données expérimentales¹⁰ de Castanet *et al.* [41].

Au cours de l'évaporation, on observe une phase initiale de préchauffage où les conditions thermodynamiques à l'interface sont telles que le taux d'évaporation est faible. Comme le montre la Fig. 3.4, le flux de chaleur conductif $-\phi_g^c$ fourni par le gaz est alors supérieur au flux ϕ^{ev} consommé par évaporation. D'après l'Eq. 3.80, l'excès de chaleur est transféré à la goutte sous la forme du flux conductif ϕ_p^c qui contribue à augmenter la température de la goutte donc de sa surface (cf. Fig 3.5a). Cette élévation de température stimule l'évaporation et entraîne une augmentation de ϕ^{ev} (cf. Fig. 3.4) telle que l'on atteint un état d'équilibre :

- le flux conductif gazeux ϕ_g^c est intégralement converti en enthalpie de changement d'état via le flux ϕ^{ev} ;
- le flux conductif ϕ_p^c résultant tend vers 0 et la température liquide atteint une valeur constante.

La valeur d'équilibre de la température liquide est appelée température humide [167] (*wet bulb temperature* en anglais) et notée T_{wb} . La Fig 3.5b montre qu'une fois T_{wb} atteinte, la décroissance temporelle de la surface de goutte suit une évolution linéaire : on retrouve la loi bien connue du d^2 . Cette loi est vérifiée

⁹Ce code 0D de type lagrangien utilise les mêmes entrées et le même modèle d'évaporation qu'AVBP de sorte qu'il fournit des résultats rigoureusement identiques à ceux d'un calcul AVBP équivalent en configuration 0D, cas où les approches eulérienne et lagrangienne sont équivalentes.

¹⁰Dans l'expérience de Castanet *et al.* [41], certains paramètres physiques ne sont pas connus en raison de la complexité aérothermique de l'écoulement gazeux. C'est pourquoi les courbes du modèle UT ont été obtenues en ajustant la température gazeuse et les coefficients de diffusion des Eq. 3.64 et 3.74, ce qui restreint la comparaison à une analyse qualitative.

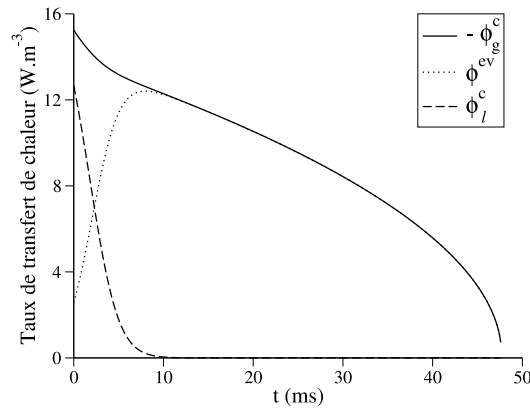


FIG. 3.4 - Évolution temporelle des flux de chaleur dans la goutte prédits par le modèle UT : flux conductif gazeux ϕ_g^c , flux de changement de phase ϕ^{ev} et flux conductif liquide ϕ_l^c

lorsque le nombre de Spalding est constant et s'exprime en écrivant la variation de carré du diamètre de goutte de la façon suivante :

$$\frac{d}{dt}d^2 = -4Sh \frac{[\rho D_F]}{\rho_l} \ln(1 + B_M(T_{wb})) \quad (3.96)$$

L'Eq. 3.96 suppose que le nombre de Spalding n'est pas influencé par les variations de pression via l'équilibre thermodynamique (cf. Eq. 3.70) et par la fraction massique de carburant dans le gaz (surface de goutte loin de la saturation : $Y_{F,\zeta} \gg Y_{F,\infty}$). D'après la Fig 3.5b et l'Eq. 3.96, la loi du d^2 représente une approximation intéressante si la valeur de T_{wb} est connue. Toutefois, en raison de la complexité mathématique des expressions, T_{wb} ne peut pas être exprimée de manière explicite et requiert une méthode de résolution itérative. En outre, T_{wb} dépend de la température et de la fraction massique de carburant dans le gaz qui peuvent varier fortement suivant que l'on se situe dans les zones froides ou réactives de l'écoulement. Dans la combustion de spray, il n'est donc pas possible d'employer une valeur constante de T_{wb} pour tout l'écoulement. Miller *et al.* [167] proposent une corrélation valable pour plusieurs hydrocarbures exprimant T_{wb} en fonction de la température d'ébullition et de la température du gaz. Par ailleurs, Cannevière [40] présente une méthode permettant d'exprimer le nombre de Spalding comme une fonction linéaire de la température du gaz pour un carburant et une pression donnée. Connaissant T_{wb} , l'utilisation de l'Eq. 3.96 évite de résoudre l'équation d'enthalpie de la goutte (Eq. 3.95). Toutefois, supposer que T_{wb} est atteinte de façon instantanée revient à négliger le temps de préchauffage qui peut jouer un rôle important dans la dynamique de flamme (cf. section 7.3).

Traitement numérique de l'ébullition

L'expression du Spalding de masse (Eq. 3.67) comporte une singularité lorsque la fraction massique de carburant à l'interface $Y_{F,\zeta}$ vaut l'unité. Cette valeur est obtenue lorsque la température de l'interface atteint la température d'ébullition à la pression considérée $T_{eb}(P)$ dont la valeur est donnée par la relation

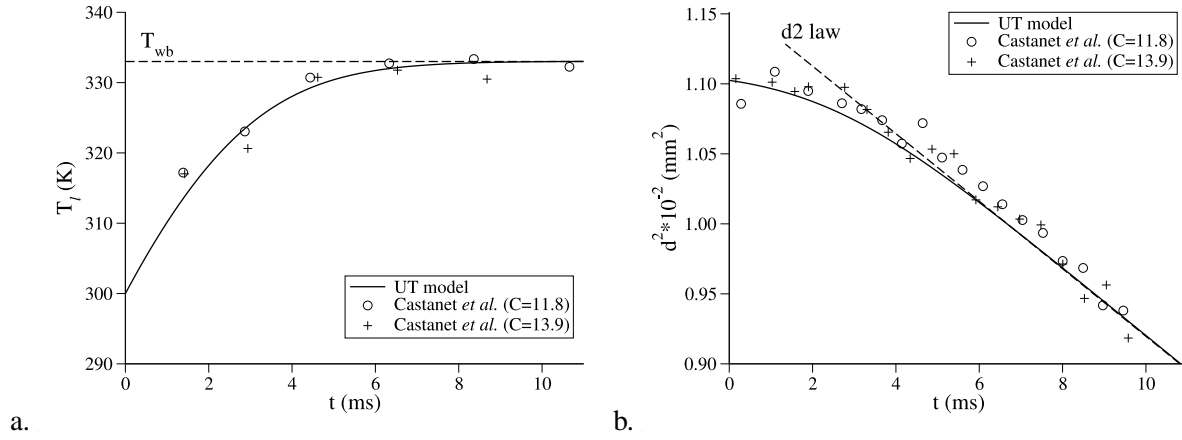


FIG. 3.5 - Comparaison entre les prédictions du modèle de température uniforme (UT) et les données expérimentales de Castanet et al. [41] pour l'évaporation de gouttes d'éthanol. Évolution temporelle de la température de goutte (a.) et de la surface de goutte sans dimension (b.). C représente le rapport entre la distance inter-gouttes et le diamètre initial indiquant que les gouttes peuvent être considérées comme isolées.

de Clausius-Clapeyron (Eq. 3.71) :

$$T_{eb} = \left(\frac{1}{T_{cc}} - \frac{\mathcal{R}}{W_F L_v} \ln \left(\frac{P}{P_{cc}} \right) \right)^{-1} \quad (3.97)$$

Du point de vue purement analytique, la loi d'évaporation (Eq. 3.64) ne permet pas d'atteindre la température d'ébullition car le flux d'enthalpie par changement de phase augmente linéairement avec le taux d'évaporation, limitant ainsi le flux conductif dans la phase liquide (cf. Eq. 3.80). Du point de vue numérique, en pratique, il est possible que le modèle prédise une température supérieure à T_{eb} . Dans ce cas, la température liquide est ramenée à la valeur de la température d'ébullition et le flux conductif liquide est considéré comme nul. D'après le bilan d'enthalpie à l'interface (Eq. 3.80), le taux d'évaporation s'exprime alors en fonction du flux conductif gazeux et de la différence d'enthalpie à travers l'interface :

$$\dot{m}_p(T_\zeta = T_{eb}) = \frac{\phi_g^c}{\Delta h_{s,F}(T_{eb})} \quad (3.98)$$

L'Eq. 3.98 exprime le fait que lorsque la goutte est à la température d'ébullition, le taux d'évaporation est piloté uniquement par le flux conductif dans le gaz (Eq. 3.74) et non plus par le flux massique de carburant prédit par la loi de Spalding (Eq. 3.64).

3.3.3 Mouvement décorrélé

La modélisation du mouvement décorrélé dans le contexte mésoscopique eulérien est décrite en détail dans la thèse d'E. Riber [206]. La section suivante en fait le résumé.

Afin de rendre compte de l'effet du mouvement décorrélé sur le mouvement mésoscopique, le tenseur des vitesses décorrélées $\delta \tilde{R}_l$ doit être modélisé. En écrivant l'Eq. 3.23, on a décomposé $\delta \tilde{R}_l$ en sa

demi-trace $\delta\check{\theta}_l$, l'énergie décorrélée, dont on a écrit l'équation de conservation (Eq. 3.39), et sa partie déviatorique $\delta\check{R}_l^*$ qui nécessite un modèle de fermeture. En faisant une hypothèse d'équilibre local et en négligeant les corrélations d'ordre 3, $\delta\check{R}_l^*$ peut s'écrire :

$$\delta\check{R}_{l,ij}^* = -\frac{\tau_p}{2} \left(\delta\check{R}_{l,il} \frac{\partial\check{u}_{l,j}}{\partial x_l} + \delta\check{R}_{l,jl} \frac{\partial\check{u}_{l,i}}{\partial x_l} - \frac{2}{3} \delta\check{R}_{l,lm} \frac{\partial\check{u}_{l,l}}{\partial x_m} \delta_{ij} \right) \quad (3.99)$$

Par ailleurs, en supposant l'équilibre du tenseur d'anisotropie défini par $a_{l,ij} = (\delta\check{R}_{l,il} - 2/3\delta\check{\theta}_l\delta_{ij})/2/3\delta\check{\theta}_l\delta_{ij}$ et que l'anisotropie est négligeable ($a_{l,ij} a_{l,ij} \ll 1$), $\delta\check{R}_l^*$ peut être représenté par un modèle de type visqueux [237] :

$$\delta\check{R}_{l,ij}^* = -\nu_{RUM} \left(\frac{\partial\check{u}_{l,i}}{\partial x_j} + \frac{\partial\check{u}_{l,j}}{\partial x_i} - \frac{1}{3} \frac{\partial\check{u}_{l,l}}{\partial x_l} \delta_{ij} \right) \quad (3.100)$$

où la viscosité ν_{RUM} s'écrit :

$$\nu_{RUM} = \frac{1}{3} \tau_p \delta\check{\theta}_l \quad (3.101)$$

Connaissant $\delta\check{R}_l^*$, on exprime \mathbb{U}_θ comme la somme de deux termes :

$$\mathbb{U}_\theta = -\rho_l \check{\alpha}_l \delta\check{R}_{l,ij}^* \frac{\partial\check{u}_{l,i}}{\partial x_j} - \frac{2}{3} \rho_l \check{\alpha}_l \delta\check{\theta}_l \frac{\partial\check{u}_{l,j}}{\partial x_j} \quad (3.102)$$

où le premier terme représente la production d'énergie décorrélée par la partie déviatorique du tenseur des vitesses décorrélées et le second contient les effets de divergence du champ mésoscopique.

Dans l'équation de conservation de $\delta\check{\theta}_l$ (Eq. 3.39), le flux d'énergie décorrélée par le mouvement décorrélé $\mathbb{T} \left(\frac{1}{2} u''_{p,i} u''_{p,i} \right)$ fait intervenir le tenseur triple des vitesses décorrélées $\delta\check{S}_l$:

$$\mathbb{T} \left(\frac{1}{2} u''_{p,i} u''_{p,i} \right) = -\frac{1}{2} \frac{\partial}{\partial x_j} \rho_l \check{\alpha}_l \delta\check{S}_{l,ij} \quad (3.103)$$

Kaufmann *et al.* [111] suggèrent de modéliser $\delta\check{S}_l$ par une loi de type diffusif :

$$\delta\check{S}_{l,ij} = \kappa_{RUM} \frac{\partial\delta\check{\theta}_l}{\partial x_j} \quad (3.104)$$

Dans l'Eq. 3.104, κ_{RUM} est un coefficient de diffusion estimé par un modèle analogue à celui fourni dans l'approche RANS à deux fluides de Simonin [236] :

$$\kappa_{RUM} = \frac{5}{3} \tau_p \delta\check{\theta}_l \quad (3.105)$$

3.3.4 Récapitulatif des termes modélisés

La section suivante résume les expressions des différents modèles pour les grandeurs non résolues dans les équations de conservation eulériennes de la phase dispersée.

- Force de traînée F_d :

$$F_{d,i} = \rho_l \check{\alpha}_l \frac{u_i - \check{u}_{l,i}}{\tau_p} \quad (3.106)$$

- Destruction de l'énergie décorrélée par la traînée W_θ :

$$W_\theta = -\rho_l \check{\alpha}_l \frac{2}{\tau_p} \delta \check{\theta}_l \quad (3.107)$$

- Taux d'évaporation Γ :

$$\Gamma = \pi \check{n}_l d Sh [\rho D_F] \ln(1 + B_M) \quad (3.108)$$

- Taux de transfert de chaleur par évaporation Λ et Λ_l :

$$\text{dans le gaz : } \Lambda = \Gamma h_{s,F}(\check{T}_l) \quad (3.109)$$

$$\text{dans le liquide : } \Lambda_l = -\Gamma (\check{h}_{s,l} + h_{s,corr}) \quad (3.110)$$

- Taux de transfert de chaleur par conduction Φ et Φ_l :

$$\text{dans le gaz : } \Phi = \pi \check{n}_l d Nu \lambda (\check{T}_l - T_\infty) \quad (3.111)$$

$$\text{dans le liquide : } \Phi_l = -(\Phi + \Lambda + \Lambda_l) \quad (3.112)$$

- Tenseur des vitesses décorrélées $\delta \check{R}_l$:

$$\delta \check{R}_{l,ij} = \delta \check{R}_{l,ij}^* + \frac{2}{3} \delta \check{\theta}_l \delta_{ij} \quad (3.113)$$

$$\text{avec } \delta \check{R}_{l,ij}^* = -\nu_{RUM} \left(\frac{\partial \check{u}_{l,i}}{\partial x_j} + \frac{\partial \check{u}_{l,j}}{\partial x_i} - \frac{1}{3} \frac{\partial \check{u}_{l,l}}{\partial x_l} \delta_{ij} \right) \quad (3.114)$$

$$\text{et } \nu_{RUM} = \frac{1}{3} \tau_p \delta \check{\theta}_l \quad (3.115)$$

- Tenseur triple des vitesses décorrélées $\delta \check{S}_l$:

$$\delta \check{S}_{l,ij} = \kappa_{RUM} \frac{\partial \delta \check{\theta}_l}{\partial x_j} \quad (3.116)$$

$$\text{avec } \kappa_{RUM} = \frac{5}{3} \tau_p \delta \check{\theta}_l \quad (3.117)$$

Chapitre 4

Équations pour la LES diphasique réactive

4.1 Simulation aux grandes échelles (SGE ou LES)

La simulation aux grandes échelles [198, 215] (*large eddy simulation* ou LES en anglais) est reconnue comme une approche complémentaire de la traditionnelle approche RANS (pour *Reynolds averaged Navier-Stokes* en anglais). Bien que conceptuellement très différentes, ces deux approches ont toutes deux pour principe d'appliquer certains opérateurs de filtrage aux équations de Navier-Stokes compressibles dans le but de produire de nouveaux systèmes d'équations de conservation adaptés aux écoulements turbulents. Ces opérateurs font apparaître des termes non résolus qui nécessitent des modèles de fermeture spécifiques. Les principales différences entre l'approche RANS et LES proviennent du choix de l'opérateur employé :

Approche RANS : L'opérateur est une moyenne d'ensemble sur un grand nombre de réalisations du champ fluide [46, 198]. Les termes à modéliser doivent représenter la physique pour toutes les échelles de la turbulence.

Approche LES : L'opérateur est un filtre local, de taille fixée Δ , indépendant du temps et appliqué à une réalisation unique du champ fluide. Ce *filtrage spatial* permet une séparation entre les grandes et les petites échelles de la turbulence. Les termes à modéliser sont représentatifs de la physique pour les échelles de la turbulence plus petites qu'une échelle de coupure. Cette échelle de coupure située entre les grandes échelles résolues et les petites échelles modélisées est liée à la taille du filtre.

La différence fondamentale entre ces deux approches réside dans la plage d'échelles non résolues qui représente toutes les échelles dans le cas du RANS, seulement les petites échelles dans le cas de la LES. Cette différence est illustrée par la Fig. 4.1 montrant le spectre d'énergie d'un champ turbulent homogène isotrope (THI).

Grâce à la séparation d'échelles par le filtre, la LES permet une représentation dynamique des tourbillons de plus grande taille dont les contributions sont critiques pour les écoulements au sein de géométries complexes. La physique des écoulements turbulents est mieux prédite avec la LES puisque des phénomènes à grande échelle, comme la propagation des ondes acoustiques, sont intrinsèquement

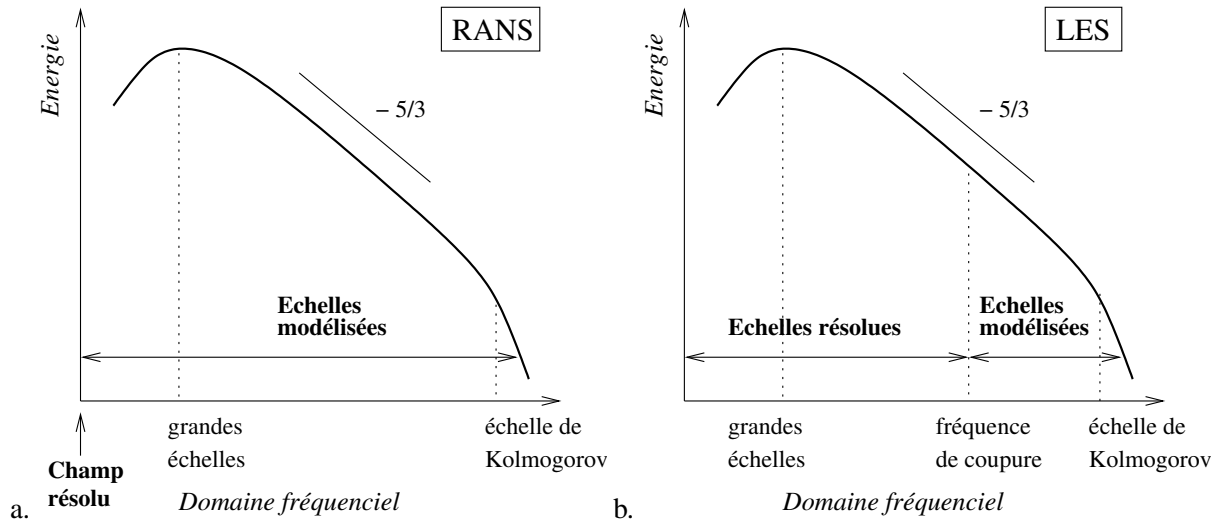


FIG. 4.1 - Représentation conceptuelle des méthodes RANS (a.) et LES (b.) appliquées à une turbulence homogène isotrope

présents dans les équations de conservation [197].

Pour toutes ces raisons, la LES possède un grand potentiel pour les écoulements turbulents réactifs que l'on rencontre dans les applications industrielles. Cette utilisation est toutefois limitée par les hypothèses introduites pour construire les modèles.

Dans ce chapitre, on présente tout d'abord les équations de conservation pour le gaz (section 4.2) puis les modèles de sous-maille correspondants (section 4.3). Le filtrage LES des équations de la phase liquide est décrit dans la section 4.4 et la modélisation du mouvement de sous-maille liquide est détaillée dans la section 4.5. La section 4.6 présente le modèle de combustion turbulente choisi dans cette étude : le modèle de flamme épaissie. Enfin, dans la section 4.7, on propose un modèle simplifié pour la cinétique chimique du kérosène.

4.2 Équations LES pour la phase gazeuse

4.2.1 Filtrage LES des équations de Navier-Stokes

La procédure de filtrage évoquée dans la section 4.1 consiste à définir la quantité filtrée \bar{f} comme le produit de convolution de la quantité non filtrée f avec un filtre spatial G_Δ de taille caractéristique Δ :

$$\bar{f}(x) = \int f(x) G_\Delta(x' - x) dx' \tag{4.1}$$

Le filtre G_Δ est classiquement de type boîte ou gaussien [216]. La quantité filtrée \bar{f} est calculée en résolvant numériquement son équation de transport. La quantité de sous-maille non résolue est $f' =$

$f - \bar{f}$. Pour les écoulements à masse volumique variable, il est pratique d'utiliser une moyenne pondérée par la masse volumique ou *moyenne de Favre*, définie par :

$$\bar{\rho} \tilde{f} = \overline{\rho f} \quad (4.2)$$

On obtient les équations de conservation de type LES en filtrant les équations de Navier-Stokes instantanées (Eq. 2.1) :

$$\frac{\partial \bar{\mathbf{w}}}{\partial t} + \nabla \cdot \bar{\mathbf{F}} = \bar{\mathbf{s}} \quad (4.3)$$

où $\bar{\mathbf{s}}$ est le terme source filtré et $\bar{\mathbf{F}}$ est le tenseur des flux filtrés composé de trois contributions :

$$\bar{\mathbf{F}} = \bar{\mathbf{F}}^I + \bar{\mathbf{F}}^V + \bar{\mathbf{F}}^t \quad (4.4)$$

avec

$$\text{tenseur des flux convectifs résolus : } \bar{\mathbf{F}}^I = (\bar{\mathbf{f}}^I, \bar{\mathbf{g}}^I, \bar{\mathbf{h}}^I)^T \quad (4.5)$$

$$\text{tenseur des flux diffusifs résolus : } \bar{\mathbf{F}}^V = (\bar{\mathbf{f}}^V, \bar{\mathbf{g}}^V, \bar{\mathbf{h}}^V)^T \quad (4.6)$$

$$\text{tenseur des flux de sous-maille : } \bar{\mathbf{F}}^t = (\bar{\mathbf{f}}^t, \bar{\mathbf{g}}^t, \bar{\mathbf{h}}^t)^T \quad (4.7)$$

L'échelle de coupure est fixée par la taille de la maille (filtrage implicite). De manière classique, on suppose qu'il y a commutation entre l'opérateur de filtrage et les opérateurs de dérivée partielle.

4.2.2 Flux convectifs résolus

Les trois composantes du tenseur des flux convectifs résolus $\bar{\mathbf{F}}^I$ sont définies par :

$$\bar{\mathbf{f}}^I = \begin{pmatrix} \overline{\rho \tilde{u}^2} + \bar{P} \\ \overline{\rho \tilde{u} \tilde{v}} \\ \overline{\rho \tilde{u} \tilde{w}} \\ \overline{\rho \tilde{E} \tilde{u}} + \bar{P} u \\ \overline{\rho_k \tilde{u}} \end{pmatrix}, \quad \bar{\mathbf{g}}^I = \begin{pmatrix} \overline{\rho \tilde{u} \tilde{v}} \\ \overline{\rho \tilde{v}^2} + \bar{P} \\ \overline{\rho \tilde{v} \tilde{w}} \\ \overline{\rho \tilde{E} \tilde{v}} + \bar{P} v \\ \overline{\rho_k \tilde{v}} \end{pmatrix}, \quad \bar{\mathbf{h}}^I = \begin{pmatrix} \overline{\rho \tilde{u} \tilde{w}} \\ \overline{\rho \tilde{v} \tilde{w}} \\ \overline{\rho \tilde{w}^2} + \bar{P} \\ \overline{\rho \tilde{E} \tilde{w}} + \bar{P} w \\ \overline{\rho_k \tilde{w}} \end{pmatrix} \quad (4.8)$$

4.2.3 Flux diffusifs résolus en écoulement non réactif

Les trois composantes du tenseur des flux diffusifs résolus $\bar{\mathbf{F}}^V$ sont définies par :

$$\begin{aligned}\bar{\mathbf{f}}^V &= \begin{pmatrix} -\overline{\tau_{xx}} \\ -\overline{\tau_{xy}} \\ -\overline{\tau_{xz}} \\ -(\overline{u \tau_{xx}} + \overline{v \tau_{xy}} + \overline{w \tau_{xz}}) + \overline{q_x} \\ \overline{J_{x,k}} \end{pmatrix} \\ \bar{\mathbf{g}}^V &= \begin{pmatrix} -\overline{\tau_{xy}} \\ -\overline{\tau_{yy}} \\ -\overline{\tau_{yz}} \\ -(\overline{u \tau_{xy}} + \overline{v \tau_{yy}} + \overline{w \tau_{yz}}) + \overline{q_y} \\ \overline{J_{y,k}} \end{pmatrix} \\ \bar{\mathbf{h}}^V &= \begin{pmatrix} -\overline{\tau_{xz}} \\ -\overline{\tau_{yz}} \\ -\overline{\tau_{zz}} \\ -(\overline{u \tau_{xz}} + \overline{v \tau_{yz}} + \overline{w \tau_{zz}}) + \overline{q_z} \\ \overline{J_{z,k}} \end{pmatrix}\end{aligned}\quad (4.9)$$

D'après Poinsot et Veynante [197] Chap. 4, les termes de diffusion en LES s'écrivent :

Tenseur des contraintes $\overline{\tau_{ij}}$

$$\overline{\tau_{ij}} = \overline{2\mu \left(S_{ij} - \frac{1}{3} \delta_{ij} S_{ll} \right)} \quad (4.10)$$

$$\text{approximation : } \overline{\tau_{ij}} \approx 2\overline{\mu} \left(\tilde{S}_{ij} - \frac{1}{3} \delta_{ij} \tilde{S}_{ll} \right) \quad (4.11)$$

$$\text{avec : } \tilde{S}_{ij} = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial \tilde{u}_j}{\partial x_i} + \frac{\partial \tilde{u}_i}{\partial x_j} \right) \quad (4.12)$$

$$\overline{\mu} \approx \mu(\tilde{T}) \quad (4.13)$$

Tenseur de diffusion des espèces $\overline{J_{i,k}}$

$$\text{en non réactif : } \overline{J_{i,k}} = -\overline{\rho \left(D_k \frac{W_k}{\overline{W}} \frac{\partial X_k}{\partial x_i} - Y_k V_i^c \right)} \quad (4.14)$$

$$\text{approximation : } \overline{J_{i,k}} \approx -\overline{\rho} \left(\overline{D}_k \frac{W_k}{\overline{W}} \frac{\partial \tilde{X}_k}{\partial x_i} - \tilde{Y}_k \tilde{V}_i^c \right) \quad (4.15)$$

$$\text{avec : } \tilde{V}_i^c = \sum_{k=1}^N \overline{D}_k \frac{W_k}{\overline{W}} \frac{\partial \tilde{X}_k}{\partial x_i} \quad (4.16)$$

$$\overline{D}_k \approx \frac{\overline{\mu}}{\overline{\rho} Sc_k} \quad (4.17)$$

Fux de chaleur \bar{q}_i

$$\text{en non réactif : } \bar{q}_i = -\lambda \frac{\partial \bar{T}}{\partial x_i} + \sum_{k=1}^N \overline{J_{i,k} h_{s,k}} \quad (4.18)$$

$$\text{approximation : } \bar{q}_i \approx -\bar{\lambda} \frac{\partial \tilde{T}}{\partial x_i} + \sum_{k=1}^N \overline{J_{i,k} \tilde{h}_{s,k}} \quad (4.19)$$

$$\text{avec : } \bar{\lambda} \approx \frac{\bar{\mu} \bar{C}_p(\tilde{T})}{Pr} \quad (4.20)$$

Les variations spatiales des flux de diffusion moléculaire sont considérées comme suffisamment faibles pour être évaluées par un modèle de type gradient. Les équations de conservation font apparaître des termes de sous-maille dont la modélisation est présentée dans la section 4.2.4.

4.2.4 Termes de sous-maille

Les trois composantes du tenseur de sous-maille $\bar{\mathbf{F}}^t$ sont définies par :

$$\bar{\mathbf{f}}^t = \begin{pmatrix} -\overline{\tau_{xx}}^t \\ -\overline{\tau_{xy}}^t \\ -\overline{\tau_{xz}}^t \\ \overline{q_x}^t \\ \overline{J_{x,k}}^t \end{pmatrix}, \quad \bar{\mathbf{g}}^t = \begin{pmatrix} -\overline{\tau_{xy}}^t \\ -\overline{\tau_{yy}}^t \\ -\overline{\tau_{yz}}^t \\ \overline{q_y}^t \\ \overline{J_{y,k}}^t \end{pmatrix}, \quad \bar{\mathbf{h}}^t = \begin{pmatrix} -\overline{\tau_{xz}}^t \\ -\overline{\tau_{yz}}^t \\ -\overline{\tau_{zz}}^t \\ \overline{q_z}^t \\ \overline{J_{z,k}}^t \end{pmatrix} \quad (4.21)$$

Les différents termes s'écrivent :

Tenseur des contraintes $\overline{\tau_{ij}}^t$

$$\overline{\tau_{ij}}^t = -\bar{\rho} (\widetilde{u_i u_j} - \tilde{u}_i \tilde{u}_j) \quad (4.22)$$

$$\text{modèle : } \overline{\tau_{ij}}^t = 2 \bar{\rho} \nu_t \left(\tilde{S}_{ij} - \frac{1}{3} \delta_{ij} \tilde{S}_{ll} \right) \quad (4.23)$$

La viscosité turbulente ν_t est calculée par le modèle de sous-maille et détaillée en section 4.3.

Tenseur de diffusion des espèces $\overline{J_{i,k}}^t$

$$\overline{J_{i,k}}^t = \bar{\rho} (\widetilde{u_i Y_k} - \tilde{u}_i \tilde{Y}_k) \quad (4.24)$$

$$\text{modèle : } \overline{J_{i,k}}^t = -\bar{\rho} \left(D_k^t \frac{W_k}{\bar{W}} \frac{\partial \tilde{X}_k}{\partial x_i} - \tilde{Y}_k \tilde{V}_i^{c,t} \right) \quad (4.25)$$

$$\text{avec : } \tilde{V}_i^{c,t} = \sum_{k=1}^N D_k^t \frac{W_k}{\bar{W}} \frac{\partial \tilde{X}_k}{\partial x_i} \quad (4.26)$$

$$D_k^t = \frac{\nu_t}{Sc_k^t} \quad (4.27)$$

De manière usuelle, le nombre de Schmidt turbulent est fixé à $Sc_k^t = 1$ pour toutes les espèces.

Flux de chaleur $\overline{q_i}^t$

$$\overline{q_i}^t = \bar{\rho} \left(\widetilde{u_i E} - \widetilde{u_i} \widetilde{E} \right) \quad (4.28)$$

$$\text{modèle : } \overline{q_i}^t = -\lambda_t \frac{\partial \widetilde{T}}{\partial x_i} + \sum_{k=1}^N \overline{J_{i,k}}^t \widetilde{h_{s,k}} \quad (4.29)$$

$$\text{avec : } \lambda_t = \frac{\mu_t \overline{C_p}}{Pr_t} \quad (4.30)$$

Dans les simulations présentées ici, le nombre de Prandtl turbulent a été fixé à $Pr_t = 0.9$, valeur classique en RANS. Pour la LES, on trouve dans la littérature des valeurs pouvant varier de 0.2 à plus de 1 en fonction de l'application.

4.3 Modèles de sous-maille

L'effet du mouvement de sous-maille sur le mouvement résolu est représentée par le tenseur des flux de sous-maille $\overline{\mathbf{F}}^t$ dont la modélisation est requise. Tous les modèles de sous-maille s'appuient sur la même hypothèse théorique d'invariance spatiale et temporelle du filtre LES. Des variations dans la taille du filtre dues à un maillage non uniforme ou à un maillage mobile ne sont pas directement prises en compte. Le changement de topologie de la cellule n'intervient que dans le calcul local du volume de la cellule : $\Delta = V_{cell}^{1/3}$. En théorie et sauf dans les modèles comme MILES [81] qui utilisent la dissipation du schéma comme modèle LES, l'utilisation de viscosité artificielle en LES (cf. section 5.3) est prohibée. Dans la pratique, son utilisation doit se faire avec la plus grande attention et ne doit pas dépasser la contribution du modèle de sous-maille. Les équations de conservation d'un écoulement compressible turbulent filtrées font apparaître des tenseurs et des vecteurs de sous-maille (notée SGS pour *sub-grid scale*) qui décrivent l'interaction entre petites échelles modélisées et grandes échelles résolues. L'influence de la sous-maille sur les échelles résolues est prise en compte au travers d'un modèle SGS utilisant une viscosité turbulente ν_t . Une telle approche suppose que les effets de sous-maille soient uniquement d'ordre dissipatif. Cette hypothèse est valide si l'on applique la théorie de la cascade énergétique de Kolmogorov [123]. En introduisant la notion de viscosité turbulente, on définit la forme générale suivante pour les modèles SGS :

$$\overline{\tau_{ij}}^t = -\bar{\rho} \left(\widetilde{u_i u_j} - \widetilde{u_i} \widetilde{u_j} \right) \quad (4.31)$$

$$\text{modèle : } \overline{\tau_{ij}}^t = 2 \bar{\rho} \nu_t \widetilde{S}_{ij} - \frac{1}{3} \overline{\tau_{ll}}^t \delta_{ij} \quad (4.32)$$

$$\text{avec : } \widetilde{S}_{ij} = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial \widetilde{u_i}}{\partial x_j} + \frac{\partial \widetilde{u_j}}{\partial x_i} \right) - \frac{1}{3} \frac{\partial \widetilde{u_k}}{\partial x_k} \delta_{ij} \quad (4.33)$$

où $\overline{\tau_{ij}}^t$ est le tenseur des contraintes à modéliser, ν_t est la viscosité turbulente de sous-maille, $\widetilde{u_i}$ est le vecteur vitesse filtré et \widetilde{S}_{ij} est le tenseur des déformations résolu. Les différents modèles se distinguent par la définition et le calcul de la viscosité turbulente de sous-maille ν_t .

4.3.1 Modèle de Smagorinsky

Dans le modèle de Smagorinsky classique, la viscosité turbulente s'écrit :

$$\nu_t = (C_S \Delta)^2 \sqrt{2 \tilde{S}_{ij} \tilde{S}_{ij}} \quad (4.34)$$

$$\text{avec : } C_S = (0.1 - 0.18) \quad \text{suivant la configuration} \quad (4.35)$$

Développé dans les années 1960, le modèle de Smagorinsky [243] fait l'objet de très nombreux tests dans la littérature sur de divers types d'écoulement. Il est très répandu du fait de sa simplicité. Dans le cas d'une turbulence homogène isotrope, il fournit le bon niveau de dissipation de l'énergie cinétique. Toutefois, ce modèle est connu pour être trop dissipatif, particulièrement près des parois, et son utilisation pour des régimes de transition vers la turbulence n'est pas recommandée [215].

4.3.2 Modèle de Smagorinsky filtré

Dans le modèle Smagorinsky filtré [68], la viscosité turbulente s'écrit :

$$\nu_t = (C_{SF} \Delta)^2 \sqrt{2 HP(\tilde{S}_{ij}) HP(\tilde{S}_{ij})} \quad (4.36)$$

$$\text{avec : } C_{SF} = 0.37 \quad (4.37)$$

Dans l'Eq. 4.36, $HP(\tilde{S}_{ij})$ est le tenseur des déformations résolu obtenu à partir d'un champ de vitesse filtré à travers un filtre passe-haut. Ce modèle a été développé afin d'améliorer la représentation de phénomènes locaux typiques des écoulements turbulents [68]. Avec le modèle de Smagorinsky filtré, la transition vers la turbulence est mieux prédite.

4.3.3 Modèle WALE

Le modèle WALE (pour *wall adapting linear eddy*) a été développé par Nicoud et Ducros [177] afin de pallier le défaut du modèle de Smagorinsky classique (cf. section 4.3.1) concernant les écoulements en proche paroi. Dans ce modèle, la viscosité turbulente est définie par :

$$\nu_t = (C_w \Delta)^2 \frac{(s_{ij}^d s_{ij}^d)^{3/2}}{(\tilde{S}_{ij} \tilde{S}_{ij})^{5/2} + (s_{ij}^d s_{ij}^d)^{5/4}} \quad (4.38)$$

C_w est la constante du modèle de Smagorinsky dont la valeur est fixée à : $C_w = 0.4929$. s_{ij}^d est la partie déviatrice du taux de déformations résolu :

$$s_{ij}^d = \frac{1}{2} (\tilde{g}_{ij}^2 + \tilde{g}_{ji}^2) - \frac{1}{3} \tilde{g}_{kk}^2 \delta_{ij} \quad (4.39)$$

où \tilde{g}_{ij} est la partie irrotationnelle du tenseur des contraintes résolu.

D'autres modèles plus complexes existent. On peut citer notamment le modèle de dynamique de Germano [85] et les modèles à fonction de structure développés par Lesieur et ses collaborateurs [134,

[135]. Dans le cadre du calcul réactif, l'utilisation des modèles complexes développés pour le non-réactif est encore à mettre au point et on se limite dans cette étude aux modèles simples. Dans la présente étude, le modèle WALE a été préféré au modèle de Smagorinsky car il permet de réduire l'effet de l'absence de traitement aux parois (cf. Thobois [255]).

4.4 Équations LES pour la phase dispersée

4.4.1 Filtrage LES des équations de conservation

Le filtrage LES de la phase dispersée est analogue à celui de la phase gazeuse. La moyenne de Favre d'une fonction eulérienne mésoscopique \check{f}_l de la phase dispersée est similaire à celle d'une fonction f de la phase gazeuse et s'obtient en remplaçant la masse volumique gazeuse ρ par la fraction volumique liquide mésoscopique $\check{\alpha}_l$ dans l'Eq. 4.2 :

$$\bar{\alpha}_l \hat{f}_l = \overline{\check{\alpha}_l \check{f}_l} \quad (4.40)$$

où $\bar{\alpha}_l$ est la fraction volumique de liquide filtrée au sens de la LES. Pour alléger les notations, on omet l'indice $\check{}$ dans la mesure où le filtrage LES de la phase dispersée ne s'applique que sur des quantités initialement produites par le filtrage statistique mésoscopique.

Afin d'avoir une équivalence entre la moyenne de Favre basée sur la fraction volumique et la densité de gouttes, on fait l'hypothèse que l'écoulement est monodisperse à l'échelle de la taille du filtre. Cela revient à négliger les effets de variance de sous-maille du diamètre des gouttes : $\bar{d} \approx d$. On a alors :

$$\overline{\check{n}_l \check{f}_l} = \frac{6\overline{\check{\alpha}_l}}{\pi d^3} \check{f}_l = \frac{6}{\pi d^3} \bar{\alpha}_l \hat{f}_l = \bar{n}_l \hat{f}_l \quad (4.41)$$

où \bar{n}_l est la densité de goutte filtrée.

En appliquant la procédure de filtrage aux équations de conservation eulériennes de la phase dispersée, on obtient les équations de conservation LES pour le spray :

$$\frac{\partial \bar{\mathbf{w}}_l}{\partial t} + \nabla \cdot \bar{\mathbf{F}}_l = \bar{\mathbf{s}}_l \quad (4.42)$$

où $\bar{\mathbf{w}}_l = (\bar{n}_l, \rho_l \bar{\alpha}_l, \rho_l \bar{\alpha}_l \hat{u}_l, \rho_l \bar{\alpha}_l \hat{v}_l, \rho_l \bar{\alpha}_l \hat{w}_l, \rho_l \bar{\alpha}_l \delta \hat{\theta}_l, \rho_l \bar{\alpha}_l \hat{h}_l)^T$ est le vecteur des variables conservatives mésoscopiques de la phase liquide avec \hat{u}_l, \hat{v}_l et \hat{w}_l les trois composantes de la vitesse mésoscopique liquide : $\hat{\mathbf{u}}_l = (\hat{u}_l, \hat{v}_l, \hat{w}_l)^T$. $\bar{\mathbf{s}}_l$ est le terme source filtré et $\bar{\mathbf{F}}_l$ est le tenseur des flux filtrés composé de trois contributions :

$$\bar{\mathbf{F}}_l = \bar{\mathbf{F}}_l^M + \bar{\mathbf{F}}_l^U + \bar{\mathbf{F}}_l^t \quad (4.43)$$

avec

$$\text{tenseur des flux mésoscopiques résolus : } \bar{\mathbf{F}}_l^M = \left(\bar{\mathbf{f}}_l^M, \bar{\mathbf{g}}_l^M, \bar{\mathbf{h}}_l^M \right)^T \quad (4.44)$$

$$\text{tenseur des flux décorrélés résolus : } \bar{\mathbf{F}}_l^U = \left(\bar{\mathbf{f}}_l^U, \bar{\mathbf{g}}_l^U, \bar{\mathbf{h}}_l^U \right)^T \quad (4.45)$$

$$\text{tenseur des flux de sous-maille : } \bar{\mathbf{F}}_l^t = \left(\bar{\mathbf{f}}_l^t, \bar{\mathbf{g}}_l^t, \bar{\mathbf{h}}_l^t \right)^T \quad (4.46)$$

4.4.2 Flux mésoscopiques résolus

Les trois composantes du tenseur des flux mésoscopiques résolus $\bar{\mathbf{F}}_l^M$ sont définies par :

$$\bar{\mathbf{f}}_l^M = \begin{pmatrix} \bar{n}_l \hat{u}_l \\ \rho_l \bar{\alpha}_l \hat{u}_l \\ \rho_l \bar{\alpha}_l \hat{u}_l^2 \\ \rho_l \bar{\alpha}_l \hat{u}_l \hat{v}_l \\ \rho_l \bar{\alpha}_l \hat{u}_l \hat{w}_l \\ \rho_l \bar{\alpha}_l \hat{u}_l \hat{\delta}\theta_l \\ \rho_l \bar{\alpha}_l \hat{u}_l \hat{h}_l \end{pmatrix}, \bar{\mathbf{g}}_l^M = \begin{pmatrix} \bar{n}_l \hat{v}_l \\ \rho_l \bar{\alpha}_l \hat{v}_l \\ \rho_l \bar{\alpha}_l \hat{u}_l \hat{v}_l \\ \rho_l \bar{\alpha}_l \hat{v}_l^2 \\ \rho_l \bar{\alpha}_l \hat{v}_l \hat{w}_l \\ \rho_l \bar{\alpha}_l \hat{v}_l \hat{\delta}\theta_l \\ \rho_l \bar{\alpha}_l \hat{v}_l \hat{h}_l \end{pmatrix}, \bar{\mathbf{h}}_l^M = \begin{pmatrix} \bar{n}_l \hat{w}_l \\ \rho_l \bar{\alpha}_l \hat{w}_l \\ \rho_l \bar{\alpha}_l \hat{u}_l \hat{w}_l \\ \rho_l \bar{\alpha}_l \hat{v}_l \hat{w}_l \\ \rho_l \bar{\alpha}_l \hat{w}_l^2 \\ \rho_l \bar{\alpha}_l \hat{w}_l \hat{\delta}\theta_l \\ \rho_l \bar{\alpha}_l \hat{w}_l \hat{h}_l \end{pmatrix} \quad (4.47)$$

4.4.3 Flux décorrélés résolus

Les trois composantes du tenseur des flux résolus du mouvement décorrélé $\bar{\mathbf{F}}_l^U$ sont définies par :

$$\bar{\mathbf{f}}_l^U = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ \rho_l \bar{\alpha}_l \widehat{\delta R}_{l,xx} \\ \rho_l \bar{\alpha}_l \widehat{\delta R}_{l,xy} \\ \rho_l \bar{\alpha}_l \widehat{\delta R}_{l,xz} \\ \rho_l \bar{\alpha}_l \widehat{\delta S}_{l,ii} \\ 0 \end{pmatrix}, \bar{\mathbf{g}}_l^U = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ \rho_l \bar{\alpha}_l \widehat{\delta R}_{l,xy} \\ \rho_l \bar{\alpha}_l \widehat{\delta R}_{l,yy} \\ \rho_l \bar{\alpha}_l \widehat{\delta R}_{l,yz} \\ \rho_l \bar{\alpha}_l \widehat{\delta S}_{l,ii} \\ 0 \end{pmatrix}, \bar{\mathbf{h}}_l^U = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ \rho_l \bar{\alpha}_l \widehat{\delta R}_{l,xz} \\ \rho_l \bar{\alpha}_l \widehat{\delta R}_{l,yz} \\ \rho_l \bar{\alpha}_l \widehat{\delta R}_{l,zz} \\ \rho_l \bar{\alpha}_l \widehat{\delta S}_{l,ii} \\ 0 \end{pmatrix} \quad (4.48)$$

Pour les tenseurs $\widehat{\delta R}_l$ et $\widehat{\delta S}_l$, on utilise la décomposition (partie déviatorique + énergie décorrélée) et la fermeture proposées dans la section 3.3.3 en remplaçant les grandeurs non filtrées par les grandeurs filtrées :

$$\widehat{\delta R}_{l,ij} = \widehat{\delta R}_{l,ij}^* + \frac{2}{3} \widehat{\delta}\theta_l \delta_{ij} \quad (4.49)$$

$$\widehat{\delta R}_{l,ij}^* = -\widehat{\nu}_{RUM} \left(\frac{\partial \widehat{u}_{l,i}}{\partial x_j} + \frac{\partial \widehat{u}_{l,j}}{\partial x_i} - \frac{\delta_{ij}}{3} \frac{\partial \widehat{u}_{l,k}}{\partial x_k} \right) \quad (4.50)$$

$$\widehat{\delta S}_{l,ij} = -\widehat{\kappa}_{RUM} \frac{\partial \widehat{\delta}\theta_l}{\partial x_j} \quad (4.51)$$

où $\widehat{\nu}_{RUM}$ et $\widehat{\kappa}_{RUM}$ s'expriment également en fonction des grandeurs filtrées :

$$\widehat{\nu}_{RUM} = \frac{1}{3} \bar{\tau}_p \widehat{\delta}\theta_l \quad (4.52)$$

$$\widehat{\kappa}_{RUM} = \frac{5}{3} \bar{\tau}_p \widehat{\delta}\theta_l \quad (4.53)$$

où le temps de relaxation filtré $\bar{\tau}_p$ est obtenu via l'approximation suivante :

$$\bar{\tau}_p \approx \left(1 + 0.15 \bar{Re}_p^{0.687}\right) \frac{\rho_l d^2}{18 \bar{\mu}} \quad (4.54)$$

$$\text{avec : } \bar{Re}_p \approx \frac{\bar{\rho} |\tilde{\mathbf{u}} - \hat{\mathbf{u}}_l| d}{\bar{\mu}} \quad (4.55)$$

4.4.4 Flux de sous-maille

Les trois composantes du tenseur de sous-maille $\bar{\mathbf{F}}_l^t$ s'écrivent :

$$\bar{\mathbf{f}}_l^t = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ -\bar{\tau}_{l,xx}^t \\ -\bar{\tau}_{l,xy}^t \\ -\bar{\tau}_{l,xz}^t \\ \bar{q}_{\theta,x}^t \\ \bar{q}_{h,x}^t \end{pmatrix}, \quad \bar{\mathbf{g}}_l^t = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ -\bar{\tau}_{l,xy}^t \\ -\bar{\tau}_{l,yy}^t \\ -\bar{\tau}_{l,yz}^t \\ \bar{q}_{\theta,y}^t \\ \bar{q}_{h,y}^t \end{pmatrix}, \quad \bar{\mathbf{h}}_l^t = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ -\bar{\tau}_{l,xz}^t \\ -\bar{\tau}_{l,yz}^t \\ -\bar{\tau}_{l,zz}^t \\ \bar{q}_{\theta,z}^t \\ \bar{q}_{h,z}^t \end{pmatrix} \quad (4.56)$$

$\bar{\tau}_l^t$ est le tenseur des contraintes de sous-maille de la phase dispersée défini par :

$$\bar{\tau}_{l,ij}^t = -\rho_l \bar{\alpha}_l (\widehat{u_{l,i} u_{l,j}} - \hat{u}_{l,i} \hat{u}_{l,j}) \quad (4.57)$$

\bar{q}_θ^t est le flux de sous-maille de l'énergie décorrélée défini par :

$$\bar{q}_{\theta,i}^t = \rho_l \bar{\alpha}_l (\widehat{u_{l,i} \delta \theta} - \hat{u}_{l,i} \hat{\delta \theta}_l) \quad (4.58)$$

\bar{q}_h^t est le flux de sous-maille de l'enthalpie sensible liquide défini par :

$$\bar{q}_{h,i}^t = \rho_l \bar{\alpha}_l (\widehat{u_{l,i} h_{s,l}} - \hat{u}_{l,i} \hat{h}_l) \quad (4.59)$$

Par la suite, on suppose que les effets de sous-maille sur l'enthalpie liquide résolue sont négligeables : $\bar{q}_h^t = 0$. La modélisation des termes $\bar{\tau}_l^t$ et \bar{q}_θ^t est décrite dans la section 4.5.

4.4.5 Termes sources filtrés

Le terme source filtré \bar{s}_l se décompose en deux parties :

$$\bar{s}_l = \bar{s}_{g-l} + \bar{s}_\theta \quad (4.60)$$

\bar{s}_θ est défini par :

$$\bar{s}_\theta = (0, 0, 0, 0, 0, \bar{U}_\theta, 0)^T \quad (4.61)$$

où $\overline{\overline{U}}_\theta$ est le terme filtré de production d'énergie décorrélée par le tenseur des vitesses décorrélées. On l'écrit :

$$\overline{\overline{U}}_\theta = -\frac{2}{3}\rho_l\overline{\alpha}_l\widehat{\delta}\theta_l\frac{\partial\widehat{u}_{l,j}}{\partial x_j} - \rho_l\overline{\alpha}_l\widehat{\delta}R^*_{l,ij}\frac{\partial\widehat{u}_{l,i}}{\partial x_j} + \overline{\overline{U}}_\theta^t \quad (4.62)$$

où $\overline{\overline{U}}_\theta^t$ est un terme de production par le mouvement de sous-maille et s'écrit :

$$\overline{\overline{U}}_\theta^t = -\left(\overline{\rho_l\check{\alpha}_l\delta\check{R}_{l,ij}\frac{\partial\check{u}_{l,i}}{\partial x_j}} - \rho_l\overline{\alpha}_l\widehat{\delta}R_{l,ij}\frac{\partial\widehat{u}_{l,i}}{\partial x_j}\right) \quad (4.63)$$

Le modèle de fermeture pour $\overline{\overline{U}}_\theta^t$ est décrit dans la section 4.5.

$\overline{\overline{s}}_{g-l}$ représente les échange filtrés avec la phase gazeuse et s'écrit :

$$\overline{\overline{s}}_{g-l} = \begin{pmatrix} 0 \\ -\overline{\overline{\Gamma}} \\ \overline{\overline{\Gamma}}_{u,x} + \overline{\overline{F}}_{d,x} \\ \overline{\overline{\Gamma}}_{u,y} + \overline{\overline{F}}_{d,y} \\ \overline{\overline{\Gamma}}_{u,z} + \overline{\overline{F}}_{d,z} \\ \overline{\overline{\Gamma}}_\theta + \overline{\overline{W}}_\theta \\ \overline{\overline{\Lambda}}_l + \overline{\overline{\Phi}}_l \end{pmatrix} \quad (4.64)$$

Les composantes de $\overline{\overline{s}}_{g-l}$ sont modélisées de la façon suivante :

Taux d'évaporation $\overline{\overline{\Gamma}}$

$$\overline{\overline{\Gamma}} = -\overline{\check{n}_l\{\check{m}_p\}_l} \quad (4.65)$$

$$= \frac{\pi\check{n}_l d Sh [\rho D_F] \ln(1 + B_M)}{Sc_F} \quad (4.66)$$

$$\text{approximation : } \overline{\overline{\Gamma}} \approx \pi\check{n}_l d \overline{Sh} \frac{\overline{\mu}}{Sc_F} \ln(1 + \overline{B}_M) \quad (4.67)$$

$$\text{avec : } \overline{Sh} \approx 2 + 0.55\overline{Re}_p^{1/2} Sc_F^{1/3} \quad (4.68)$$

$$\overline{B}_M \approx \frac{Y_{F,\zeta}(\widehat{T}_l) - \check{Y}_F}{1 - Y_{F,\zeta}(\widehat{T}_l)} \quad (4.69)$$

La validité de l'approximation de l'Eq. 4.67 est analysée dans la section 6.7.

Taux de variation de quantité de mouvement par évaporation $\overline{\overline{\Gamma}}_u$

$$\overline{\overline{\Gamma}}_{u,i} = -\overline{\overline{\Gamma}}\check{u}_{l,i} \quad (4.70)$$

$$\text{approximation : } \overline{\overline{\Gamma}}_{u,i} \approx -\overline{\overline{\Gamma}}\widehat{u}_{l,i} \quad (4.71)$$

Taux de variation de d'énergie décorrélée par évaporation $\overline{\overline{\Gamma}}_\theta$

$$\overline{\overline{\Gamma}}_\theta = -\overline{\overline{\Gamma}}\check{\delta}\theta_l \quad (4.72)$$

$$\text{approximation : } \overline{\overline{\Gamma}}_\theta \approx -\overline{\overline{\Gamma}}\widehat{\delta}\theta_l \quad (4.73)$$

Taux de variation d'enthalpie sensible liquide par évaporation $\bar{\Lambda}_l$

$$\bar{\Lambda}_l = -\overline{\Gamma \left(\check{h}_{s,l} - h_{s,corr} \right)} \quad (4.74)$$

$$\text{approximation : } \bar{\Lambda}_l \approx -\bar{\Gamma} \left(\hat{h}_l - h_{s,corr} \right) \quad (4.75)$$

Taux de variation de quantité de mouvement par la traînée \bar{F}_d

$$\bar{F}_{d,i} = \overline{\frac{\rho_l \check{\alpha}_l}{\tau_p} (u_i - \check{u}_{l,i})} \quad (4.76)$$

$$\text{approximation : } \bar{F}_{d,i} \approx \frac{\rho_l \bar{\alpha}_l}{\bar{\tau}_p} (\tilde{u}_i - \hat{u}_{l,i}) \quad (4.77)$$

Taux de variation (destruction) d'énergie décorrélée par la traînée \bar{W}_θ

$$\bar{W}_\theta = -\overline{\left(\frac{2\rho_l \check{\alpha}_l}{\tau_p} \delta \check{\theta}_l \right)} \quad (4.78)$$

$$\text{approximation : } \bar{W}_\theta \approx -\frac{2\rho_l \bar{\alpha}_l}{\bar{\tau}_p} \hat{\delta} \theta_l \quad (4.79)$$

Taux de variation d'enthalpie sensible liquide par conduction thermique $\bar{\Phi}_l$

$$\bar{\Phi}_l = -\bar{\Lambda}_l - \bar{\Lambda} - \bar{\Phi} \quad (4.80)$$

$$\text{avec : } \bar{\Lambda} = \overline{\Gamma h_{s,F}} \quad (4.81)$$

$$\bar{\Phi} = \overline{\check{n}_l \{ \pi d N u \lambda (T_\zeta - T_\infty) \}_l} \quad (4.82)$$

$$\text{approximés par : } \bar{\Lambda} \approx \bar{\Gamma} h_{s,F}(\hat{T}_l) \quad (4.83)$$

$$\bar{\Phi} \approx \pi \bar{n}_l d \bar{N} u \bar{\lambda} (\hat{T}_l - \tilde{T}) \quad (4.84)$$

On obtient finalement :

$$\bar{\Phi}_l \approx \bar{\Gamma} \left(\hat{h}_l - h_{s,corr} - h_{s,F}(\hat{T}_l) \right) - \pi \bar{n}_l d \bar{N} u \bar{\lambda} (\hat{T}_l - \tilde{T}) \quad (4.85)$$

$$\text{avec : } \bar{N} u \approx 2 + 0.55 \bar{R} e_p^{1/2} P r^{1/3} \quad (4.86)$$

Connaissant le terme source *gaz* \rightarrow *liquide* filtré \bar{s}_{g-l} , on en déduit le terme source *liquide* \rightarrow *gaz* filtré \bar{s}_{l-g} :

$$\bar{s}_{l-g} = \begin{pmatrix} \bar{\Gamma} \hat{u}_{l,x} - \bar{F}_{d,x} \\ \bar{\Gamma} \hat{u}_{l,y} - \bar{F}_{d,y} \\ \bar{\Gamma} \hat{u}_{l,z} - \bar{F}_{d,z} \\ \bar{\Lambda} + \bar{\Phi} + \tilde{u}_i (\bar{\Gamma} \hat{u}_{l,i} - \bar{F}_{d,i}) \\ \bar{\Gamma} \delta_{k,F} \end{pmatrix} \quad (4.87)$$

où $\bar{\Lambda}$ et $\bar{\Phi}$ sont donnés par les Eq. 4.83 et 4.84 respectivement.

4.5 Modèles de sous-maille pour la phase dispersée

4.5.1 Tenseur de sous-maille des vitesses mésoscopiques

Moreau [171] a montré que la modélisation du mouvement mésoscopique de sous-maille de la phase dispersée nécessitait de prendre en compte les effets de compressibilité. Riber *et al.* [208] proposent d'utiliser un modèle de type Smagorinsky [243] pour la partie déviatorique du tenseur de sous-maille des vitesses mésoscopiques $\bar{\tau}_l^t$. Les effets compressibles sont représentés par la partie diagonale de ce tenseur dont l'estimation est donnée par un modèle de Yoshizawa [272] :

$$\bar{\tau}_{l,ij}^t = -\rho_l \bar{\alpha}_l (\widehat{u_{l,i} u_{l,j}} - \widehat{u}_{l,i} \widehat{u}_{l,j}) \quad (4.88)$$

$$\text{modèle : } \bar{\tau}_{l,ij}^t = 2\rho_l \bar{\alpha}_l \nu_{l,t} \left(\widehat{S}_{l,ij} - \frac{1}{3} \widehat{S}_{l,kk} \delta_{ij} \right) + 2\rho_l \bar{\alpha}_l \kappa_{l,t} \widehat{S}_{l,ij} \delta_{ij} \quad (4.89)$$

$$\text{avec : } \widehat{S}_{l,ij} = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial \widehat{u}_{l,i}}{\partial x_j} + \frac{\partial \widehat{u}_{l,j}}{\partial x_i} \right) - \frac{1}{3} \frac{\partial \widehat{u}_{l,k}}{\partial x_k} \delta_{ij} \quad (4.90)$$

$$\text{modèle de Smagorinsky : } \nu_{l,t} = (C_{S,l} \Delta)^2 \sqrt{2 \widehat{S}_{l,ij} \widehat{S}_{l,ij}} \quad (4.91)$$

$$\text{modèle de Yoshizawa : } \kappa_{l,t} = 2C_{V,l} \Delta^2 \widehat{S}_{l,ij} \quad (4.92)$$

Les constantes du modèle sont fixées à partir de tests *a priori* [172] : $C_{S,l} = 0.16$ et $C_{V,l} = 0.012$.

4.5.2 Flux de sous-maille d'énergie décorrélée

Le transport de sous-maille de l'énergie décorrélée filtrée est pris en compte au moyen d'un modèle de diffusion turbulente :

$$\bar{q}_{\theta,i}^t = 2\rho_l \bar{\alpha}_l \frac{\nu_{l,t}}{Pr_l^t} \frac{\partial \widehat{\delta\theta}_l}{\partial x_i} \quad (4.93)$$

avec le nombre de Prandtl turbulent liquide fixé à : $Pr_l^t = 0.7$.

4.5.3 Terme de production de sous-maille d'énergie décorrélée

Le terme de production d'énergie décorrélée par le mouvement de sous-maille \bar{U}_θ^t agit comme un terme de dissipation dans l'équation d'énergie corrélée de sous-maille. À partir d'une hypothèse d'équilibre sur l'énergie corrélée de sous-maille [208], on modélise \bar{U}_θ^t de la façon suivante :

$$\bar{U}_\theta^t = \bar{\tau}_{l,ij}^t \frac{\partial \widehat{u}_{l,i}}{\partial x_j} \quad (4.94)$$

Ce modèle fait l'hypothèse que toute l'énergie du mouvement corrélé qui est dissipée par les effets de sous-maille est convertie en énergie décorrélée résolue.

4.6 Modèle de combustion turbulente

4.6.1 Modélisation de la combustion turbulente

La difficulté de la simulation en combustion turbulente est liée en particulier au rapport d'échelle entre l'épaisseur de la zone réactive et la dimension des mailles de la grille de calcul. Pour les LES de foyers aéronautiques, la taille des mailles est de l'ordre du millimètre alors que l'épaisseur du front de flamme est de l'ordre du dixième de millimètre. Il est donc exclu de résoudre la structure réelle de la flamme sur le maillage. Dans la modélisation de la combustion, on fait généralement une distinction entre les modèles pour les régimes de prémélange et les régimes non prémélangés. On trouve une description de l'ensemble de ces modèles RANS et LES dans la revue de Veynante et Vervisch [263]. Pitsch [194] fait également une revue des modèles spécifiques à la LES.

Dans cette section, on donne un bref aperçu des modèles disponibles pour la combustion prémélangée et non prémélangée en LES.

Modèles de combustion prémélangée en LES

Trois approches distinctes ont été développées pour modéliser les flammes de prémélange en LES :

- les modèles de type *G-equation* [188] où la flamme est traitée comme une interface d'épaisseur nulle (cf. ci-dessous) ;
- les modèles à densité de surface de flamme ou *flame surface density (FSD) models* (cf. ci-dessous) ;
- le modèle de flamme épaissie ou *thickened flame (TF) model* où la flamme est épaissie artificiellement de façon à la résoudre sur le maillage (cf. sections 4.6.2–4.6.5).

Modèle *G-equation*. Le principe du modèle *G-equation* est de décrire géométriquement le front de flamme en le représentant par une iso-surface G^* d'un champ scalaire G dont l'évolution est donnée par la *G-equation*. En LES, cette équation s'écrit :

$$\frac{\partial}{\partial t} \tilde{\rho} \tilde{G} + \frac{\partial}{\partial x_i} \tilde{\rho} \tilde{u}_i \tilde{G} = \rho_0 \bar{S}_T |\nabla \tilde{G}| \quad (4.95)$$

où \tilde{G} est le champ filtré en LES de G (moyenne de Favre). La vitesse de flamme turbulente de sous-maille \bar{S}_T nécessite un modèle de fermeture pour représenter les effets de sous-maille sur la vitesse de déplacement du front de flamme. Ce modèle prend généralement la forme suivante :

$$\frac{\bar{S}_T}{S_L} = 1 + \alpha \left(\frac{\overline{u'}}{S_L} \right)^n \quad (4.96)$$

où $\overline{u'}$ est l'intensité turbulente de sous-maille et les constantes α et n sont obtenues à partir de données expérimentales. Bien qu'il soit couramment utilisé dans les LES de combustion prémélangée, le modèle *G-equation* comporte plusieurs faiblesses. D'une part, la quantité de sous-maille \bar{S}_T est remplacée directement par une vitesse turbulente expérimentale sans autre justification. D'autre part, même dans le cadre de la combustion parfaitement prémélangée, la vitesse de flamme turbulente n'est pas une quantité

bien définie sur le plan théorique et expérimental [93]. Bien que des modélisations plus fines aient été proposées [187], il n'existe pas de modèle universel pour $\overline{S_T}$.

Modèle à densité de surface de flamme (FSD). Le modèle FSD se base sur le filtrage de l'équation de conservation de la variable d'avancement Θ :

$$\frac{\partial}{\partial t} \overline{\rho \tilde{\Theta}} + \frac{\partial}{\partial x_i} \overline{\rho u_i \tilde{\Theta}} + \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\overline{\rho u_i \tilde{\Theta}} - \overline{\rho \tilde{u}_i \tilde{\Theta}} \right) = \overline{\rho s_d |\nabla \Theta|} \quad (4.97)$$

En prenant un filtre de taille supérieure à la cellule du maillage LES, on peut résoudre la variable d'avancement filtrée $\tilde{\Theta}$ sur ce maillage. Dans l'Eq. 4.97, le terme de droite représentant le déplacement du front de flamme est généralement modélisé par [25] :

$$\overline{\rho s_d |\nabla \Theta|} \approx \rho_u S_L \overline{\Sigma} \quad (4.98)$$

où ρ_u et S_L sont la masse volumique des gaz brûlés et la vitesse laminaire de flamme respectivement. $\overline{\Sigma}$ est la densité de surface de flamme (FSD) filtrée qui peut être fournie par un modèle algébrique [25, 24] ou par une équation de transport [25, 100, 267]. Le modèle CFM (pour *coherent flame model*) qui fait partie de la seconde catégorie a été étendu à la LES et implanté dans AVBP par S. Richard et O. Colin [209, 210]. En comparaison au modèle *G-equation*, l'avantage du modèle FSD est de transporter des scalaires comme Θ et Σ qui sont physiquement définis et peuvent être extraits de DNS ou de mesures expérimentales.

En faisant l'hypothèse de l'existence d'une interface entre gaz frais et gaz brûlés, les modèles *G-equation* et FSD sont difficilement applicables lorsque la structure de flamme n'est pas de type prémélangée, c'est-à-dire :

- dans les régimes de combustion non prémélangée ou partiellement prémélangée (souvent le cas dans les foyers aéronautiques) ;
- lors des phénomènes d'allumage dont les premiers instants ne présentent pas un caractère propagatif.

Modèles de combustion non prémélangée en LES

La plupart des flammes de diffusion turbulentes sont contrôlées par le processus de mélange turbulent et moléculaire car le temps caractéristique de la chimie est généralement plus court que le temps turbulent. En partant de cette constatation, l'essentiel des modèles LES de combustion turbulente non prémélangée se base sur une description statistique du mélange en définissant une fonction de densité de probabilité (PDF) filtrée. Le formalisme est directement dérivé des approches développées pour les études RANS. En prenant l'hypothèse de chimie infiniment rapide, le taux de réaction local instantané filtré peut s'écrire :

$$\overline{\dot{\omega}_k}(\mathbf{x}, t) = \int_0^1 \dot{\omega}_k(z) p(z, \mathbf{x}, t) dz \quad (4.99)$$

où z et $\dot{\omega}_k$ sont la fraction de mélange et le taux de réaction non filtré respectivement. $p(z, \mathbf{x}, t)$ représente la PDF filtrée qui peut être obtenue en résolvant son équation de transport ou en présumant sa forme par

une β -fonction, par exemple [59]. À partir d'une hypothèse d'équilibre chimique, le taux de réaction $\dot{\omega}_k$ s'exprime uniquement en fonction de la fraction de mélange et peut être obtenu à partir de bibliothèques de flammelettes. Cette méthode s'étend facilement aux chimies non infiniment rapides en exprimant le taux de réaction non filtré en fonction du taux de dissipation scalaire χ de la fraction mélange :

$$\bar{\omega}_k(\mathbf{x}, t) = \int_0^1 \int_{\chi} \dot{\omega}_k(z, \chi) p(z, \chi, \mathbf{x}, t) dz d\chi \quad (4.100)$$

L'Eq. 4.100 est résolue en calculant le taux de dissipation filtré $\tilde{\chi}$ qui requiert un modèle de fermeture [58, 62, 92, 191].

Parmi les approches statistiques, on trouve également le modèle PCM [64, 65, 79, 261] qui utilise une PDF présumée de la fraction de mélange et de la variable d'avancement. La forme de cette PDF est obtenue en résolvant l'équation de transport de la valeur filtrée et de la variance de z et Θ . L'avantage de cette méthode est sa capacité à traiter les régimes de combustion prémélangée et non prémélangée. Elle suppose toutefois une indépendance entre la fraction de mélange et le taux d'avancement. Cette hypothèse a été validée à partir d'une DNS de flamme non prémélangée [260] et de données expérimentales [214] mais reste à vérifier dans d'autres configurations. Ce modèle a été implanté dans AVBP et testé en configuration industrielle par J. Galpin [83] (thèse en cours à l'IFP). Il est analogue au modèle FPV (pour *flamelet/progress variable method*) proposé par Pierce et Moin [192] et appliqué dans un calcul diphasique réactif d'un secteur de chambre de combustion par Mahesh *et al.* [142] et Moin et Apte [170].

Kim et Pitsch [120] proposent une adaptation à la LES du modèle CMC (pour *conditional moment closure*) initialement formulé par Klimenko [121] et Bilger [21] pour le RANS. Cette méthode permet de s'affranchir de l'hypothèse de flammelettes en transportant la moyenne des fractions massiques d'espèces conditionnées par la fraction de mélange. Toutefois, elle implique 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.

Enfin, Kerstein [114, 115, 116, 117, 118, 153] propose une approche originale à travers le modèle LEM (pour *linear eddy model* ou *linear eddy mixing*). Dans cette analyse, le mélange turbulent de sous-maille est considéré comme un problème à une dimension où la turbulence est vue comme un simple processus stochastique. Réaction chimique et diffusion moléculaire sont ensuite calculées en résolvant les équations de conservation d'espèces à une dimension. Cette méthode a été employée avec succès dans certains cas de combustion non prémélangée [39, 150, 153, 160] mais comporte des limitations intrinsèques qui la rendent difficilement applicable aux régimes de prémélange. Récemment, Menon et Patel ont montré la supériorité du modèle LEM sur le modèle EBU (pour *eddy breakup*) pour prédire la stabilisation de flamme dans une étude LES diphasique d'un foyer aéronautique [161].

Les études de Légier *et al.* [133], Truffin [257], Sengissen [230] et Sengissen *et al.* [232] ont montré les capacités du modèle de flamme épaissie à traiter des problèmes de combustion non prémélangée ou partiellement prémélangée. À ce jour, il manque toutefois une validation complète de ce modèle pour les régimes de diffusion. Dans la présente étude, l'objectif est de coupler un modèle pour le spray au modèle de flamme épaissie déjà implanté dans AVBP et appliqué avec succès dans de nombreuses configurations turbulentes (cf. section 4.6.2). À l'avenir, il serait intéressant d'étudier ce couplage avec d'autres modèles adaptés aux régimes partiellement prémélangés comme le modèle PCM.

Les sections suivantes décrivent les différentes déclinaisons du modèle de flamme épaissie : modèle de flamme épaissie en DNS (TF, section 4.6.2), modèle de flamme épaissie en LES (TFLES, section 4.6.3),

modèle de flamme épaissie dynamique (DTFLES, section 4.6.4) et enfin son extension à la combustion diphasique (TP-TFLES, section 4.6.5).

4.6.2 Flamme laminaire épaissie (TF)

Butler et O'Rourke [38] sont les premiers à avoir proposé d'épaissir artificiellement une flamme laminaire de prémélange pour la propager sur un maillage grossier. Cette méthode a été étendue par la suite au cas de la combustion turbulente [8, 7, 54, 133, 132, 229, 227, 197]. Une analyse dimensionnelle classique [269] montre 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 (cf. section 2.7).

$$S_L^0 \propto \sqrt{D_{th}A} \quad (4.101)$$

$$\delta_L^0 \propto \frac{D_{th}}{S_L^0} = \sqrt{\frac{D_{th}}{A}} \quad (4.102)$$

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

épaississement

$$D_{th} \longrightarrow FD_{th} \quad (4.103)$$

$$D_k \longrightarrow FD_k \quad (4.104)$$

$$\dot{\omega}_T \longrightarrow \dot{\omega}_T/F \quad (4.105)$$

$$\dot{\omega}_k \longrightarrow \dot{\omega}_k/F \quad (4.106)$$

où $\dot{\omega}_T$ et $\dot{\omega}_k$ sont prédits par le schéma cinétique qui utilise une loi d'Arrhénius (cf. Eq. 2.37). Si l'on prend l'exemple de l'équation de conservation des espèces, on obtient après épaississement :

$$\frac{\partial \rho Y_k}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\rho (u_i + V_i^c) Y_k \right) = \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\rho F D_k \frac{W_k}{\bar{W}} \frac{\partial X_k}{\partial x_i} \right) + \frac{\dot{\omega}_k}{F} \quad (4.107)$$

$$\text{avec } V_i^c = \sum_{k=1}^n F D_k \frac{W_k}{\bar{W}} \frac{\partial X_k}{\partial x_i} \quad (4.108)$$

La vitesse du front de flamme est inchangée (cf. Eq. 4.101) mais l'épaisseur du front de flamme est multipliée par F (cf. Eq. 4.102). F est choisi de manière à pouvoir résoudre le front de flamme sur le maillage considéré.

Les principaux avantages du modèle de flamme épaissie (TF) sont les suivants :

- en utilisant un schéma cinétique pour décrire la réaction chimique, on peut représenter facilement des phénomènes physiques tels que l'allumage (cf. partie III), l'extinction, la stabilisation de flamme, les interactions flamme/paroi, etc. ;
- on peut l'étendre à une chimie multi-étapes [257], voire complexe.

Toutefois, dans le cas d'écoulements turbulents, l'épaississement a pour effet de modifier le rapport entre l'échelle de longueur de la turbulence et l'épaisseur de flamme. Pour les études en LES, le modèle doit donc être complété afin de corriger ces effets. Le modèle complet TF en LES est décrit dans la section 4.6.3.

4.6.3 Modèle de flamme épaissie en LES (TFLES)

En épaississant la zone réactive, on rend la flamme moins sensible aux petites échelles turbulentes voire insensible aux échelles inférieures à $F\delta_L^0$. Cela se traduit par une diminution du plissement du front de flamme par les petits tourbillons : la surface de flamme est réduite et le taux de consommation des réactifs est sous-estimé. Pour corriger, cet effet, Colin *et al.* [54] proposent d'introduire une fonction la fonction d'efficacité E construite à partir de résultats de DNS (cf. Fig. 4.2).

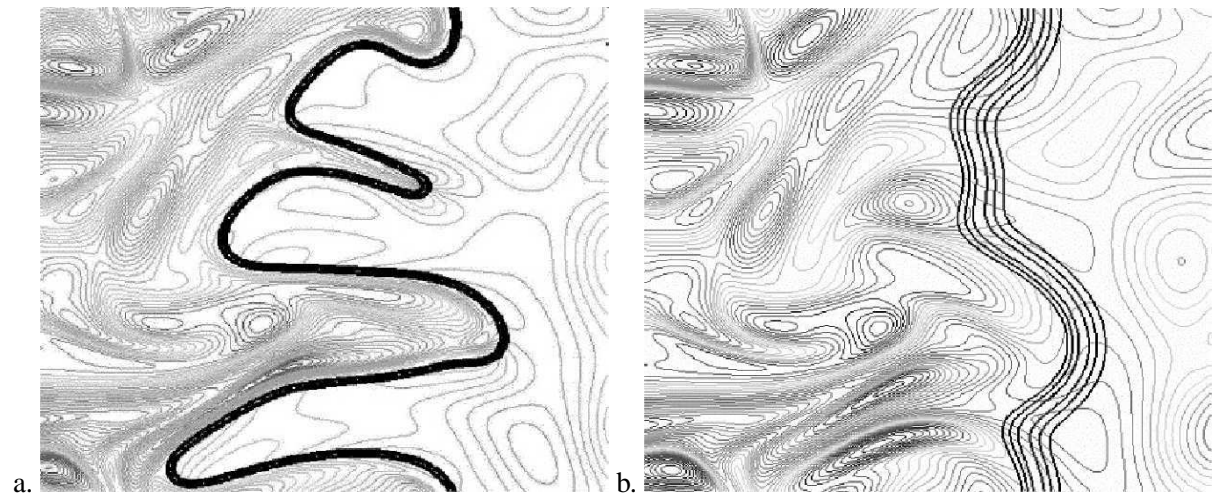


FIG. 4.2 - DNS d'interaction flamme/turbulence [8, 197]. Flamme non épaissie (a.), flamme épaissie d'un facteur $F = 5$ (b.)

Fonction d'efficacité E

On trouve une description complète de la fonction d'efficacité E dans Colin *et al.* [54]. La méthode se décompose en trois étapes principales :

1. Le facteur de plissement de la surface de flamme Ξ est estimé à partir de la densité de surface de flamme $\bar{\Sigma}$, en supposant l'équilibre entre la turbulence et la surface de flamme de sous-maille :

$$\Xi \simeq 1 + \alpha \frac{\Delta_e}{S_L^0} \langle a_T \rangle_s \quad (4.109)$$

où $\langle a_T \rangle_s$ est le taux d'étirement de sous-maille, Δ_e est la taille du filtre et α est la constante du modèle.

2. $\langle a_T \rangle_s$ est défini par l'Eq. 4.110 à partir de la taille du filtre Δ_e et de la fluctuation de vitesse de sous-maille u'_{Δ_e} . La fonction Γ_{Δ_e} , définie par l'Eq. 4.111, correspond à la prise en compte du taux d'étirement lié à toutes les échelles influencées par l'épaississement, c'est-à-dire toutes les échelles comprises entre l'échelle de Kolmogorov et la taille du filtre Δ_e [159]. Enfin, la fonction d'efficacité E est définie par l'Eq. 4.112 comme le rapport entre le plissement de la flamme non épaissie et le plissement de la flamme épaissie.

$$\langle a_T \rangle_s = \Gamma_{\Delta_e} u'_{\Delta_e} / \Delta_e \quad (4.110)$$

$$\Gamma_{\Delta_e} \left(\frac{\Delta_e}{\delta_L^1}, \frac{u'_{\Delta_e}}{S_L^0} \right) = 0.75 \exp \left[- \frac{1.2}{(u'_{\Delta_e} / S_L^0)^{0.3}} \right] \left(\frac{\Delta_e}{\delta_L^1} \right)^{\frac{2}{3}} \quad (4.111)$$

$$E = \frac{\Xi(\delta_L^0)}{\Xi(\delta_L^1)} = \frac{1 + \alpha \Gamma_{\Delta_e} \left(\frac{\Delta_e}{\delta_L^0}, \frac{u'_{\Delta_e}}{S_L^0} \right) \frac{u'_{\Delta_e}}{S_L^0}}{1 + \alpha \Gamma_{\Delta_e} \left(\frac{\Delta_e}{\delta_L^1}, \frac{u'_{\Delta_e}}{S_L^0} \right) \frac{u'_{\Delta_e}}{S_L^0}} \quad (4.112)$$

S_L^0 est la vitesse de propagation du front de la flamme non épaissie et δ_L^0 son épaisseur. L'épaisseur de la flamme épaissie est définie par : $\delta_L^1 = F \delta_L^0$. On peut montrer que E varie entre 1 (faible niveau de turbulence) et $E_{max} \simeq F^{2/3}$ (plissement important à l'échelle de la sous-maille). Dans le cas de flammes turbulentes prémélangées, la fonction d'efficacité est telle que la vitesse turbulente de propagation soit correctement prédite : $E S_L^0 = S_T$. En fait, spécifier une vitesse turbulente de sous maille S_T est exactement équivalent à spécifier une efficacité E . Colin *et al.* [54] définissent une longueur de coupure δ_L^c telle que les tourbillons plus petits que cette taille n'affectent pas le plissement de la flamme. La fonction d'efficacité est donc sollicitée si la taille caractéristique d'un tourbillon r est telle que :

- dans le cas d'une flamme non épaissie : $\delta_L^0 > r > \delta_L^c$;
- dans le cas d'une flamme épaissie : $\delta_L^1 = \beta F \delta_L^0 > r > \delta_L^c$.

β est une constante de la fonction d'efficacité de l'ordre de 1.

3. La taille du filtre Δ_e correspond à la plus grande échelle influencée par l'épaississement δ_L^1 . En pratique, $\Delta_e = 10 \Delta_x$ avec $\Delta_x = \sqrt[3]{V_{cell}}$.

Les fluctuations de vitesse de sous-maille u'_{Δ_e} sont estimées en utilisant l'opérateur OP_2 basé sur le rotationnel du champ de vitesse. Le rôle de cet opérateur est de supprimer la contribution en dilatation qui n'est pas considérée comme de la *turbulence*.

L'opérateur Laplacien défini par l'Eq. 4.113 est directement appliqué au champ de vitesse.

$$u'_{\Delta_e} = c_2 \Delta_x^3 |\nabla^2 (\nabla \times \bar{u})|, \quad c_2 \approx 2 \quad (4.113)$$

Estimation de la constante α

La constante α est estimée de façon à retrouver le comportement asymptotique du facteur de plissement Ξ en fonction des fluctuations de vitesse u' pour les flammes mince telles que Δ_e tend vers l'échelle intégrale l_t . Dans ce cas, le plissement Ξ tend vers un plissement maximum Ξ_{max} défini par l'Eq. 4.114.

L'Eq. 4.115 qui définit α se déduit de l'Eq. 4.114.

$$\Xi_{max} = 1 + \beta u' / s_t^0 \quad (4.114)$$

$$\alpha = \beta \frac{2 \ln(2)}{3 c_{ms} (Re_t^{1/2} - 1)} \quad (4.115)$$

$$\text{avec : } Re_t = \frac{u' l_t}{\nu} \quad \text{et} \quad c_{ms} = 0.28 \quad (4.116)$$

Il existe plusieurs méthodes pour calculer les constantes α et β , notamment celles proposées par Colin *et al.* [54] ou Charlette *et al.* [45].

Implantation

En pratique, les équations de conservation des espèces et de l'énergie sont modifiées en écrivant les flux diffusifs (Eq. 4.117 à 4.119) et le terme source (Eq. 4.120) comme suit :

– tenseur de diffusion des espèces :

$$\overline{J_{i,k}} = -EF \frac{\bar{\mu}}{Sc_k} \frac{W_k}{\bar{W}} \frac{\partial \tilde{X}_k}{\partial x_i} + \bar{\rho}_k \tilde{V}_i^c \quad (4.117)$$

$$\text{avec : } \tilde{V}_i^c = EF \sum_{k=1}^N \frac{\bar{\mu}}{\bar{\rho} Sc_k} \frac{W_k}{\bar{W}} \frac{\partial \tilde{X}_k}{\partial x_i} \quad (4.118)$$

– flux de chaleur :

$$\bar{q}_i = -EF \frac{\bar{\mu} \bar{C}_p}{Pr} \frac{\partial \tilde{T}}{\partial x_i} + \sum_{k=1}^N \overline{J_{i,k}} \tilde{h}_{s,k} \quad (4.119)$$

– terme source chimique :

$$\bar{s}_c = \left(0, 0, 0, \frac{E \bar{\omega}_T}{F}, \frac{E \bar{\omega}_k}{F} \right)^T \quad (4.120)$$

4.6.4 Modèle de flamme épaissie dynamique

Principe de fonctionnement

Le modèle de flamme épaissie décrit dans la section 4.6.3 est approprié pour le calcul de flammes parfaitement prémélangées. Pour les flammes partiellement prémélangées, en revanche, ce modèle doit être ajusté pour deux raisons principales :

1. Dans les zones non réactives où seul le mélange se produit, les diffusions thermiques et moléculaires sont surestimées d'un facteur F . Dans ces régions, le facteur d'épaississement doit donc valoir $F = 1$.
2. Dans la flamme, l'épaississement permet de résoudre les termes diffusifs et les termes sources. Ainsi, les termes de sous-maille doivent être annulés dans le front de flamme.

En d'autres termes, le modèle TF est adapté dans la zone de flamme mais doit être corrigé hors de cette région. Le modèle de flamme épaissie dynamique (DTF pour *dynamically thickened flame* en anglais) a été développé pour tenir compte de ces corrections [133]. Dans ce modèle schématisé sur la Fig. 4.3, l'épaississement F n'est plus une constante mais varie entre F_{max} dans la zone réactive et $F = 1$ ailleurs.

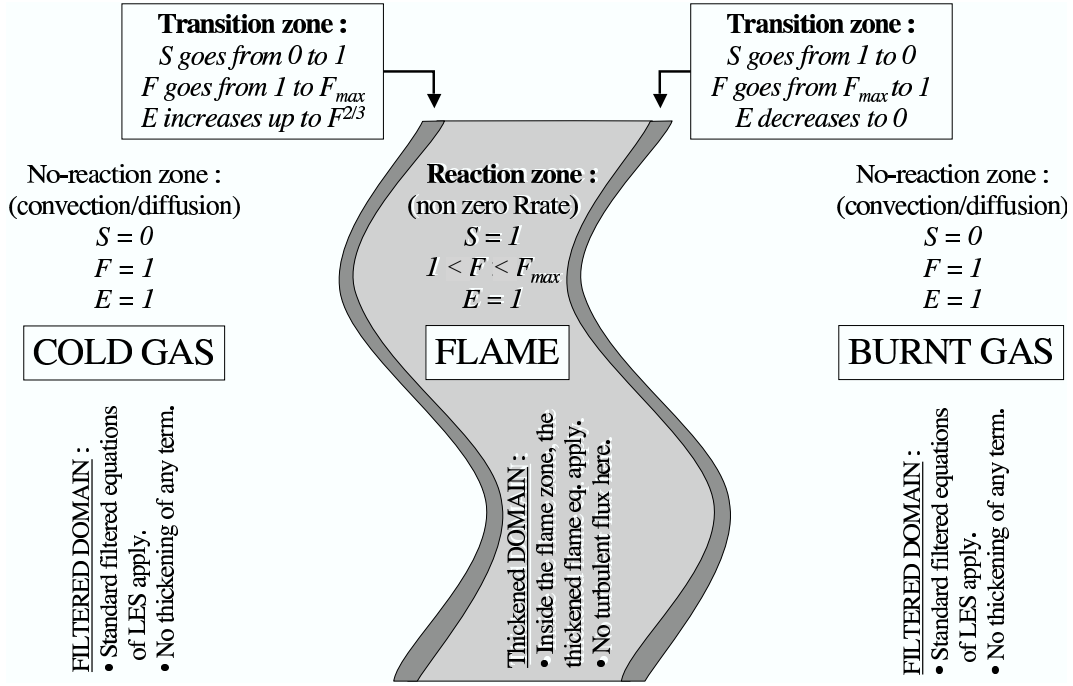


FIG. 4.3 - Principe de fonctionnement de l'épaississement dynamique DTF

L'épaississement dynamique F est défini par l'Eq. 4.121. Le senseur S défini par l'Eq. 4.122 dépend localement des fractions massiques et de la température. S évalue si la zone est réactive ($S = 1$) ou non ($S = 0$) à l'aide de la fonction de présence Ω utilisant des paramètres similaires à ceux du schéma cinétique.

$$F = 1 + (F_{max} - 1) S \quad (4.121)$$

$$S = \tanh\left(\beta' \frac{\Omega}{\Omega_0}\right) \quad \text{avec : } \beta' = 500 \quad (4.122)$$

$$\Omega = Y_F^{\nu'_F} Y_O^{\nu'_O} \exp\left(-\Gamma_T \frac{E_a}{RT}\right) \quad (4.123)$$

Le paramètre Γ_T est utilisé pour enclencher la fonction d'épaississement avant la réaction et vaut typiquement : $\Gamma_T = 0.68$. Ω_0 est déterminé en calculant le maximum de Ω dans une flamme laminaire prémélangée stœchiométrique 1D non épaissie.

Facteur d'épaississement dépendant de la résolution locale

Dans les calculs LES où la taille des mailles peut varier beaucoup (cf. 5.4), il est pratique d'adapter le facteur d'épaississement au maillage local. Pour ce faire, on évalue F_{max} selon l'expression suivante :

$$F_{max} = n \frac{\delta_L^0}{\Delta x} \quad (4.124)$$

où Δx est la taille locale de la maille et n est le nombre de cellules contenues dans l'épaisseur du front de flamme épaissi. La valeur $n = 5$ est généralement suffisante pour résoudre correctement le front de flamme en évitant les erreurs numériques dues à des gradients mal résolus.

4.6.5 Modèle de flamme épaissie diphasique

Dans le cas d'un régime de préévaporation (cf. section 1.2.2), l'évaporation totale du spray de carburant a lieu en amont de la zone réactive et le processus de combustion turbulente est correctement décrit par le modèle de flamme épaissie dynamique présenté dans la section 4.6.4. En revanche, dans les applications traitées ici, le spray est présent dans la zones réactives et le taux d'évaporation du carburant liquide conditionne le taux de réaction du carburant gazeux. Le modèle de flamme épaissie doit donc être adapté pour prendre en compte le couplage entre le spray et la flamme.

Modèle de flamme diphasique épaissie en DNS (TP-TF)

On définit le nombre de Damköhler d'évaporation Da_e comme le rapport entre le temps d'évaporation du spray τ_e et le temps caractéristique de la chimie τ_c : $Da_e = \tau_e/\tau_c$. Pour garder une structure et une dynamique de flamme constante, ce rapport doit être conservé lors de la procédure d'épaississement. Pour ce faire, il suffit de diviser les taux de transferts de masse et de chaleur par évaporation par le facteur d'épaississement F . Cette correction ne peut se faire que dans le contexte d'un épaississement dynamique (cf. section 4.6.4) car le processus d'évaporation ne doit pas être altéré dans les zones non réactives pour ne pas modifier la fraction de vapeur de carburant évaporée avant la flamme. Un changement d'échelle rigoureux nécessiterait de conserver également le nombre de Stokes de la flamme St_c défini comme le rapport entre le temps de relaxation des gouttes τ_p et le temps chimique τ_c : $St_c = \tau_p/\tau_c$. Il faudrait alors appliquer le facteur F aux termes sources de traînée dans les équations de conservation. Dans un premier temps, cet effet est considéré comme étant de deuxième ordre et la traînée n'est pas corrigée par le modèle d'épaississement pour ne pas modifier artificiellement la dynamique de la phase dispersée. Les effets de la traînée et de l'absence de correction sont étudiés dans la section 7.3.8.

Modèle de flamme diphasique épaissie en LES (TP-TFLES)

Le modèle de flamme épaissie en combustion gazeuse prend en compte l'effet de la turbulence à travers la modélisation du plissement de sous-maille (cf. section 4.6.3). En plissant le front de flamme, les structures non résolues ont pour effet d'augmenter la surface totale de la flamme. Si l'on fait l'hypothèse

de flammelettes et que l'on néglige les effets de courbure et d'étirement, le taux de réaction local n'est pas affecté par la turbulence et le taux de réaction intégral est augmenté dans la même proportion que la surface de flamme, d'où la relation suivante :

$$\frac{S_T}{S_L^0} = \frac{A_T}{A} \quad (4.125)$$

où S_T représente la vitesse de propagation du front de flamme plissé dont la surface totale est A_T pour une section d'écoulement A . S_L^0 est la vitesse locale du front de flamme correspondant à la vitesse de flamme laminaire.

En présence de la phase dispersée, l'effet de la turbulence sur le taux de réaction intégral ne semble pas aussi évident. Dans une flamme diphasique, le taux de réaction est imposé à la fois par la vitesse de la réaction chimique et par le taux d'évaporation de la phase dispersée. Comme on le montre dans la section 7.3.5, ce taux d'évaporation dépend fortement de la température du gaz environnant. Dans le cas limite où la flamme se propage dans un brouillard saturé froid, l'essentiel de l'évaporation se fait au sein du front de flamme sous l'effet du gradient de température produit par la réaction. Le plissement du front de flamme entraîne une augmentation de sa surface qui provoque une augmentation du taux d'évaporation. Toutefois, contrairement à la relation de proportionnalité exprimée par l'Eq. 4.125, la relation entre le taux d'évaporation intégral et cette surface de flamme n'est probablement pas linéaire. Dû aux effets d'inertie, les trajectoires des gouttelettes peuvent dévier fortement de celles de l'écoulement gazeux : il est alors difficile d'envisager un front de flamme qui possède une structure locale identique à la flamme laminaire monodimensionnelle. En l'absence de connaissances plus précises sur ce phénomène, le modèle TP-TFLES n'inclut pas d'effet du plissement de sous-maille sur l'évaporation et conserve le facteur d'efficacité E utilisé dans le modèle de combustion monophasique. Des éclaircissements sur ce sujet sont attendus à travers l'étude qui sera menée par M. Sanjosé au cours de sa thèse (Cerfacs, 2006–2009).

En pratique, le modèle TP-TFLES se traduit par la correction suivante sur les termes filtrés de transfert entre phases \bar{s}_{g-l} et \bar{s}_{l-g} à partir des Eq. 4.64 et 4.87 respectivement :

$$\bar{s}_{g-l} = \begin{pmatrix} 0 \\ -\bar{\Gamma}/F \\ \bar{\Gamma}_{u,x}/F + \bar{F}_{d,x} \\ \bar{\Gamma}_{u,y}/F + \bar{F}_{d,y} \\ \bar{\Gamma}_{u,z}/F + \bar{F}_{d,z} \\ \bar{\Gamma}_{\theta}/F + \bar{W}_{\theta} \\ \bar{\Lambda}_l/F + \bar{\Phi}_l/F \end{pmatrix}, \quad \bar{s}_{l-g} = \begin{pmatrix} \bar{\Gamma}\hat{u}_{l,x}/F - \bar{F}_{d,x} \\ \bar{\Gamma}\hat{u}_{l,y}/F - \bar{F}_{d,y} \\ \bar{\Gamma}\hat{u}_{l,z}/F - \bar{F}_{d,z} \\ \bar{\Lambda}/F + \bar{\Phi}/F + \tilde{u}_i (\bar{\Gamma}\hat{u}_{l,i}/F - \bar{F}_{d,i}) \\ \bar{\Gamma}\delta_{k,F}/F \end{pmatrix} \quad (4.126)$$

Le terme source de réaction chimique \bar{s}_c , quant à lui, conserve la forme donnée par l'Eq. 4.120.

4.7 Modélisation de la chimie du kérosène

Le modèle de combustion TFLES adopté dans cette étude (cf. section 4.6) nécessite de prédire correctement la vitesse de la flamme laminaire dans les conditions physiques de la configuration. Or la vitesse

de propagation d'un front de flamme laminaire est principalement influencée par la cinétique chimique de la réaction de combustion et les propriétés de transport diffusif de température et d'espèces (cf. Fig. 4.4). Il convient donc de prendre en compte une cinétique de combustion adaptée au carburant que l'on brûle.

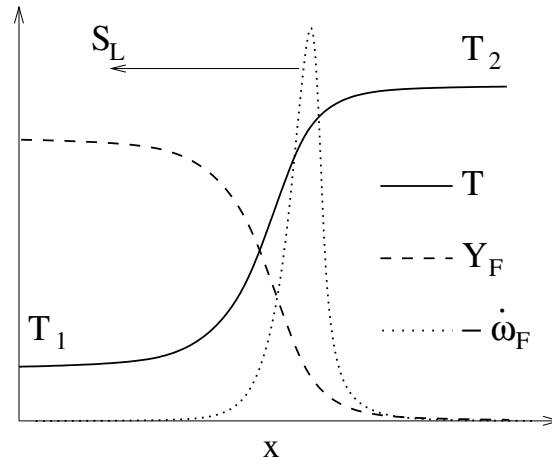


FIG. 4.4 - Schéma d'une flamme laminaire prémélangée se propageant à la vitesse S_L

Mettre au point un schéma cinétique adapté nécessite les étapes suivantes :

- choisir un constituant chimique représentant le carburant réel ;
- obtenir des données de références caractérisant la flamme laminaire de ce carburant ;
- construire un schéma simplifié ajusté selon ces données de références.

4.7.1 Choix d'un carburant de substitution

Les turbines aéronautiques actuelles utilisent le kérosène, la plupart du temps sous la forme du JET-A, un hydrocarbure constitué d'un mélange complexe de centaines d'espèces différentes. La composition de ce mélange varie en fonction de l'origine du pétrole brut, du processus de raffinage et de la période de l'année. La Fig. 4.5 illustre, pour un type de kérosène, la grande variété de composés classés par nombre d'atomes de carbone et par température du point éclair (*Flash point*). Parmi ces composés, on trouve des alcanes, des alcènes, des composés aromatiques, etc.

La première simplification consiste donc à se ramener à un carburant pur qui possède les propriétés globales du kérosène en terme de composition, de masse molaire et de propriétés de thermodynamiques et diffusives.

Dans cette étude, le JP10 a été choisi comme *substitut* du kérosène pour les raisons suivantes :

- corps pur donc plus facile à modéliser,
- hydrocarbure liquide dans les conditions ambiantes,
- masse molaire proche de la masse molaire moyenne du kérosène,
- propriétés thermodynamiques connues,
- disponibilité d'un schéma cinétique complexe caractérisant sa combustion.

Le JP10, aussi appelé exo-tetrahydrodicyclopentadiène, a pour formule brute : $C_{10}H_{16}$. Les données thermodynamiques concernant le JP10 gazeux ont été obtenues sur la base de données en ligne NASA

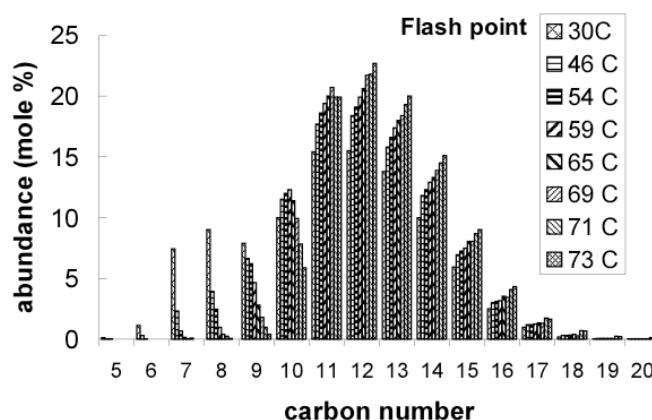


FIG. 4.5 - Exemple de composition d'un kérosène obtenue par chromatographie en phase gazeuse. Extrait de Flash Point and Chemical Composition of Aviation Kerosene (JetA) [233].

Glenn Research Center (URL : <http://cea.grc.nasa.gov/>). Elles ont été traduites du format Chemkin au format compatible avec la base thermodynamique d'AVBP. Concernant le JP10 liquide, certaines données thermodynamique faisaient défaut au moment de l'étude. C'est pourquoi la masse volumique et la capacité calorifique ont été supposées égales à celle du décane [82], l'alcane possédant le même nombre d'atome de carbone que le JP10. Les propriétés du carburant liquide utilisées dans les calculs sont fournies dans le tableau 4.1.

Masse volumique :	ρ_l	=	783 kg.m^{-3} [82]
Température d'ébullition à pression ambiante :	T_{eb}	=	461.23 K [49]
Température de Clausius-Clapeyron :	T_{cc}	=	393.85 K [49]
Pression de Clausius-Clapeyron :	P_{cc}	=	15870.0 Pa [49]
Enthalpie latente d'évaporation :	L_v	=	305 kJ.mol^{-1} [49]
Capacité calorifique à pression constante :	$C_{p,l}$	=	$2.100 \text{ kJ.mol}^{-1}.K^{-1}$ [82]

TAB. 4.1 - Propriétés thermodynamiques du JP10 liquide utilisées dans l'étude ($T = 298.15 \text{ K}$)

Une recherche bibliographique plus récente permet de corriger les valeurs incertaines (cf. Tab. 4.2) et révèle une différence significative sur la masse volumique du liquide. Dans les calculs présentés ici, cet écart ne pose pas de réel problème car on n'effectue pas de confrontation avec l'expérience. La correction devra toutefois être prise en compte lors des calculs futurs utilisant le JP10 liquide comme carburant.

Masse volumique :	ρ_l	=	931.8 kg.m^{-3} [36]
Capacité calorifique à pression constante :	$C_{p,l}$	=	$2.467 \text{ kJ.mol}^{-1}.K^{-1}$ [49]

TAB. 4.2 - Propriétés thermodynamiques corrigées du JP10 liquide ($T = 298.15 \text{ K}$)

4.7.2 Élaboration du schéma réactionnel simplifié

Pour le carburant de substitution choisi, on dispose d'un schéma cinétique de combustion qui prend en compte le mécanisme réactionnel complet comportant des centaines de réactions intermédiaires. Ce schéma représente une complexité bien supérieure aux besoins du calcul LES où l'on cherche à prédire correctement quelques caractéristiques globales comme la vitesse de flamme turbulente et la température des gaz brûlés.

On va donc remplacer la cinétique chimique complexe du JP10 par un mécanisme à une étape irréversible qualifié de schéma simplifié. La méthode consiste à trouver les paramètres de la loi d'Arrhénius de ce schéma simplifié afin de reproduire dans un premier temps deux caractéristiques principales de la flamme plane laminaire prémélangée réelle :

- la vitesse de propagation laminaire,
- l'épaisseur thermique de flamme.

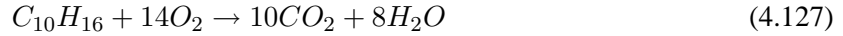
D'autres caractéristiques telles que le délai d'auto-allumage ou la prédiction de certaines espèces secondaires peuvent être utilisées dans un deuxième temps mais nécessitent alors des schémas multi-étapes. La température adiabatique de flamme dépend directement des équilibres réactionnels entre les espèces présentes : le schéma cinétique influence cette température sauf dans le cas présent d'une réaction irréversible. Toutes ces caractéristiques de flamme sont obtenues grâce au logiciel PREMIX issu de l'ensemble logiciel CHEMKIN 4 [56]. Pour une pression et une température de gaz frais données, PREMIX effectue un calcul de flamme plane laminaire prémélangée à différentes richesses. Ces calculs permettent, d'une part de fournir les données de référence grâce au schéma complexe (supposé exact), d'autre part d'évaluer les prédictions du schéma simplifié par rapport à cette référence.

Cette étude a mis en évidence un défaut de PREMIX à assurer la conservativité des espèces chimiques, en particulier pour des carburants lourds tels que le JP10. Cette erreur se manifeste particulièrement sur le profil de fraction massique de diazote - gaz inerte - dont le niveau devrait être égal entre l'amont et l'aval du front de flamme. Elle est due à l'erreur numérique induite par le schéma de différentiation décentré utilisé pour le calcul des flux massiques. Après avoir été informé de ce défaut de conservativité, l'éditeur du logiciel Reaction Design a introduit un correctif dans la version 4.0.2 du pack CHEMKIN.

La détermination des paramètres du schéma simplifié est un problème d'optimisation multi-critères que l'on résout avec le logiciel EPORCK mis au point par C. Martin lors de sa thèse [145]. EPORCK opère le couplage entre l'algorithme génétique GENOCOP [162] et PREMIX afin de minimiser l'écart entre les prédictions du schéma simplifié et les valeurs de référence du schéma complexe. S'il est généralement assez facile d'ajuster un schéma mono-étape de façon manuelle, l'intérêt d'utiliser d'EPORCK est de fournir la meilleure solution sans intervention de la part de l'utilisateur. Une fois la boucle d'optimisation mise en place, le logiciel fournit rapidement un nouveau schéma lorsqu'on fait varier les conditions physiques (pression et température).

Schéma complexe du JP10

L'équation bilan de la réaction globale de combustion du JP10 est la suivante :



L'Eq. 4.127 ne prend pas en compte le mécanisme réactionnel complet qui fait intervenir les réactions intermédiaires et les sous-espèces dont certaines (CO , NO_x , etc.) sont présentes dans les produits de combustion.

Parmi toutes les réactions du schéma complet, on peut écarter celles qui ne jouent pas un rôle significatif dans les propriétés de la flamme : on crée alors un schéma réactionnel réduit. Le schéma de référence utilisé ici est le schéma complexe réduit à 36 espèces et 174 réactions proposé par Li *et al.* [136]

Ce schéma a été validé par comparaison avec l'expérience sur des cas d'allumage dans des conditions de pression allant de 1 à 8 bars et des richesses allant de 0.5 à 2.0 [136].

Ajustement du schéma simplifié par optimisation

Le taux d'avancement du schéma simplifié caractérisant la combustion du JP10 est donné par la loi d'Arrhenius :

$$Q = AT^\beta \left(\frac{\rho Y_{JP10}}{W_{JP10}} \right)^{n_{JP10}} \left(\frac{\rho Y_{O_2}}{W_{O_2}} \right)^{n_{O_2}} \exp\left(-\frac{T_a}{T}\right) \quad (4.128)$$

où :

- A est la constante pré-exponentielle ;
- β est l'exposant de température (supposé nul ici) ;
- Y_{JP10} et Y_{O_2} sont respectivement la fraction massique du JP10 et la fraction massique du dioxygène ;
- n_{JP10} et n_{O_2} sont les exposants de la réaction ;
- T_a est la température d'activation.

L'optimisation par algorithme génétique (AG) consiste à trouver le jeu de paramètres A , n_{JP10} , n_{O_2} et T_a qui prédit les caractéristiques de la flamme obtenues avec le schéma réduit pour une température T_1 dans les gaz frais, une pression donnée et à différents points de richesse. La richesse ϕ du mélange est définie à partir des fractions massique des réactifs :

$$\phi = s \frac{Y_{JP10}}{Y_{O_2}} \quad (4.129)$$

où s est le rapport stoechiométrique de masse qui vaut, dans le cas du JP10 :

$$s = \left[\frac{Y_{O_2}}{Y_{JP10}} \right]_{st} = \frac{\nu'_{O_2} W_{O_2}}{\nu'_{JP10} W_{JP10}} = 3.288 \quad (4.130)$$

On rappelle que les objectifs d'optimisation du schéma sont :

- la vitesse de flamme laminaire S_L ,
- l'épaisseur thermique de flamme $\delta_L^0 = \frac{T_2 - T_1}{\max\left(\left|\frac{\partial T}{\partial x}\right|\right)}$ (cf. Fig. 4.4).

Dans le cas d'un schéma mono-étape irréversible, l'épaisseur thermique de flamme est liée à la vitesse de propagation : $\delta_L^0 \propto \frac{D_{th}}{S_L}$. L'objectif *épaisseur de flamme* est donc totalement dépendant de l'objectif *vitesse de flamme*. Il est toutefois conservé afin d'éliminer d'éventuelles solutions non physiques prédites par PREMIX.

La figure 4.6 représente l'ensemble de la procédure d'optimisation conduisant à l'obtention d'un schéma ajusté. Afin de comprendre le principe de l'algorithme génétique, on fait correspondre dans le tableau 4.3 le vocabulaire de l'optimisation génétique et son application à l'ajustement du schéma réactionnel.

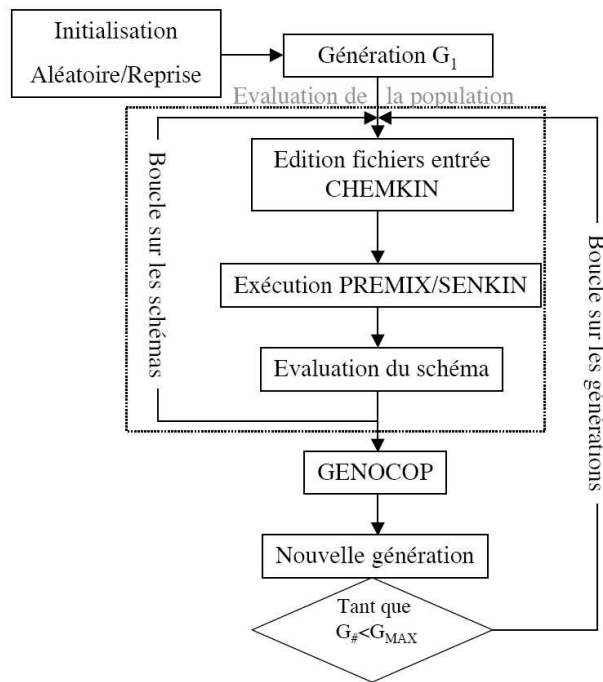


FIG. 4.6 - Schéma de principe de EPORCK (Extrait de la thèse de C. Martin [145])

Terme AG	Définition AG	Correspondance dans ePorck
Population	ensemble d'individus	ensemble de différents schémas réactionnels
Individu	ensemble de gènes	schéma réactionnel
Gène	paramètre modifié par l'AG	paramètre d'ajustement du schéma (A, n_{JP10}, n_{O_2} ou T_A)

TAB. 4.3 - Vocabulaire de l'algorithme génétique (AG) et définition correspondante dans EPORCK

La génération G_i est caractérisée par une population d'individus ayant un jeu de gènes différents. La performance de chaque individu par rapport à l'objectif d'optimisation est évaluée grâce aux calculs PREMIX. Cette performance est utilisée par GENOCOP qui génère les nouveaux individus de la génération G_{i+1} en effectuant les deux tâches suivantes :

- élimination des individus les moins compétitifs ;
- manipulations sur les gènes des individus survivants : mutations aléatoires (avec différentes lois de probabilité et différents gènes mutés) et croisements entre certains gènes de différents individus.

L'intérêt de l'AG est d'explorer simultanément différentes voies d'adaptation pour converger vers le meilleur individu du point de vue des objectifs. Il évite ainsi de converger vers un optimum local tout en étant particulièrement robuste.

Pression :	P	=	1 atm
Température des gaz frais :	T_1	=	525 K
Richesse :	ϕ	=	$0.6, 0.7, 0.8, \text{ et } 0.9$

TAB. 4.4 - Conditions physiques utilisées pour la procédure d'optimisation

Dans le but de préparer le calcul LES présenté dans la partie III, on se place dans les conditions physiques proches du point d'opération étudié (Tab. 4.4). Toutefois, le schéma étant initialement prévu pour une application non présentée ici, la température des gaz frais (525 K) reste assez éloignée de la condition utilisée dans le calcul LES (273 K). Néanmoins, les tests ont montré que les prédictions du schéma ajusté à 525 K restent correctes par rapport à celles du schéma de complexe lorsqu'on se place à 273 K . Les schémas mono-étape ajustés pour un régime (pauvre ou riche) sont connus pour être peu réalistes dans le régime opposé (respectivement riche ou pauvre). Le choix est fait de baser la procédure d'optimisation sur quatre points de richesse en régime pauvre. En effet, dans une séquence d'allumage telle que celle simulée dans le chapitre 9 et la partie IV, on souhaite s'assurer de la diminution de la vitesse de flamme voire de l'extinction dans les zones pauvres. Les paramètres du schéma obtenus par EPORCK sont résumés dans le Tab. 4.5.

A	=	$6.454 \times 10^{13} \text{ C.G.S}$
β	=	0
n_{JP10}	=	1.154
n_{O_2}	=	0.738
$\mathcal{R} \times T_A$	=	$29189 \text{ cal.mol}^{-1}$

TAB. 4.5 - Paramètres du schéma simplifié obtenu avec EPORCK

Les caractéristiques de la flamme plane laminaire correspondant à ce schéma sont représentées sur la Fig. 4.7. Concernant la vitesse et l'épaisseur de flamme, le schéma simplifié reproduit les prédictions du schéma complexe à moins de 10% près pour des richesses comprises entre 0.6 et 1.2. Au-delà en régime riche, le schéma simplifié surprédit largement la vitesse de flamme comme attendu. Concernant la température adiabatique de flamme, on note une erreur de plus de 200K pour des richesses supérieures ou égales à l'unité. Truffin [257] a montré qu'un tel écart peut être efficacement réduit par l'emploi d'un schéma à 2 étapes faisant intervenir une espèce intermédiaire et une réaction réversible. Cependant, son étude montre aussi qu'il est nécessaire d'utiliser au moins 4 étapes pour améliorer la prédiction de la vitesse de flamme en régime riche. En se basant sur la dépendance $S_L \propto \sqrt{A}$, il est possible d'ajuster précisément un schéma mono ou bi-étapes en fonction de la richesse en écrivant la constante pré-exponentielle A comme une fonction analytique de la richesse. Cette méthode a été employée par Gicquel *et al.* [89] dans une étude LES d'extinction de foyer aéronautique et par Roux [212] dans une étude LES d'instabilités de combustion dans un foyer aéronautique non prémélangé. Vervisch *et al.* [262] proposent une méthode similaire où A est tabulée en fonction de ϕ et de la fraction molaire de dioxygène dans le mélange oxydant. Dans une autre approche, Fernandez-Tarrazo *et al.* [72] proposent de corriger le taux de dégagement de chaleur pour améliorer la prédiction de T_2 et de faire varier la température

d'activation T_A pour ajuster S_L . Enfin, il existe des méthodes de chimie tabulée où les Y_k , $\dot{\omega}_k$ et T sont calculées à partir de tables ou bibliothèques préétablies. Les entrées sont réduites à une ou deux variables qui sont en général la fraction de mélange pour les flammes de diffusion et la variable d'avancement pour les flammes prémélangées. Les méthodes de type ILDM [140] ou FPI [91, 77, 78] ont démontré leur efficacité en LES et en DNS [261]. Ces méthodes de tabulation semblent prometteuses en terme de coût de calcul et de domaines d'application [90]. Par souci de simplicité, aucune de ces méthodes n'a été retenue dans la présente étude. Elles devront toutefois être considérées pour les calculs futurs.

Le schéma mono-étape obtenu (cf. Tab. 4.5) est directement utilisable dans AVBP aussi bien pour des cas simples de flamme laminaire monodimensionnelle que pour des calculs LES. Si les prédictions sont réalistes en régime pauvre, il faudra être attentif aux erreurs commises si des richesses supérieures à 1.2 sont rencontrées.

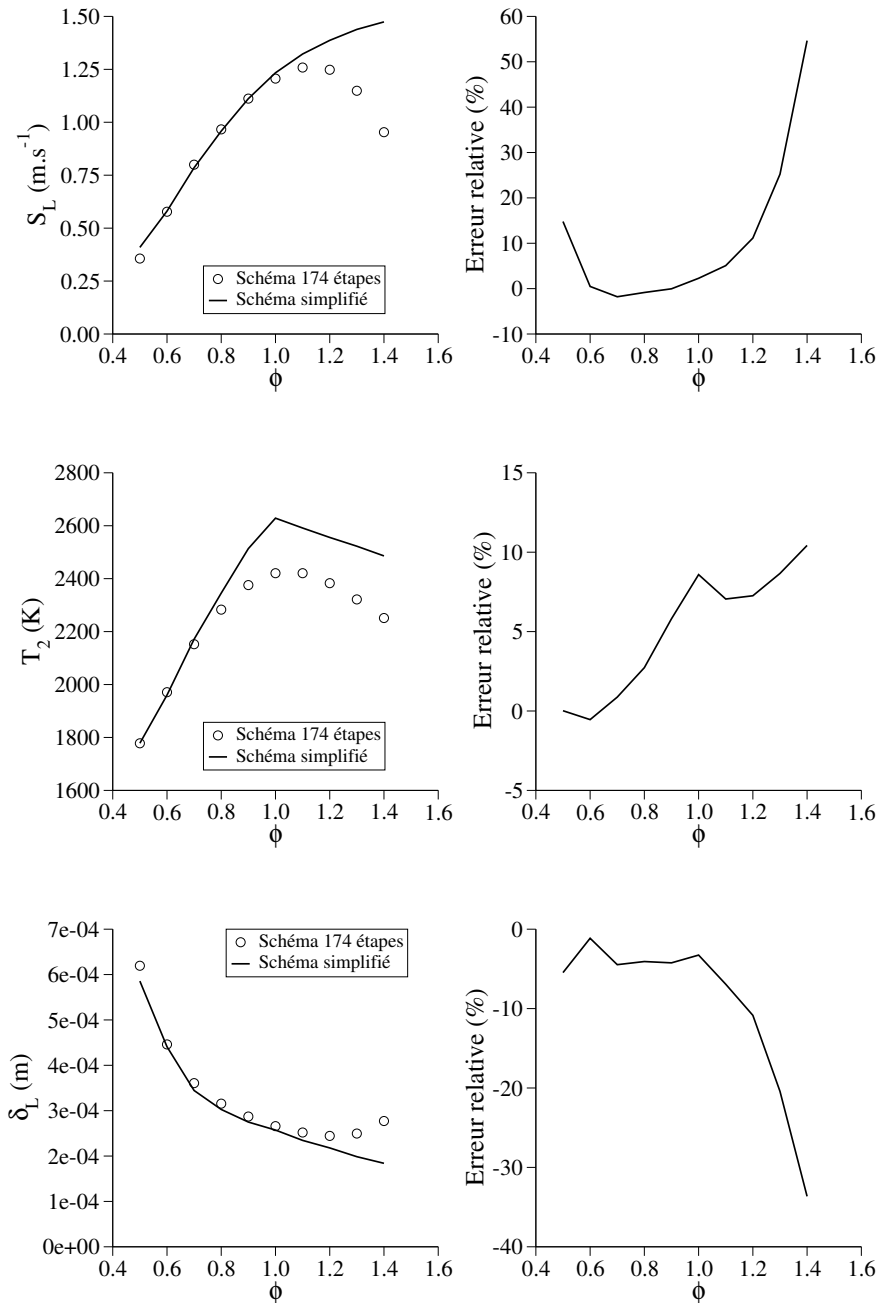


FIG. 4.7 - Comparaison entre les prédictions du schéma complexe et du schéma simplifié pour les grandeurs caractéristiques de la flamme : vitesse de flamme laminaire (S_L), température adiabatique (T_2) et épaisseur thermique (δ_L).

Chapitre 5

Approche numérique

5.1 Discrétisation *Cell-Vertex*

AVBP utilise un solveur aux volumes finis pour discrétiser les équations de conservation décrites dans le chapitre 4. Deux méthodes principales sont disponibles pour l'approche volumes finis :

1. la formulation *Cell-Centered* : les valeurs des solutions discrètes sont stockées au centre des volumes de contrôle (les cellules du maillage) et les valeurs des éléments voisins sont moyennées au travers des limites de la cellule pour calculer les flux ;
2. la formulation *Cell-Vertex* : les valeurs des solutions discrètes sont stockées aux nœuds de la cellule considérée et les valeurs moyennes des flux sont obtenues en moyennant le long des arêtes limitant la cellule.

Dans AVBP, la discrétisation *Cell-Vertex* a été choisie car elle permet de diminuer la quantité d'information stockée dans les maillages tétraédriques (type de maillage adapté aux géométries complexes des chambres de combustion) et de limiter la communication entre partitions pour les calculs parallèles (cf. section 5.5).

5.1.1 Approche des résidus pondérés

Considérons d'abord les équations de Navier-Stokes d'un écoulement laminaire monophasique non réactif dans leur formulation conservative :

$$\frac{\partial \mathbf{w}}{\partial t} + \nabla \cdot \mathbf{F} = \mathbf{0} \quad (5.1)$$

où \mathbf{w} est le vecteur des variables conservatives et \mathbf{F} est le tenseur des flux de \mathbf{w} . Ce tenseur est composé d'une partie non visqueuse (indice I) et d'une partie visqueuse (indice V) :

$$\mathbf{F} = \mathbf{F}^I(\mathbf{w}) + \mathbf{F}^V(\mathbf{w}, \vec{\nabla} \mathbf{w}) \quad (5.2)$$

Les termes spatiaux sont approchés dans chaque volume de contrôle pour en déduire le résidu \mathbf{R}_{Ω_j} défini par :

$$\mathbf{R}_{\Omega_j} = \frac{1}{V_{\Omega_j}} \int_{\partial\Omega_j} \mathbf{F} \cdot \vec{n} dS \quad (5.3)$$

où $\partial\Omega_j$ est la projetée de Ω_j le long de la normale \vec{n} . L'approche *Cell-Vertex* est applicable à des types de cellules quelconques et apparaît donc très utile pour des maillages hybrides. Le résidu \mathbf{R}_{Ω_j} défini par l'Eq. 5.2 est d'abord calculé pour chaque cellule en utilisant une loi d'intégration simple appliquée aux faces. Pour des faces triangulaires, les composantes individuelles du flux sont supposées varier linéairement. Pour des faces quadrilatères, où les nœuds peuvent ne pas être coplanaires, afin d'assurer l'exactitude de l'intégration pour des éléments quelconques, chaque face est divisée en triangles et intégrée sur chaque triangle. La valeur du flux est obtenue après moyennage des quatre triangles (deux divisions le long des deux diagonales). Cette propriété qui permet de conserver la linéarité joue un rôle important car elle assure une bonne précision même sur des maillages irréguliers. Si l'on écrit le résidu \mathbf{R}_{Ω_j} défini par l'Eq. 5.2 au travers d'une cellule quelconque, l'Eq. 5.2 devient :

$$\mathbf{R}_{\Omega_j} = \frac{1}{N_d V_{\Omega_j}} \sum_{i \in \Omega_j} \mathbf{F}_i \cdot \vec{dS}_i, \quad (5.4)$$

où \mathbf{F}_i est une approximation de \mathbf{F} aux nœuds, N_d représente le nombre de dimensions de l'espace et $\{i \in \Omega_j\}$ sont les sommets de la cellule. Dans cette formulation, l'information géométrique a été factorisée dans les termes \vec{dS}_i qui sont associés aux nœuds individuels de la cellule et non à ses faces. \vec{dS}_i est la moyenne des normales pondérées par les surfaces des faces triangulaires d'un nœud commun i , $i \in \Omega_j$. Pour assurer la consistance, $\sum_{i \in \Omega_j} \vec{dS}_i = \vec{0}$. La linéarité de l'opérateur de divergence est préservée si le volume V_{Ω_j} est défini par :

$$V_{\Omega_j} = \frac{1}{N_d^2} \sum_{i \in \Omega_j} \vec{x}_i \cdot \vec{dS}_i, \quad \text{avec} \quad \nabla \cdot \vec{x} = N_d \quad (5.5)$$

Une fois les résidus calculés, on définit le schéma semi-discret par :

$$\frac{d\mathbf{w}_k}{dt} = -\frac{1}{V_k} \sum_{j|k \in \Omega_j} D_{\Omega_j}^k V_{\Omega_j} R_{\Omega_j}, \quad (5.6)$$

où $D_{\Omega_j}^k$ est la matrice de distribution qui fait une projection pondérée du centre Ω_j vers le nœud k (*scatter*) et V_k est le volume de contrôle associé à chaque nœud k . La conservation est garantie si $\sum_{k \in \Omega_j} D_{\Omega_j}^k = I$. L'Eq. 5.6 est résolue en utilisant une méthode explicite Euler ou une méthode Runge-Kutta à plusieurs étapes en temps.

La matrice de distribution est définie par :

$$D_{\Omega_j}^k = \frac{1}{n_n} \left(I + C \frac{\delta t_{\Omega_j}}{V_{\Omega_j}} \vec{\mathcal{A}}_{\Omega_j} \cdot \vec{dS}_k \right), \quad (5.7)$$

Le nombre de nœuds de Ω_j est n_n et $\vec{\mathcal{A}}$ est la matrice jacobienne du tenseur des flux. Le schéma classique centré, obtenu en choisissant $C = 0$, est stable combiné avec des pas de temps Runge-Kutta. Un schéma de type Lax-Wendroff est obtenu en choisissant la constante C dépendante du nombre de dimensions du problème et du type de cellule. Une forme simple de C est définie par : $C = n_n^2 / 2N_d$.

5.1.2 Calcul du pas de temps

Lorsqu'on fait l'intégration temporelle explicite de l'Eq. 5.6, le pas de temps est déterminé par le minimum, sur l'ensemble du domaine de calcul, du pas de temps acoustico-convectif Δt_{min} donné par la condition de Courant-Friedrichs-Levy (*CFL*) :

$$\Delta t_{min} = CFL \frac{\Delta x}{\|\vec{u}\| + c} \quad (5.8)$$

où Δx est la taille de la cellule, $\|\vec{u}\|$ est la norme de la vitesse, c est la vitesse locale du son et le nombre de *CFL* est fixé égal à 0.7. Dans la pratique, la contrainte imposée par l'Eq. 5.8 est essentielle puisqu'elle détermine le nombre d'itérations donc le temps de calcul nécessaire pour simuler un temps physique.

5.1.3 Calcul des gradients

Afin de déterminer les valeurs des gradients $\vec{\nabla} \mathbf{w}$ aux nœuds, on calcule d'abord sa valeur à la cellule Ω_j puis on la distribue aux nœuds k . Le gradient à la cellule, défini par l'Eq. 5.9, suit une description identique à celle utilisé pour définir la divergence (Eq. 5.4). Une approximation de ce gradient à la cellule est ainsi obtenue et définie par l'Eq. 5.10. On obtient enfin une approximation de ce gradient au nœud (Eq. 5.11) en utilisant une moyenne pondérée par le volume de la cellule.

$$\left(\frac{\partial \mathbf{w}}{\partial x} \right)_C \approx \frac{1}{V_C} \iint_{\partial \Omega_C} \mathbf{w} \cdot \vec{n} \partial S \quad (5.9)$$

$$\left(\vec{\nabla} \mathbf{w} \right)_{\Omega_j} = \frac{1}{V_{\Omega_j}} \sum_{i \in \Omega_j} \overline{\mathbf{w}}_i \overline{dS}_i \quad (5.10)$$

$$\left(\vec{\nabla} \mathbf{w} \right)_k = \frac{1}{V_k} \sum_{j|k \in \Omega_j} V_{\Omega_j} \left(\vec{\nabla} \mathbf{w} \right)_{\Omega_j} \quad (5.11)$$

5.2 Schémas numériques

Seules les caractéristiques principales des schémas numériques utilisée dans cette étude sont présentées ici. On trouvera une description détaillée de ces schémas dans les références fournies.

schéma centré [104] de type volumes finis, d'ordre 3 en temps avec une intégration Runge-Kutta trois étapes, centré d'ordre 2 en espace, moins précis que le schéma TTGC et a peu près aussi rapide ;

schéma Lax-Wendroff [130] de type volumes finis, d'ordre 2 en temps avec une intégration Runge-Kutta une étape, centré d'ordre 2 en espace, moins précis que le schéma TTGC mais environ deux fois plus rapide ;

schéma TTGC [55] de type éléments finis, d'ordre 3 en temps, d'ordre 3 en espace, très précis sur des maillages non structurés, approprié à l'étude LES en géométrie complexe.

5.3 Modèles de viscosité artificielle

5.3.1 Introduction

Les schémas de discrétisation spatiale disponibles dans AVBP sont des schémas centrés (cf. section 5.2). Ce type de schémas est connu pour être naturellement sujet à des oscillations hautes fréquences (*wiggles*) générées dans les régions de forts gradients. On peut limiter efficacement ce problème en introduisant un terme de *viscosité artificielle*¹ (VA) pour adoucir les fronts trop raides qui génèrent ces oscillations. Cette section décrit les senseurs (section 5.3.2) et les opérateurs (section 5.3.3) de la VA.

5.3.2 Senseurs

Un senseur ζ_{Ω_j} est un paramètre compris entre 0 et 1 défini pour chaque cellule Ω_j . Dans le cas où la solution est bien résolue, le senseur est égal à 0 alors que dans le cas où la solution comporte de fortes variations spatiales, le senseur vaut 1 et la VA est appliquée. Ce senseur est obtenu en comparant différentes évaluations du gradient d'un scalaire comme la pression, l'énergie totale ou la fraction massique. Si les évaluations sont identiques, le senseur est fixé à 0. En revanche, si les deux évaluations donnent des valeurs différentes, le senseur se déclenche. Le choix du scalaire dépend de la difficulté numérique du problème. Pour la phase gazeuse, on choisit généralement la pression, l'énergie totale voire les fractions massiques. Pour la phase liquide, la relation pression/vitesse n'existe pas ce qui peut conduire à une forte décorrélation entre les gradients de densité de gouttes et les gradients de vitesse mésoscopique. Ainsi, le senseur pour la phase liquide se base sur ces deux variables. Dans tous les cas, il est crucial de trouver une fonction pour le senseur qui soit différente de zéro seulement dans les zones utiles. Deux senseurs différents sont disponibles dans AVBP : le senseur de Jameson $\zeta_{\Omega_j}^J$ [107] et le senseur de Colin $\zeta_{\Omega_j}^C$ [55], dérivé du senseur de Jameson. Dans la suite de cette section, l'indice k désigne les variables liées à un sommet k de la cellule considérée et l'indice Ω_j désigne les variables liées à la cellule Ω_j .

Senseur de Jameson

Le senseur de Jameson $\zeta_{\Omega_j}^J$ lié à la cellule Ω_j (défini par l'Eq. 5.12) est le maximum de tous les senseurs ζ_k^J liés aux sommets k (définis par l'Eq. 5.13). S est le scalaire évalué par le senseur et (Δ_1^k, Δ_2^k) sont des évaluations différentes du gradient définies par l'Eq. 5.14. Δ_1^k mesure la variation de S au sein de la cellule Ω_j . Δ_2^k est une estimation de la même grandeur en utilisant $(\vec{\nabla}S)_k$, le gradient de S au nœud k . Ce senseur varie proportionnellement à l'amplitude de la déviation par rapport à l'évolution linéaire. Ce senseur a une évolution *douce* d'un point de vue numérique particulièrement adaptée aux cas quasi-stationnaires. Lorsqu'il s'applique aux variables gazeuses (pression, énergie ou fraction massique),

¹Bien que le terme de viscosité artificielle soit couramment employé, il serait plus correct de parler de diffusion artificielle dans la mesure où on ne l'applique pas seulement à l'équation de quantité de mouvement.

le senseur de Jameson se présente sous la forme suivante :

$$\zeta_{\Omega_j}^J = \max_{k \in \Omega_j} \zeta_k^J \quad (5.12)$$

$$\zeta_k^J = \frac{|\Delta_1^k - \Delta_2^k|}{|\Delta_1^k| + |\Delta_2^k| + |S_k|} \quad (5.13)$$

$$\Delta_1^k = S_{\Omega_j} - S_k \quad \Delta_2^k = (\vec{\nabla} S)_k \cdot (\vec{x}_{\Omega_j} - \vec{x}_k) \quad (5.14)$$

Lorsqu'on cherche à appliquer ce senseur aux variables liquides (cf. ci-dessus), le conditionnement par $|S_k|$ pose problème car la phase dispersée est sujette à de fortes variations locales de densité de goutte et de vitesse. Afin d'éviter la saturation du senseur dans les zones qui présentent naturellement de forts gradients, le senseur de Jameson pour la phase liquide ζ_{l,Ω_j}^J est défini de la façon suivante :

$$\zeta_{l,\Omega_j}^J = \max \left(\zeta_{\vec{u}_l,\Omega_j}^J, \zeta_{\check{n}_l,\Omega_j}^J \right) \quad (5.15)$$

$$\zeta_{\vec{u}_l,k}^J = \max_{k \in \Omega_j} \left(\frac{|\Delta_1^k - \Delta_2^k|}{|\Delta_1^k| + |\Delta_2^k| + c_j} \right) \quad (5.16)$$

$$\zeta_{\check{n}_l,k}^J = \max_{k \in \Omega_j} \left(\left(\frac{|\Delta_1^k - \Delta_2^k|}{|\Delta_1^k| + |\Delta_2^k| + \check{n}_l} \right)^2 \right) \quad (5.17)$$

$$(5.18)$$

où c_j est une mesure locale de la vitesse du son estimée par : $c_j = V_{\Omega_j}^{1/3} / \Delta t$. Pour la densité de gouttes, la difficulté de définir une valeur de référence est résolue simplement en prenant le carré de la fonction conditionnée par \check{n}_l .

Senseur de Colin

Dans le cas d'écoulements turbulents fortement instationnaires, il est nécessaire de se munir d'un senseur plus précis, c'est-à-dire plus faible lorsque l'écoulement est suffisamment résolu et maximum dans les zones de fortes non-linéarités. Le senseur de Colin a été conçu dans ce but (cf. Eq. 5.19 à 5.23) :

- $\zeta_{\Omega_j}^C$ est très petit lorsque Δ_1^k et Δ_2^k sont petits comparés à S_{Ω_j} . Ceci correspond à des erreurs numériques de faible amplitude (si Δ_1^k et Δ_2^k sont de signes opposés) ou à de faibles gradients bien résolus par le schéma (si Δ_1^k et Δ_2^k sont de même signe).
- $\zeta_{\Omega_j}^C$ est petit lorsque Δ_1^k et Δ_2^k sont de même signe et du même ordre de grandeur (même si cet ordre de grandeur est grand). Ceci correspond à des gradients raides bien résolus par le schéma.
- $\zeta_{\Omega_j}^C$ est grand lorsque Δ_1^k et Δ_2^k sont de signes opposés et qu'un des deux est beaucoup plus grand que l'autre. Ceci correspond à une oscillation numérique de grande amplitude.
- $\zeta_{\Omega_j}^C$ est grand si Δ_1^k ou Δ_2^k est du même ordre de grandeur que S_{Ω_j} . Ceci correspond à une situation non physique résultant d'un problème numérique.

On note que les définitions de Ψ et ϵ^k changent pour l'équation de conservation des fractions massiques : la valeur de référence n'est plus S_k mais 1, valeur maximum possible de la fraction massique.

$$\zeta_{\Omega_j}^C = \frac{1}{2} \left(1 + \tanh \left(\frac{\Psi - \Psi_0}{\delta} \right) \right) - \frac{1}{2} \left(1 + \tanh \left(\frac{-\Psi_0}{\delta} \right) \right) \quad (5.19)$$

$$\text{avec : } \Psi = \max_{k \in \Omega_j} \left(0, \frac{\Delta^k}{|\Delta^k| + \epsilon_1 S_k} \zeta_k^J \right) \quad (5.20)$$

$$\Delta^k = |\Delta_1^k - \Delta_2^k| - \epsilon^k \max \left(|\Delta_1^k|, |\Delta_2^k| \right) \quad (5.21)$$

$$\epsilon^k = \epsilon_2 \left(1 - \epsilon_3 \frac{\max \left(|\Delta_1^k|, |\Delta_2^k| \right)}{|\Delta_1^k| + |\Delta_2^k| + S_k} \right) \quad (5.22)$$

$$\Psi_0 = 2.10^{-2} \quad \delta = 1.10^{-2} \quad \epsilon_1 = 1.10^{-2} \quad \epsilon_2 = 0.95 \quad \epsilon_3 = 0.5 \quad (5.23)$$

5.3.3 Opérateurs

Les modèles de viscosité artificielle utilisent deux opérateurs qui ont les propriétés suivantes :

2^{ème} ordre. Cet opérateur agit comme une viscosité classique. Associé à un senseur (cf. section 5.3.2), il adoucit les gradients et introduit de la dissipation artificielle. Ainsi, le schéma numérique garde son ordre de précision dans les zones à faible gradient et sa stabilité et sa robustesse sont assurées dans les zones critiques. À l'origine utilisé pour les chocs, il peut agir sur n'importe quel gradient trop fort.

4^{ème} ordre. Cet opérateur est utilisé pour diminuer les oscillations haute fréquence.

Les contributions à la cellule de l'opérateur du 2^{ème} ordre (Eq. 5.25) et de l'opérateur du 4^{ème} ordre (Eq. 5.26) sont reportées sur les nœuds de cette cellule Ω_j (Eq. 5.24).

$$dw_k = \sum_j R_{k \in \Omega_j}^2 + \sum_j R_{k \in \Omega_j}^4 \quad (5.24)$$

$$\text{avec : } R_{k \in \Omega_j}^2 = -\frac{1}{N_v} \frac{V_{\Omega_j}}{\Delta t_{\Omega_j}} \text{smu2} \zeta_{\Omega_j} (w_{\Omega_j} - w_k) \quad (5.25)$$

$$\text{avec : } R_{k \in \Omega_j}^4 = \frac{1}{N_v} \frac{V_{\Omega_j}}{\Delta t_{\Omega_j}} \text{smu4} \left[(\vec{\nabla} w)_{\Omega_j} \cdot (\vec{x}_{\Omega_j} - \vec{x}_k) - (w_{\Omega_j} - w_k) \right] \quad (5.26)$$

où smu2 et smu4 sont des coefficients sans dimension fixés par l'utilisateur.

5.4 Maillages

Dans les calculs de mécanique des fluides avec les méthodes RANS, on cherche à obtenir des résultats indépendants du maillage. Dans la mesure où la LES utilise le maillage comme filtre spatial, on peut dire que cette méthode n'est pas indépendante du maillage. Raffiner apporte ainsi de la précision aux résultats par la résolution d'échelles de plus en plus petites. L'organisation même du code dépend fortement de la stratégie adoptée concernant le maillage :

- soit utiliser des maillages structurés ;
- soit utiliser des maillages non-structurés (hybrides ou non).

Le Tab. 5.1 décrit les avantages respectifs des deux stratégies.

Maillages structurés	Maillages non-structurés
<ul style="list-style-type: none"> • Efficacité de l'algorithme de calcul sur les hexahédres (travail séquentiel). • Volume plus grand de la maille hexahédrique qu'une maille tétraédrique à iso-résolution, permettant des pas de temps plus grands (en explicité). • Précision réelle plus grande du schéma numérique (ordre effectif [55]). 	<ul style="list-style-type: none"> • Rapidité / facilité de la génération du maillage sur des géométries complexes. • Possibilité de raffiner à loisir dans les zones d'intérêt (zone de flamme, zone de mélange, panache d'un jet transverse...). • Pas de direction préférentielle pouvant perturber l'écoulement.

TAB. 5.1 - Avantages respectifs des maillages structurés et non-structurés

La Fig. 5.1 illustre la stratégie de raffinement adoptée dans le calcul LES. Le maillage a été obtenu grâce au logiciel CentaurSoft qui permet de positionner des sources volumiques de raffinement à l'intérieur du domaine (module *setupgrid*) avant de générer automatiquement le maillage tétraédrique (module *makegrid*). La qualité géométrique des cellules obtenues peut ensuite être contrôlée et améliorée grâce au module *improvegrid*.

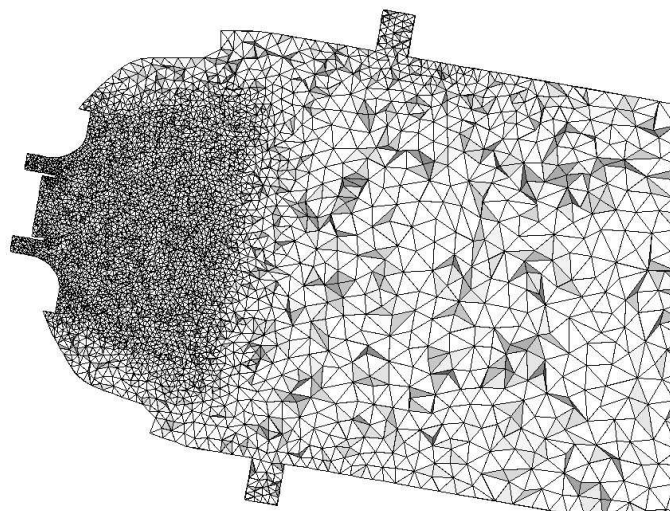


FIG. 5.1 - Coupe du maillage VESTA illustrant le raffinement dans la zone d'injection/combustion

Le but est de minimiser le nombre de cellules tout en conservant une bonne représentation de l'écoulement dans les zones de fort gradients jouant un rôle dans la dynamique de la flamme :

- la zone de jet swirlé générée par l'injecteur double-vrille est fortement raffinée afin capturer correctement l'éclatement du jet et la zone de recirculation ;

- loin de ce jet principal, les zones de proches des parois ne sont pas particulièrement raffinées car on considère qu'elles n'ont pas une influence de premier ordre sur la zone de combustion ;
- les jets transverses (haut et bas) reçoivent un raffinement modéré qui permet une représentation convenable de l'injection.

La qualité de ce maillage vis-à-vis du calcul LES réactif est discutée dans le chapitre 8.

5.5 Parallélisme et performance

5.5.1 Intérêt du calcul parallèle en LES

Les calculs courants de chambres de combustion en LES [86, 213, 229, 231, 232] requièrent des maillages relativement importants : entre 10^5 et 10^6 nœuds en fonction du domaine de calcul. De plus, en formulation explicite (comme dans AVBP), le pas de temps imposé par l'acoustique est généralement petit (de l'ordre de 10^{-7} s) ce qui implique un grand nombre d'itérations pour atteindre un régime stationnaire ou simuler un phénomène instationnaire lent. Ainsi, les 50 millisecondes de la séquence d'allumage présentée dans le chapitre 9 nécessitent environ 500 000 itérations. Avec une efficacité de $109 \mu\text{s.ite}^{-1}.\text{nœud}^{-1}$, ce calcul sur 180 000 nœuds prendrait 9 mois sur un processeur unique. Grâce au parallélisme, son temps d'exécution sur 32 processeurs est réduit à 9 jours. Le calcul massivement parallèle rend simulables certaines configurations très coûteuses comme la séquence d'allumage d'une chambre complète présentée dans la partie IV. Ce calcul représente 110 000 h sur 700 processeurs ce qui le place hors de portée des codes non parallèles avec les moyens informatiques actuels.

Dans la section 5.5.2, on montre que la parallélisation est efficace si l'on conserve un ratio nombre de cellules/nombre de processeurs élevé. Ainsi, le potentiel du calcul parallèle est d'autant plus grand que le maillage est gros. L'intérêt d'augmenter la taille des maillage est double :

Augmenter la résolution spatiale afin d'améliorer la prédiction des phénomènes aux petites échelles : effets de paroi, flammes, micro-mélange, etc. Plus la taille des mailles sera faible, plus l'échelle de coupure du filtre LES sera petite, plus on augmentera la partie résolue par le calcul par rapport à la partie modélisée (cf. section 4.3). La Fig. 5.2 représente une configuration moteur à piston dans laquelle l'aérodynamique interne de la chambre de combustion est entièrement pilotée par les jets issus des soupapes d'admission [255, 256]. La qualité de la prédiction du décollement de ces jets en conditionnée par le raffinement de l'écoulement près des parois. Grâce à l'utilisation de 1024 processeurs parallèles sur le supercalculateur IBM BlueGene/L, le calcul d'un temps convectif sur le maillage raffiné (Fig. 5.2b) est réduit à 7 h de temps d'exécution.

Repousser les frontières du domaine de calcul. D'une part, cela permet de déplacer les conditions aux limites aux endroits où elles sont mieux définies au niveau hydrodynamique ou acoustique. Par exemple, dans un calcul de chambre de combustion aéronautique, le calcul du contournement permet d'obtenir des conditions d'écoulements « résolues » (et non imposées) au niveau de l'injecteur principal et des nombreux trous et films d'injection qui fournissent l'air primaire et l'air de dilution. Cela implique toutefois une maîtrise parfaite de la géométrie afin d'obtenir la bonne répartition des débits d'air entrant dans la chambre. D'autre part, on peut s'affranchir de l'approximation forte qui consiste à réduire le domaine de calcul à un seul secteur périodique dans une chambre annulaire qui

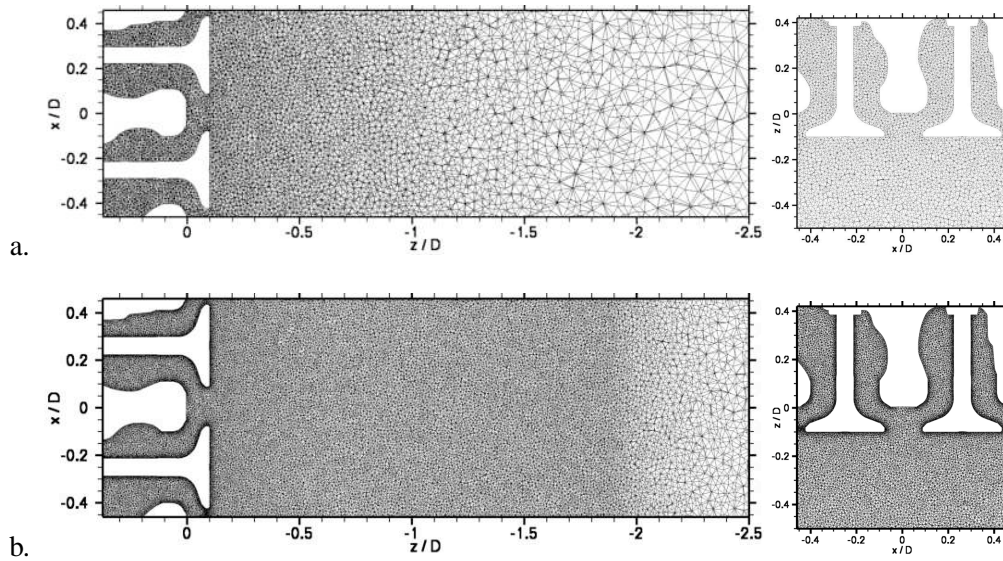


FIG. 5.2 - Illustration du raffinement de maillage permis par le calcul parallèle : calcul d'admission dans un moteur à piston [255, 256]. La taille des plus petites cellules est divisée par 7 entre le maillage grossier à 2 millions de cellules (a.) et le maillage raffiné à 10 millions de cellules (b.).

en comporte une vingtaine. Staffelbach [250] a montré que les variations azimutales dues à l'interaction entre l'acoustique et la flamme produite par chaque injecteur ne peuvent être correctement reproduites que si l'on tend vers le calcul complet sur 360° de la chambre annulaire. La partie IV fournit un autre exemple de l'intérêt du calcul d'une chambre complète : simuler une séquence d'allumage pour comprendre les mécanismes qui permettent la propagation de la combustion d'un secteur à l'autre de la chambre.

5.5.2 Parallélisme dans AVBP

Sur les machines à mémoire partagée, l'efficacité du calcul parallèle est directement liée au rapport entre le temps que passe chaque processeur à calculer de manière autonome et le temps dédié aux communications entre processeurs. Dans le cas de la LES, la parallélisation de tâches n'est pas efficace et seule une méthode de décomposition du domaine de calcul en partitions est réaliste (cf. Fig. 5.3).

Sur le plan numérique, les choix méthodologiques qui ont conduit à la conception d'AVBP ont été orientés vers une forte aptitude au calcul parallèle :

- une méthode *Cell-Vertex* pour limiter le passage d'information entre blocs de maillage (cf. section 5.1) ;
- une méthode d'intégration temporelle explicite qui n'impose pas de limite théorique au nombre maximum de processeurs parallèles ;
- l'utilisation de la bibliothèque MPI pour gérer efficacement la communication entre partitions par échange de messages (*message passing*). Par rapport à la bibliothèque concurrente OpenMP, MPI

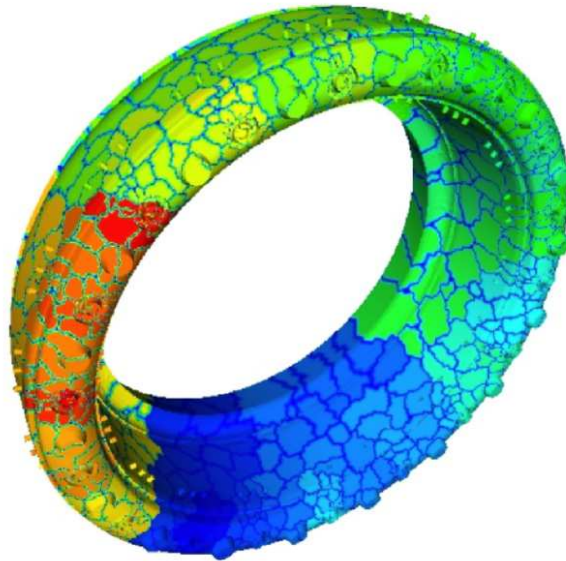


FIG. 5.3 - Vue du découpage du domaine de calcul de la chambre Vesta en 2047 partitions (cf. partie IV)

- est plus répandu et possède une plus grande efficacité.
- dans le cas présent, on peut ajouter le choix de l’approche eulérienne pour le calcul de la phase dispersée (cf. section 3.1.2) où l’utilisation d’algorithmes identiques pour les deux phases simplifie largement la parallélisation.

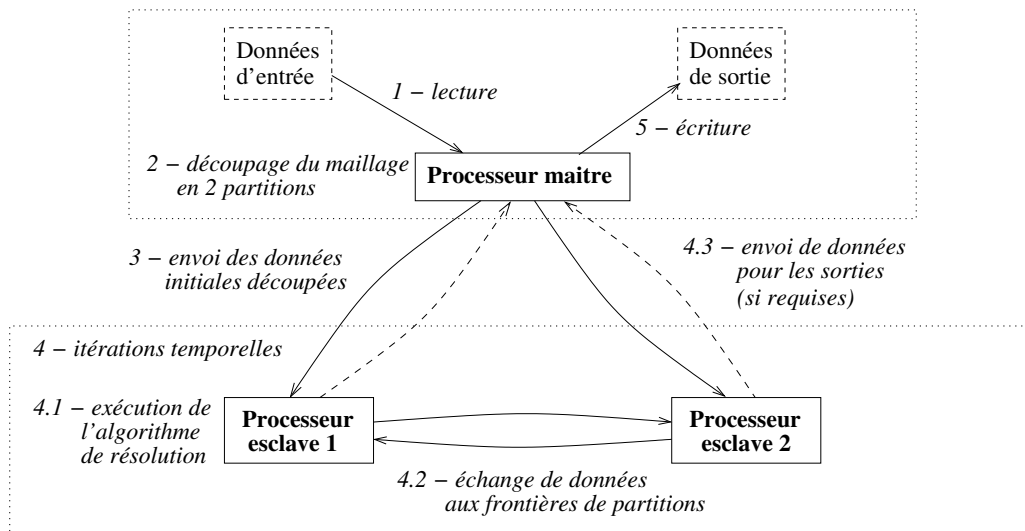


FIG. 5.4 - Exemple du déroulement d’un calcul AVBP parallèle sur 3 processeurs (un processeur peut jouer à la fois le rôle de maître et d’esclave ce qui réduit le calcul à 2 processeurs)

La procédure courante pour exécuter un calcul parallèle avec AVBP est illustrée sur la Fig. 5.4. Dans la plupart des cas, celle-ci est transparente pour l'utilisateur. Le découpage est effectué dans la phase initiale du calcul puis le processeur *maître* joue le rôle d'*esclave* en prenant en charge une partition de calcul. Toutefois, pour les plus gros calculs tels que celui présenté dans la partie IV, la mémoire d'un processeur sur une machine à mémoire distribuée² peut être insuffisante pour assurer le découpage. Ce dernier est alors réalisé en pré-traitement sur une machine dotée d'une grande capacité de mémoire (12 Go ont été nécessaires dans le cas présent). Le calcul est ensuite initialisé avec le maillage et la solution pré-découpés. Dans ce cas, le processeur *maître* gère uniquement les communications et ne participe pas au calcul en tant qu'*esclave* (peu pénalisant sur des calculs à plusieurs centaines de processeurs).

Grâce à cette gestion rigoureuse du parallélisme, AVBP atteint d'excellentes performances dans les calculs massivement parallèles sur différentes plateformes. La Fig. 5.5 montre la courbe d'accélération ou *speed-up* en fonction du nombre de processeurs utilisés pour un calcul effectué sur l'IBM BlueGene/L de Rochester (US) par Staffelbach [250, 251]. Le plus gros maillage (40 millions de cellules) présente un *speed-up* quasi-linéaire jusqu'à plus de 5000 processeurs [6]. Cette courbe montre également que cette loi linéaire n'est valable que si l'on conserve un nombre de nœuds par processeur suffisamment élevé (de 2000 à 5000 suivant la performance du réseau inter-processeurs). En effet, ce nombre est directement lié au rapport entre le nombre de nœuds total dans la partition et le nombre de nœuds aux frontières donc à la charge dédiée au calcul sur la charge dédiée aux communications. Cette contrainte impose une limite au *speed-up* qu'on peut espérer atteindre sur une configuration donnée pour une machine donnée. La performance d'une machine massivement parallèle est donc optimale s'il y a cohérence entre la puissance de son réseau et celle de ses processeurs.

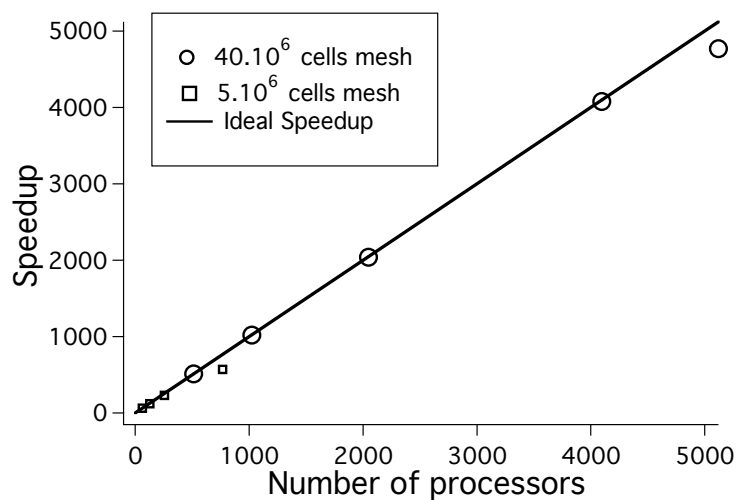


FIG. 5.5 - Speed-up du code AVBP sur deux maillages à respectivement 5 et 40 millions de cellules [250, 251]

²Le supercalculateur BlueGene/L, par exemple, ne dispose que de 512 Mo par processeur.

5.6 Conditions aux limites

Les conditions limites sont un point crucial dans tout code de mécanique des fluides. Elle deviennent critiques en LES, spécialement dans des codes résolvant l'acoustique [195, 226].

Par simplicité, on prend l'exemple d'une intégration temporelle à une seule étape. Connaissant le vecteur solution U^n au temps t , la solution U^{n+1} au temps $t + \Delta t$ s'écrit de façon générale :

$$U^{n+1} = U^n - \mathcal{R}\Delta t \quad (5.27)$$

L'exposant n est utilisé pour rappeler que le code explicite n'utilise que des données à l'itération n . En chaque nœud du bord du domaine, le résidu \mathcal{R} calculé par le schéma est corrigé par les conditions aux limites. Pour que le problème soit mathématiquement bien posé, le nombre nécessaire et suffisant de variables à corriger est fonction du type de conditions aux limites (traitement d'entrée ou de sortie, cf. [197] - Chap.9). Le problème de conditions aux limites peut être abordé suivant deux approches différentes :

Méthode non caractéristique : on modifie le résidu en imposant directement les variables conservatives cibles.

Méthode caractéristique : on modifie le résidu via une décomposition en ondes [252]. C'est le principe de la méthode NSCBC (pour *Navier-Stokes characteristic boundary condition*) développée par Poinot et Lele [196] et étendue aux écoulements multi-espèces par Moureau et Lartigue [175].

La méthode NSCBC n'est pas développée dans ce manuscrit. On trouvera une description détaillée de l'approche théorique et de l'implantation numérique dans le manuel d'AVBP [12].

5.6.1 Conditions aux limites de la phase gazeuse

La formulation compressible des équations de Navier-Stokes présentées dans le chapitre 2.1 possède la propriété de propager des ondes acoustiques. Ces ondes sont générées par l'agitation turbulente dans les zones de fort cisaillement ainsi que par les fluctuations de dégagement de chaleur dans la flamme. La production d'énergie acoustique dans ces régions de l'écoulement doit être compensée par des pertes afin d'éviter le phénomène de résonance. Dans les codes LES où les schémas numériques sont peu dissipatifs, ces pertes sont essentiellement dues aux flux acoustiques au niveau des conditions aux limites. Or, les conditions de type non caractéristiques sont connues pour :

- générer une réflexion totale des ondes acoustiques sortantes ;
- générer un bruit acoustique et numérique en perturbant les équations de Navier-Stokes via la correction « en dur » du résidu.

L'approche caractéristique est donc indispensable pour que l'acoustique au sein de l'écoulement gazeux soit contrôlée de façon précise.

Au niveau des parois, la résolution spatiale du maillage LES n'est généralement pas suffisante pour prédire le frottement imposé par la condition d'adhérence. Schmitt [224, 225] a montré que le frottement

à la paroi peut être modélisé par une loi de paroi adaptée à la formulation LES. Par ailleurs, la particularité des chambres de combustion aéronautiques est d'utiliser des parois multiperforées dont le but est de limiter la température atteinte par le matériau qui les constitue (cf. section 1.1.3). Les milliers de jets transverses créés par ce type de surface génèrent un flux de masse, de quantité de mouvement et de chaleur qui perturbent l'écoulement et ont un effet sur l'acoustique. Mendez [154] et Mendez *et al.* [155, 156, 157, 158] ont effectué une étude LES de l'écoulement traversant une paroi multiperforée infinie. Ils proposent une loi de paroi multiperforée [154, 155] afin de prendre en compte cet effet dans un calcul LES d'une chambre de combustion industrielle.

Les lois de paroi classiques et les lois de parois multiperforées n'étant pas implantées dans le code au moment de l'étude, les calculs LES présentés ici n'utilisent pas ces modèles. La paroi est représentée par une simple condition d'adhérence et d'adiabaticité. Cependant, l'utilisation de ce type de modèles est préconisée dans les calculs actuels de foyers aéronautiques effectués avec AVBP.

5.6.2 Conditions aux limites de la phase liquide

Contrairement à la phase gazeuse, on n'observe pas de comportement propagatif de type acoustique au sein d'un spray. Sur le plan numérique, de simples conditions aux limites de type Dirichlet sont donc suffisantes pour imposer les flux des différentes variables transportées (cf. Eq. 3.36 à 3.40). Cependant, la représentation correcte de l'injection est loin d'être évidente dans la mesure où les hypothèses de l'approche eulérienne (cf. section 3.2.5) supposent un spray totalement atomisé et fortement dilué. Les conditions aux limites d'injection doivent donc générer un spray équivalent à celui produit lors l'atomisation primaire et secondaire telles qu'elles ont lieu par exemple dans un injecteur de type *airblast* (cf. section 1.1.3). Des études sont en cours [147] afin d'améliorer la modélisation des conditions d'injection dans AVBP. Les hypothèses sur les caractéristiques du spray et le choix des paramètres de conditions aux limites dans le calcul LES sont détaillées dans le chapitre 8.

Vis-à-vis de la phase liquide, les parois sont représentées par une condition de glissement. Elles ne nécessitent pas d'effort particulier de modélisation dans la mesure où l'on observe pas d'interaction spray/paroi lors du fonctionnement normal d'une chambre de combustion. Ceci n'est plus vrai pour les moteurs à injection directe essence où le spray peut interagir fortement avec les parois du cylindre et du piston (rebond et mouillage).

Enfin, concernant les conditions de sortie, aucun traitement particulier n'est nécessaire puisque, contrairement à un écoulement gazeux vis-à-vis de l'acoustique, le spray ne propage pas d'information de l'aval vers l'amont.

Deuxième partie

**Interaction
turbulence-évaporation-flamme**

Table des Matières

6	Évaporation de gouttes dans une turbulence homogène isotrope	131
6.1	Introduction	131
6.1.1	Intérêt de l'étude	131
6.1.2	Rappel de notions de turbulence	132
6.1.3	Turbulence homogène isotrope	133
	Statistique en deux points	133
	Décroissance temporelle de l'énergie cinétique turbulente	134
	Contraintes numériques	135
	Définition des grandeurs turbulentes diphasiques	135
6.2	Description du cas test	136
6.2.1	Paramètres physiques et condition initiale	136
6.3	Dynamique de la phase gazeuse	140
6.3.1	Évolution temporelle des grandeurs turbulentes gazeuses	140
6.3.2	Bilan d'énergie cinétique turbulente	140
6.4	Bilans de masse et d'énergie	142
6.5	Comparaison avec l'approche lagrangienne	144
6.6	Analyse des mécanismes de production et de destruction de la variance de vapeur	147
6.6.1	Rôle de la concentration préférentielle des gouttes	147
6.6.2	Bilan de variance de vapeur	149
6.6.3	Bilan de covariance de densité de gouttes-fraction de vapeur	153
6.7	Taux d'évaporation filtré en LES	154
6.8	Conclusion	155
7	Flammes laminares diphasiques	157
7.1	Introduction	157
7.1.1	Intérêt de l'étude	157
7.1.2	Classification des flammes laminares diphasiques	157
7.1.3	Précédents travaux	159
	Études expérimentales	159
	Études analytiques	160
	Études numériques	161

TABLE DES MATIÈRES

7.1.4	Equations de conservation	162
7.2	Flamme diphasique homogène	163
7.2.1	Configuration	163
7.2.2	Définition des richesses pour un mélange diphasique	163
7.2.3	Solution analytique	165
	P1 : zone d'évaporation ($x_0 \leq x < x_{ev}$)	166
	P2 : flamme de prémélange ($x_{ev} \leq x \leq x_2$)	168
7.2.4	Paramètres de calcul	169
7.2.5	Résultats	170
7.2.6	Conclusion	173
7.3	Flamme diphasique saturée	174
7.3.1	Mélange diphasique saturé	174
7.3.2	Vitesse de consommation d'une flamme saturée	176
7.3.3	Paramètres du calcul	177
7.3.4	Bilans de masse et d'énergie sur la flamme SD25	178
7.3.5	Structure de la flamme SD25	181
7.3.6	Étude paramétrique	188
7.3.7	Influence du diamètre	191
7.3.8	Analyse du modèle de flamme épaissie TP-TF	194
7.3.9	Conclusion	198

Chapitre 6

Évaporation de gouttes dans une turbulence homogène isotrope

6.1 Introduction

6.1.1 Intérêt de l'étude

Dans le cadre de la modélisation de la combustion non-prémélangée, la prédiction du mélange entre oxydant et carburant est une étape cruciale (cf. section 4.6.1). Or, le problème du mélange diphasique entre un spray de carburant et l'air est différent du mélange monophasique de la vapeur de ce carburant avec l'air. En effet, dans un écoulement purement gazeux, l'agitation turbulente a pour effet d'accroître le mélange en augmentant la surface effective de transfert par diffusion moléculaire. Dans un écoulement diphasique, le rôle de la turbulence est moins direct. Les effets inertiels et de traînée entraînent des phénomènes de ségrégation où les gouttes se retrouvent concentrées dans certaines régions de l'écoulement. Par évaporation, ces hétérogénéités de concentration représentent une source de production de variance de vapeur aux échelles correspondant à des nombres de Stokes proches de l'unité. Dans ce cas, contrairement au mélange d'espèces purement gazeuses, la fraction de vapeur ne peut pas être considérée comme un scalaire passif.

La dispersion turbulente d'un nuage de gouttes en évaporation a déjà fait l'objet de plusieurs travaux numériques en configuration académique. On trouve une revue détaillée de ces études en approche Euler-Lagrange et Euler-Euler dans l'article de Mashayek et Pandya [149]. Les simulations numériques directes lagrangiennes sont utilisées pour étudier la physique [148, 166, 201] et bâtir des modèles de fermeture pour les simulations RANS [204] ou LES [179, 204, 185]. Elles servent également à valider les approches Euler-Euler destinées aux configurations industrielles (cf. section 3.1.2) et dont le degré de modélisation est généralement plus grand qu'en Euler-Lagrange. En dispersion pure, Kaufmann *et al.* [112] ont évalué le modèle eulérien mésoscopique présenté dans le chapitre 3 à travers une comparaison avec des simulations lagrangiennes dans une turbulence homogène isotrope temporellement décroissante. Réveillon *et al.* [202, 203] analyse de point de vue eulérien une simulation lagrangienne d'un spray en évaporation

dans une turbulence spatialement décroissante. Ils étudient en particulier les effets de polydispersion qui apparaissent lorsque le spray subit l'action simultanée de la turbulence gazeuse et de l'évaporation.

Dans le cas présent, l'objectif est d'évaluer la capacité du code AVBP à reproduire ce phénomène complexe à travers une étude DNS en turbulence homogène isotrope (THI) temporellement décroissante. Pour un code LES, vérifier son comportement en simulation numérique directe est important dans la mesure où l'approche LES tend théoriquement vers la DNS lorsque la taille du filtre tend vers l'échelle de Kolmogorov. Cette analyse n'entre pas dans le détail du phénomène de dispersion de particules qui a déjà été étudié avec AVBP dans les thèses de A. Kaufmann [110] et E. Riber [206]. L'accent est porté sur les aspects de validation et sur l'analyse du phénomène de couplage entre la turbulence du gaz, du nuage de gouttes et de la concentration de vapeur. Dans un premier temps, on rappelle quelques notions utiles pour l'analyse de la THI (sections 6.1.2 et 6.1.3). Dans un second temps, on décrit le choix des paramètres pour la simulation (section 6.2) dont les résultats sont présentés dans les sections 6.3 à 6.7. La section 6.3 fournit une brève analyse de la dynamique de la phase gazeuse à travers le bilan instantané d'énergie cinétique. Une étude de conservativité du code pour la masse et l'énergie est présentée dans la section 6.4. Dans la section 6.5, on compare le calcul Euler-Euler d'AVBP avec un calcul Euler-Lagrange. Les mécanismes responsables des variations de variance de vapeur sont analysés dans la section 6.6, en particulier via l'écriture du bilan instantané de cette variance. Enfin, dans la section 6.7, on utilise la DNS pour vérifier l'approximation faite pour écrire le taux d'évaporation filtré en LES.

6.1.2 Rappel de notions de turbulence

La turbulence apparaît lorsque les forces d'inertie dans le fluide sont grandes devant les forces de viscosité. Cette observation est quantifiée par le nombre de Reynolds qui compare ces deux forces :

$$Re = \frac{uL}{\nu} \quad (6.1)$$

où u et L sont des échelles de vitesse et de longueur caractéristiques de l'écoulement et ν est la viscosité cinématique du fluide. La turbulence est le résultat d'une instabilité de l'écoulement laminaire qui apparaît lorsque le nombre de Reynolds dépasse une valeur critique. L'écoulement turbulent présente de fortes irrégularités dans l'espace et dans le temps. Ces fluctuations ont un caractère aléatoire qui peut être caractérisé du point de vue statistique en décomposant chaque variable f (vitesse, pression, température, etc.) en une partie moyenne et une partie fluctuante :

$$f = \langle f \rangle + f' \quad (6.2)$$

où $\langle \cdot \rangle$ représente l'opérateur de moyenne statistique définie comme une moyenne d'ensemble sur un grand nombre de réalisations de l'écoulement.

Un écoulement turbulent est constitué d'une multitude de structures tourbillonnaires auxquelles on associe des échelles de longueur, de temps et de vitesse. L'énergie turbulente est produite aux grandes échelles caractérisées par le nombre de Reynolds turbulent ($Re_t \gg 1$) défini par :

$$Re_t = \frac{u'l_t}{\nu} \quad (6.3)$$

où u' est la fluctuation de vitesse produite à l'échelle l_t des grandes structures. u' et l_t définissent le temps de retournement des tourbillons aux grandes échelles : $\tau_\varepsilon = l_t/u'$. Suivant le principe de la cascade de Kolmogorov [123], l'énergie turbulente produite aux grandes échelles est transférée vers les plus petites échelles où elle est dissipée par viscosité. L'hypothèse de Kolmogorov se traduit par un équilibre entre l'énergie u'^2/τ_ε produite aux grandes échelles et la dissipation ε aux petites échelles :

$$\varepsilon = \frac{u'^2}{\tau_\varepsilon} = \frac{u'^3}{l_t} \quad (6.4)$$

La plus petite échelle de turbulence, appelée échelle de Kolmogorov (longueur η_K , temps τ_K et vitesse u'_K), est imposée par la dissipation visqueuse et correspond à un nombre de Reynolds unitaire :

$$Re_K = \frac{u'_K \eta_K}{\nu} = 1 \quad (6.5)$$

En écrivant $\varepsilon = u'_K/\eta_K$ et en utilisant l'Eq. 6.5, on relie l'échelle de Kolmogorov à la dissipation et à la viscosité cinématique :

$$\eta_K = \left(\frac{\nu^3}{\varepsilon} \right)^{\frac{1}{4}} \quad (6.6)$$

On en déduit les rapports entre les échelles intégrales et les échelles de Kolmogorov :

$$\frac{l_t}{\eta_K} = Re_t^{\frac{3}{4}} \quad (6.7)$$

$$\frac{\tau_\varepsilon}{\tau_K} = Re_t^{\frac{1}{2}} \quad (6.8)$$

$$\frac{u'}{u'_K} = Re_t^{\frac{1}{4}} \quad (6.9)$$

6.1.3 Turbulence homogène isotrope

Statistique en deux points

Le phénomène d'interactions entre échelles décrit dans la section 6.1.2 peut être mis en évidence par le biais d'une turbulence simple : la turbulence homogène isotrope (THI). Un champ est statistiquement homogène si ses propriétés statistiques sont invariantes par translation. S'il est également statistiquement invariant par rotation et réflexion, il est dit isotrope. La THI possède les propriétés suivantes :

- la moyenne statistique $\langle \cdot \rangle$ est équivalente à la moyenne volumique $\langle \cdot \rangle_v$ sur le volume de contrôle V constitué par le domaine de calcul :

$$\langle \cdot \rangle \equiv \langle \cdot \rangle_v = \frac{1}{V} \iiint_V \cdot dV \quad (6.10)$$

Par la suite, les raisonnements se baseront sur l'analyse des fluctuations spatiales ou statistiques sans distinction ;

- l'énergie cinétique turbulente s'exprime simplement comme : $k = \frac{3}{2}u'^2$.

D'après la propriété d'invariance statistique, toute corrélation en deux points A et B ne dépend que du vecteur séparation $\mathbf{r} = \vec{AB}$. La fonction des corrélations de vitesses et le coefficient de corrélation correspondant s'écrivent alors respectivement :

$$Q_{ij}(\mathbf{r}) = \langle u'_i(A)u'_j(B) \rangle \quad (6.11)$$

$$R_{ij}(\mathbf{r}) = \frac{Q_{ij}(\mathbf{r})}{u'^2} \quad (6.12)$$

où $u'^2 = \frac{1}{3} \langle u'_i u'_i \rangle = \frac{1}{3} Q_{ii}(0) = \frac{2}{3} k$. Les échelles intégrales dans les trois directions de l'espace sont définies par :

$$L_{11}^1 = \int_0^\infty R_{11}(r, 0, 0) dr, \quad L_{22}^2 = \int_0^\infty R_{22}(0, r, 0) dr, \quad L_{33}^3 = \int_0^\infty R_{33}(0, 0, r) dr \quad (6.13)$$

avec $r = \|\mathbf{r}\| = \sqrt{r_i r_i}$. L_{ii}^i est une mesure de l'échelle de longueur intégrale qui est du même ordre que la longueur turbulente l_t . Une turbulence isotrope doit vérifier :

$$L_{11}^1 = L_{22}^2 = L_{33}^3 \quad (6.14)$$

Décroissance temporelle de l'énergie cinétique turbulente

Les Eq. 6.15 et 6.16 définissent respectivement l'énergie cinétique turbulente k et le taux de dissipation ε :

$$k = \frac{1}{2} \langle u'_i u'_i \rangle \quad (6.15)$$

$$\varepsilon = \nu \left\langle \frac{\partial u'_i}{\partial x_j} \frac{\partial u'_j}{\partial x_i} \right\rangle \quad (6.16)$$

Pour un écoulement incompressible, k vérifie la solution exacte de l'Eq. 6.17 et ε peut être modélisé par l'Eq. 6.18 :

$$\frac{dk}{dt} = -\varepsilon \quad (6.17)$$

$$\frac{d\varepsilon}{dt} = -C_\varepsilon \frac{\varepsilon^2}{k} \quad (6.18)$$

où C_ε est une constante déterminée expérimentalement : $C_\varepsilon = 1.92$. En effectuant le changement de variable $\tau_\varepsilon = k/\varepsilon$, le système Eq. 6.17–6.18 admet la solution analytique suivante :

$$\tau_\varepsilon = \tau_{\varepsilon,0} \left(1 + (C_\varepsilon - 1) \frac{t}{\tau_{\varepsilon,0}} \right) \quad (6.19)$$

$$k = k_0 \left(1 + (C_\varepsilon - 1) \frac{t}{\tau_{\varepsilon,0}} \right)^{-\frac{1}{C_\varepsilon - 1}} \quad (6.20)$$

$$\varepsilon = \varepsilon_0 \left(1 + (C_\varepsilon - 1) \frac{t}{\tau_{\varepsilon,0}} \right)^{-\frac{C_\varepsilon}{C_\varepsilon - 1}} \quad (6.21)$$

où l'indice 0 désigne les valeurs à $t = 0$.

Contraintes numériques

Le dimensionnement d'une simulation numérique directe est fonction des échelles caractéristiques de la turbulence. Deux critères primordiaux sont à respecter :

1. une description précise des grandes échelles (Eq. 6.22). Cette condition impose que le domaine soit plus grand que l'échelle intégrale l_t afin que la moyenne spatiale soit équivalente à la moyenne statistique :

$$L_{ii}^i(t) < \frac{L}{C_1} \quad \text{avec :} \quad C_1 \simeq 15 \quad (6.22)$$

où L est la dimension du domaine de calcul. Dans le cas présent d'une THI décroissante, il est nécessaire de vérifier que cette condition soit remplie tout au long de la simulation.

2. une résolution suffisante des échelles dissipatives (Eq. 6.23). Si les petites échelles sont mal résolues, l'énergie n'est pas dissipée mais s'accumule dans les plus petites structures résolues et provoque des instabilités numériques.

$$l_\varepsilon(t) > C_2 \Delta x \quad \text{avec :} \quad C_2 \simeq 5 \quad (6.23)$$

où Δx est la taille de la cellule.

En combinant les Eq. 6.22 et Eq. 6.23 et en utilisant les approximations classiques en turbulence $L_{ii}^i \approx l_t/2$ et $\eta_K \approx l_\varepsilon$, on aboutit aux conditions suivantes pour l'échelle intégrale, l'échelle de Kolmogorov et le Reynolds turbulent :

$$l_t < \frac{2L}{15} \quad (6.24)$$

$$\eta_K > \frac{\Delta x}{2} \quad (6.25)$$

$$Re_t < \left(\frac{4N_x}{15} \right)^{\frac{4}{3}} \quad (6.26)$$

où N_x est le nombre de nœuds dans la direction x . Pour une grille de calcul de 64^3 cellules, le Reynolds maximal doit donc rester inférieur à 44.

Définition des grandeurs turbulentes diphasiques

À partir de la moyenne statistique décrite par l'Eq. 6.2, on définit les différentes grandeurs turbulentes de l'écoulement gaz-particules de la manière suivante :

- *Énergie cinétique turbulente de la phase gazeuse :*

$$k = \frac{1}{2} \langle u_i u_i \rangle \quad (6.27)$$

- *Énergie cinétique turbulente du mouvement mésoscopique de la phase liquide :*

$$\check{q}_p = \frac{1}{2} \langle \check{u}_{l,i} \check{u}_{l,i} \rangle \quad (6.28)$$

– *Énergie cinétique du mouvement décorrélé de la phase liquide :*

$$q_{RUM} = \langle \delta\check{\theta}_l \rangle \quad (6.29)$$

– *Énergie cinétique des particules :*

$$q_p = \check{q}_p + q_{RUM} \quad (6.30)$$

– *Covariance des vitesses fluide-particule :*

$$q_{fp} = \langle u_i \check{u}_{l,i} \rangle \quad (6.31)$$

– *Énergie cinétique turbulente du mouvement relatif fluide-particule :*

$$q_s = \frac{1}{2} \langle u_{s,i} u_{s,i} \rangle = k + q_p - q_{fp} \quad (6.32)$$

$$\text{avec : } u_{s,i} = u_i - \check{u}_{l,i} \quad (6.33)$$

6.2 Description du cas test

Le calcul est une simulation numérique directe (DNS) réalisée avec AVBP. Le domaine de calcul est un cube périodique de dimension $L_{ref} = 2\pi \text{ mm}$ maillé au moyen d'une grille régulière comportant 64^3 cellules cubiques de dimension $\Delta x = 2\pi/64 \text{ mm}$. Afin d'établir des conditions initiales « propres » où les effets transitoires dus à l'initialisation sont minimisés, un calcul de THI temporellement décroissante d'un écoulement monophasique d'air est réalisé. L'air est ensuiteensemencé par un brouillard monodisperse uniforme constitué de gouttelettes d'eau. Les effets compétitifs de l'inertie des gouttes et de la traînée conduisent à une répartition hétérogène et instationnaire de la densité de gouttes. Dans le même temps, la température élevée de l'air permet le chauffage des gouttes et leur évaporation. L'espèce liquide se retrouve sous forme vapeur et se mélange à l'air par agitation turbulente et diffusion moléculaire.

6.2.1 Paramètres physiques et condition initiale

Dans les conditions choisies (cf. Tab. 6.4), la vitesse du son dans le gaz vaut : $c_{ref} = 549.0 \text{ m.s}^{-1}$. En utilisant la longueur de référence $L_{ref} = 1 \text{ mm}$, on définit un nombre de Reynolds acoustique et une échelle de temps de référence :

$$Re_{ac} = \frac{c_{ref} L_{ref}}{\nu} = 396.2 \quad (6.34)$$

$$t_{ref} = \frac{L_{ref}}{c_{ref}} = 1.821 \cdot 10^{-6} \text{ s} \quad (6.35)$$

L_{ref} , t_{ref} et c_{ref} servent à normaliser les variables du calcul désormais notées avec l'exposant +. Ces valeurs de référence sont résumées dans le Tab. 6.1.

Le point délicat de la THI décroissante réside dans l'élaboration d'un champ de vitesse initial qui présente un spectre d'énergie cinétique turbulente réaliste. Ce champ de vitesse est calculé dans l'espace

L_{ref} (mm)	t_{ref} (μs)	c_{ref} ($m.s^{-1}$)
1	1.821	549.0

TAB. 6.1 - Échelles de référence utilisées pour définir les variables sans dimension

spectral à partir d'une forme théorique du spectre d'énergie cinétique. On obtient ensuite le champ de vitesse dans l'espace physique par transformée de Fourier inverse. Dans la thèse de Prière [200], on trouve une discussion sur le choix de la forme du spectre en fonction du nombre de Reynolds turbulent. Dans le cas présent ($Re_t < 200$), seul un spectre de type Passot-Pouquet (PP) [184] est adapté. La densité d'énergie cinétique turbulente du spectre PP s'exprime en fonction d'un nombre d'onde caractéristique K_e associé à la vitesse turbulente u'^2 de la façon suivante :

$$E(K) = A \left(\frac{K}{K_e} \right)^4 e^{-2\left(\frac{K}{K_e}\right)^2} \quad \text{avec :} \quad A = \frac{16}{3} \sqrt{\frac{2}{\pi}} \frac{u'^2}{K_e} \quad (6.36)$$

K_e représente le nombre d'onde du mode le plus énergétique obtenu à partir de l'échelle la plus énergétique l_e . L'échelle de dissipation maximale de ce spectre est très proche de l_e ce qui rend la zone inertielle pratiquement inexistante. La Fig. 6.1 compare le spectre théorique de PP et le spectre du champ initial obtenu au moyen de l'outil d'initialisation mis au point par Boughanem [35]. Les paramètres $K_e = \sqrt{2\pi}/l_e$ et u'^2 sont donnés par le Tab. 6.2.

l_e^+	u'^+
2.2	0.0627

TAB. 6.2 - Paramètres turbulents du spectre de Passot-Pouquet

Ce champ initial n'étant pas strictement solution des équations de Navier-Stokes, on réalise une simulation monophasique pendant environ un demi-temps de retournement ($t_0^+ = 7.441$) afin de produire la condition initiale du calcul diphasique. Le spectre de ce champ calculé à t_0^+ est tracé sur la Fig. 6.1 et ses propriétés statistiques sont résumées dans le Tab. 6.3. Durant le temps t_0^+ , les grandes structures introduites par le spectre PP transfèrent de l'énergie vers les plus petites structures, ce qui améliore la représentation des échelles dissipatives.

u'^+	k^+	ε^+	τ_ε^+	l_t^+	Re_t	L_{11}^{1+}	L_{22}^{2+}	L_{33}^{3+}
$5.11.10^{-2}$	$3.92.10^{-3}$	$2.35.10^{-4}$	16.71	0.379	32.1	0.897	0.927	0.555

TAB. 6.3 - Analyse statistique du champ obtenu au temps t_0^+

Les conditions initiales de la phase dispersée sont un champ homogène de gouttelettes d'eau dont les propriétés sont résumées dans le Tab. 6.4. Afin de simplifier les discussions, l'espèce gazeuse produite par évaporation (autrement dit, la vapeur d'eau) est désignée sous le nom de *vapeur* (par opposition à la pseudo-espèce *air*) et son indice est omis dans les équations. Le champ de vitesse liquide est fixé en supposant une vitesse de glissement initialement nulle. Étant donné la faible charge massique utilisée, les effets de traînée de la phase dispersée sur la phase gazeuse sont supposés négligeables et ne sont pas pris en compte dans la simulation. Le nombre de Stokes basé sur τ_ε vaut $St = 0.403$ ce qui prédit des

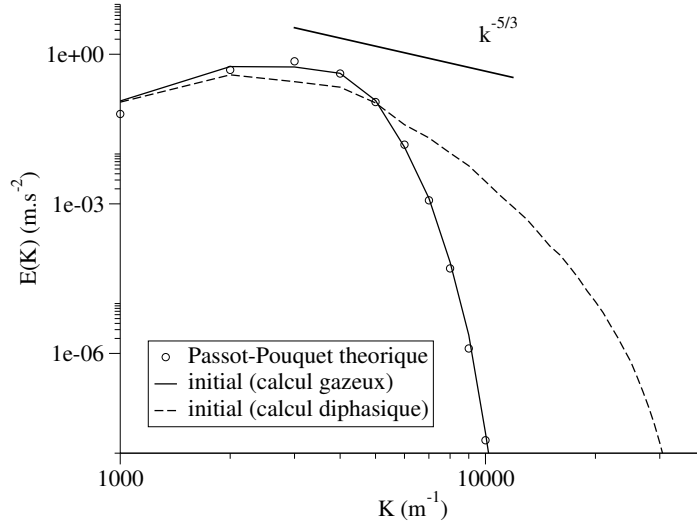


FIG. 6.1 - Comparaison entre le spectre théorique de Passot-Pouquet, le spectre initial du calcul monophasique et le spectre initial du calcul diphasique obtenu après un temps de simulation t_0^+ du calcul monophasique

effets importants de la traînée sur la phase dispersée. Enfin, le temps de simulation est suffisamment long pour permettre l'évaporation complète de la phase liquide.

Phase gazeuse : Air pur

Température :	T_0	=	800 K
Pression :	P_0	=	3.3 atm
Vitesse turbulente :	u'_0	=	28.09 m.s ⁻¹
Reynolds turbulent :	$Re_{t,0}$	=	32.1
Vapeur d'eau :	Y_0	=	0

Phase liquide : gouttes d'eau

Diamètre :	d_0	=	17 μm
Température :	$T_{l,0}$	=	300 K
Concentration (uniforme) :	$\tilde{n}_{l,0}$	=	2.67.10 ¹⁰ m ⁻³
Charge massique :	κ	=	$[\rho_l \tilde{\alpha}_l / \rho]_0 = 1\%$
Vitesse liquide :	$\tilde{u}_{l,0}$	=	u_0
Nombre de Stokes :	St_0	=	0.261

TAB. 6.4 - Conditions initiales du calcul diphasique

Les propriétés physiques des phases gazeuse et liquide sont regroupées dans le Tab. 6.5. On note que les nombres de Schmidt des espèces ont été choisis de sorte que la vitesse de correction (cf. section 2.4)

soit nulle :

$$V_i^c = \sum_{k=1}^N D_k \frac{W_k}{\bar{W}} \frac{\partial X_k}{\partial x_i} = 0 \quad (6.37)$$

$$\text{d'où : } D \frac{W}{\bar{W}} \frac{\partial X}{\partial x_i} + D_{air} \frac{W_{air}}{\bar{W}} \frac{\partial}{\partial x_i} (1 - X) = 0 \quad (6.38)$$

$$\text{soit : } \frac{Sc}{\bar{W}} = \frac{Sc_{air}}{W_{air}} \quad (6.39)$$

La plus petite échelle de fluctuations de la fraction de vapeur η_B , appelée échelle de Batchelor, s'exprime de la façon suivante en fonction de l'échelle de Kolmogorov η_K :

$$\eta_B = \frac{\eta_K}{\sqrt{Sc}} \quad (6.40)$$

La valeur $Sc = 1$ indique que les échelles de Batchelor et de Kolmogorov sont confondues : le domaine diffusionnel pour les fluctuations de vapeur et le domaine visqueux pour les fluctuations de vitesse se situent aux mêmes échelles. Comme on le montre dans la section 6.6.1, l'échelle intégrale de la variance de vapeur est imposée par la variance de concentration de gouttes, elle-même liée aux grandes échelles de la turbulence gazeuse. On s'attend donc à ce que l'échelle intégrale pour la concentration de vapeur et pour la vitesse soit proches. Ces effets peuvent être quantifiés par une analyse dans l'espace spectral, analyse qui n'est pas abordée ici mais qui pourrait faire l'objet d'une future étude.

Phase gazeuse

Viscosité dynamique (arbitraire) :	μ	=	$2.02 \cdot 10^{-3} \text{ kg.m}^{-1}.\text{s}^{-1}$
Capacité calorifique à pression constante :	C_p	=	$1.2 \text{ kJ.kg}^{-1}.\text{K}^{-1}$
Nombre de Prandtl :	Pr	=	0.7
Nombre de Schmidt de l'eau :	Sc	=	1
Nombre de Schmidt de l'air :	Sc_{air}	=	1.611

Phase liquide

Masse volumique :	ρ_l	=	1.10^3 kg.m^{-3}
Capacité calorifique à pression constante :	$C_{p,l}$	=	$4.18 \text{ kJ.kg}^{-1}.\text{K}^{-1}$
Enthalpie latente d'évaporation :	L_v	=	2250 kJ.kg^{-1}
Température de Clausius-Clapeyron :	T_{cc}	=	373.15 K
Pression de Clausius-Clapeyron :	P_{cc}	=	1 atm

TAB. 6.5 - Paramètres physiques (arbitraires) du calcul diphasique

6.3 Dynamique de la phase gazeuse

6.3.1 Évolution temporelle des grandeurs turbulentes gazeuses

On compare les résultats du calcul AVBP à la solution analytique prédisant la décroissance de l'énergie cinétique turbulente (Eq. 6.19–6.21). Le tracé de l'échelle de temps turbulente (Fig. 6.2a) fait apparaître une constante $C'_\varepsilon - 1 = 0.50$ qui est inférieure à la valeur expérimentale de 0.92 (cf. section 6.1.3). Cet écart est attribué au fait que la constante expérimentale est obtenue pour des nombres de Reynolds élevés. La Fig. 6.2b illustre la décroissance de l'énergie cinétique turbulente.

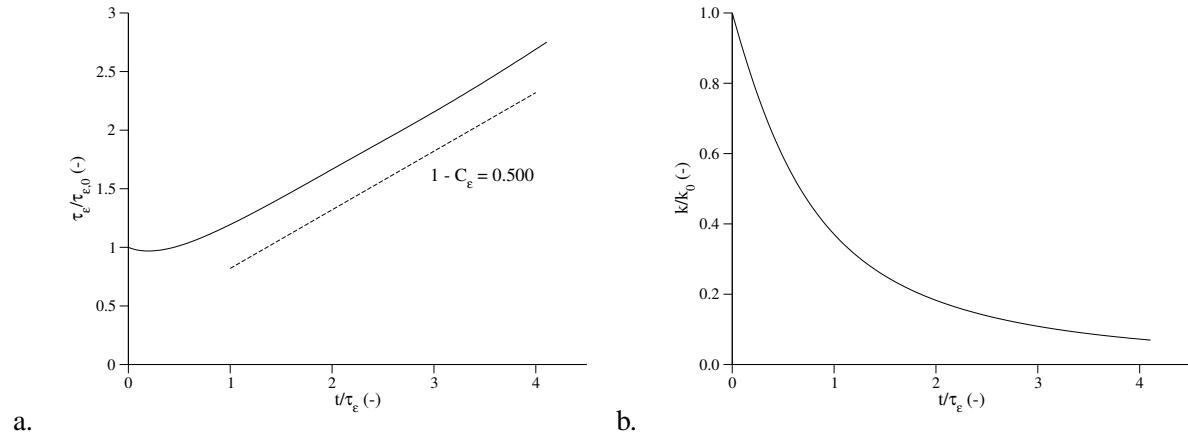


FIG. 6.2 - Évolution temporelle de l'échelle de temps des grandes échelles (a.) et de l'énergie cinétique turbulente (b.)

Les termes des Eq. 6.17 et 6.18 sont tracés sur les Fig. 6.3a et 6.3b respectivement. D'après la Fig. 6.3a, la variation d'énergie cinétique turbulente correspond bien au taux de dissipation visqueuse ε aux approximations près (cf. section 6.1.3). Sur la Fig. 6.3b, on note que le modèle semi-empirique prédisant la variation temporelle de ε est vérifié par le calcul à un peu moins d'un temps de retournement des tourbillons.

6.3.2 Bilan d'énergie cinétique turbulente

Dans leur thèse respective, Riber [206] et Moureau [174] ont écrit le bilan discret de l'énergie cinétique turbulente en formulation explicite. Ils partent de l'expression continue de la variation d'énergie cinétique en fonction de la variation de la masse et de la quantité de mouvement :

$$\frac{\partial}{\partial t} \frac{1}{2} \rho u_i^2 = u_i \frac{\partial}{\partial t} \rho u_i - \frac{1}{2} u_i^2 \frac{\partial \rho}{\partial t} \quad (6.41)$$

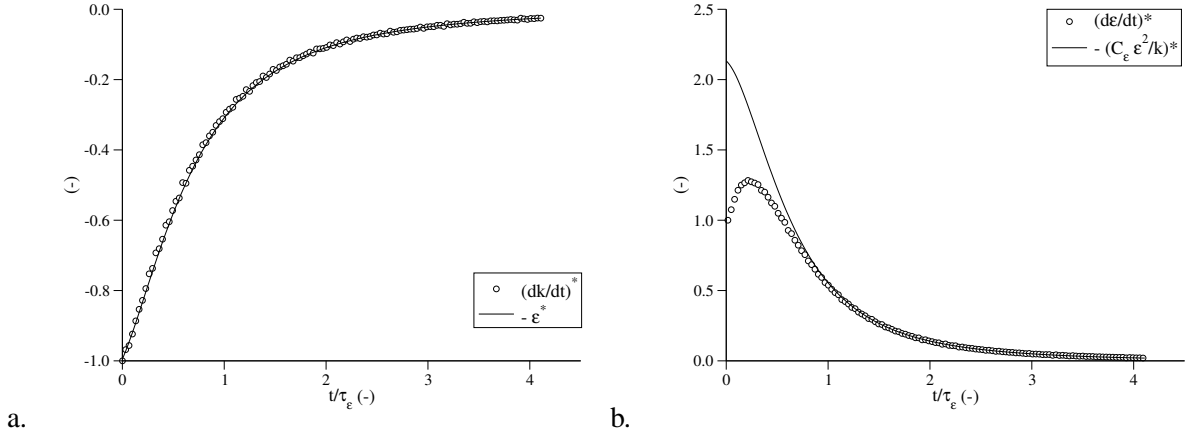


FIG. 6.3 - Évolution temporelle de la variation d'énergie cinétique turbulente (a.) et de la variation du taux de dissipation turbulente (b.) (variables adimensionnées par la valeur initiale du terme $\frac{d}{dt}$.)

En écrivant l'Eq. 6.41 de manière discrète, ils aboutissent à une expression de la variation discrète d'énergie turbulente Δk intégrée sur le domaine de calcul :

$$\frac{\Delta k}{\Delta t} = \frac{1}{2\Delta t} \langle \Delta(u_i u_i) \rangle_v = \varepsilon_{\text{conv}} + \varepsilon_{\text{acous}} + \varepsilon_{\text{lam}} + \varepsilon_{\text{avis}} \quad (6.42)$$

Dans l'Eq. 6.42, $\varepsilon_{\text{conv}}$ représente l'effet du schéma convectif, $\varepsilon_{\text{acous}}$ est le transfert par les effets acoustiques, ε_{lam} représente la dissipation visqueuse et $\varepsilon_{\text{avis}}$ correspond à l'énergie dissipée par la viscosité artificielle. Dans le cas présent, la fermeture du bilan nécessite l'ajout d'un terme source d'énergie cinétique dû à l'évaporation de la phase liquide. Ces termes de variations de l'Eq. 6.42 sont les moyennes volumiques de fonctions dont les variables sont prises à différentes étapes de la discrétisation temporelle de Runge-Kutta. En suivant l'écriture discrète proposé par Riber [206] et Moureau [174], le terme de variation d'énergie cinétique dû à l'évaporation s'écrit sous la forme :

$$\varepsilon_{\text{evap}} = \left\langle u_i^{(n+\frac{1}{2})} \check{u}_{l,i}^{(n)} \Gamma^{(n)} - \frac{1}{2} u_i^{(n)} u_i^{(n+1)} \Gamma^{(n)} \right\rangle_v \quad (6.43)$$

évalué ici par :

$$\varepsilon_{\text{evap}} \approx \left\langle u_i^{(n)} \check{u}_{l,i}^{(n)} \Gamma^{(n)} \right\rangle_v - \frac{1}{2} \left\langle u_i^{(n)} u_i^{(n)} \Gamma^{(n)} \right\rangle_v \quad (6.44)$$

En ajoutant le terme de l'Eq. 6.44 à l'Eq. 6.42 et en divisant par $\frac{\Delta k}{\Delta t}$, le bilan instantané d'énergie cinétique turbulente s'exprime finalement comme :

$$1 = \varepsilon_{\text{conv}}^+ + \varepsilon_{\text{acous}}^+ + \varepsilon_{\text{lam}}^+ + \varepsilon_{\text{avis}}^+ + \varepsilon_{\text{evap}}^+ \quad (6.45)$$

L'évolution temporelle des différents termes de l'Eq. 6.45 est tracée sur la Fig. 6.3. Le terme de dissipation visqueuse $\varepsilon_{\text{lam}}^+$ est largement prépondérant comme on peut s'y attendre pour une THI à faible nombre de Mach. Les termes de convection $\varepsilon_{\text{conv}}^+$ et de dissipation artificielle $\varepsilon_{\text{avis}}^+$ comptent pour moins

d'1% dans le bilan. Les effets acoustiques $\varepsilon_{\text{acous}}^+$ ne dépassent pas 6% de la variation totale. Enfin le terme d'évaporation $\varepsilon_{\text{evap}}^+$ reste inférieur à 4%. La fermeture du bilan à 0.15% près montre que l'Eq. 6.44 est une bonne approximation de la contribution des effets de l'évaporation sur la variation d'énergie cinétique turbulente. Si ces effets sont faibles dans le cas présent, ils pourraient être significatifs si le taux d'évaporation était supérieur, c.-à-d. pour une charge massique liquide plus élevée. Toutefois, dans ce dernier cas, les effets de traînée par le couplage inverse *liquide* \rightarrow *gaz* ne seraient certainement plus négligeables et probablement supérieurs à $\varepsilon_{\text{evap}}^+$.

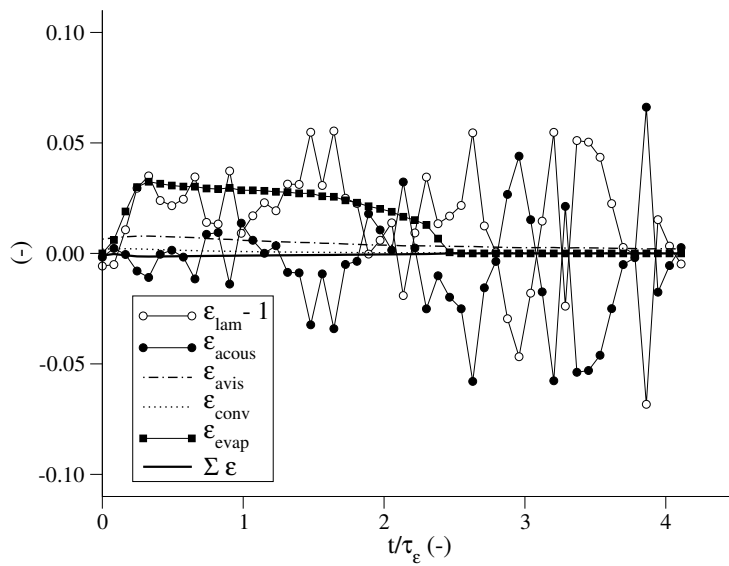


FIG. 6.4 - Bilan instantané d'énergie cinétique turbulente (termes adimensionnés par dk/dt)

6.4 Bilans de masse et d'énergie

La conservation de la masse et l'énergie est une propriété essentielle pour un code numérique de combustion. Afin de vérifier qu'AVBP est conservatif dans une configuration où les transferts entre phases et les effets convectifs sont importants, on effectue un bilan instantané de la moyenne volumique de la

masse et de l'énergie sur le domaine de calcul. Le problème est décrit par le système suivant :

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial \rho u_i}{\partial x_i} = \Gamma \quad (6.46)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} \rho Y_k + \frac{\partial}{\partial x_i} (\rho u_i Y_k + J_{i,k}) = \delta_{k,F} \Gamma \quad (6.47)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} \check{n}_l + \frac{\partial}{\partial x_i} \check{n}_l \check{u}_{l,i} = 0 \quad (6.48)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} \rho_l \check{\alpha}_l + \frac{\partial}{\partial x_i} \rho_l \check{\alpha}_l \check{u}_{l,i} = -\Gamma \quad (6.49)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} \rho E + \frac{\partial}{\partial x_i} (u_i (\rho E + P) - \tau_{ij} u_j + q_i) = \Pi + \Upsilon \quad (6.50)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} \rho_l \check{\alpha}_l \check{h}_{s,l} + \frac{\partial}{\partial x_i} \rho_l \check{\alpha}_l \check{u}_{l,i} \check{h}_{s,l} = -\Pi \quad (6.51)$$

où $\Upsilon = \Gamma \check{u}_{l,i} u_i$. Les Eq. 6.46 à 6.51 représentent respectivement la conservation de la masse totale gazeuse, la masse des espèces, la masse totale liquide, la densité de gouttes, l'énergie totale gazeuse et l'enthalpie sensible liquide. On applique la moyenne volumique définie par l'Eq. 6.10 sur le domaine de calcul périodique. En vertu du théorème de Green-Ostrogradski, $\langle \text{div} \cdot \rangle_v \equiv 0$ pour chaque second terme des Eq. 6.46–6.51. Le volume V étant fixe, la dérivée temporelle peut être sortie de l'intégrale : $\langle \frac{\partial}{\partial t} \cdot \rangle_v \equiv \frac{d}{dt} \langle \cdot \rangle_v$. Les bilans instantanés s'expriment alors de la façon suivante :

$$\frac{d}{dt} \langle \rho \rangle_v = \langle \Gamma \rangle_v \quad (6.52)$$

$$\frac{d}{dt} \langle \rho Y_k \rangle_v = \delta_{k,F} \langle \Gamma \rangle_v \quad (6.53)$$

$$\frac{d}{dt} \langle \check{n}_l \rangle_v = 0 \quad (6.54)$$

$$\frac{d}{dt} \langle \rho_l \check{\alpha}_l \rangle_v = -\langle \Gamma \rangle_v \quad (6.55)$$

$$\frac{d}{dt} \langle \rho E \rangle_v = \langle \Pi \rangle_v + \langle \Upsilon \rangle_v \quad (6.56)$$

$$\frac{d}{dt} \langle \rho_l \check{\alpha}_l \check{h}_{s,l} \rangle_v = -\langle \Pi \rangle_v \quad (6.57)$$

Variation temporelle de la moyenne = Terme source moyen + Err.

Pour la densité de gouttes (Eq. 6.54), le bilan s'exprime simplement par une variation nulle du nombre de gouttes moyen dans le domaine. D'après la Fig. 6.5, cette condition est parfaitement respectée par le code.

L'erreur de conservation $Err.$ s'exprime par la différence entre le terme de gauche et le terme de droite des Eq. 6.52–Eq.6.57. On définit l'erreur relative comme le rapport entre $Err.$ et le terme de gauche. La Fig. 6.6 montre que le bilan instantané d'énergie gazeuse est fermé avec une précision relative inférieure à 3.10^{-10} . Les bilans instantanés des autres variables se trouvent dans l'annexe A. Pour la masse liquide, la masse de vapeur d'eau et l'enthalpie liquide (Fig. A.2–A.4), l'erreur relative est inférieure à 3.10^{-10} . Le maximum d'erreur est obtenu pour la masse totale gazeuse dont l'erreur maximale est de 6.10^{-8} .

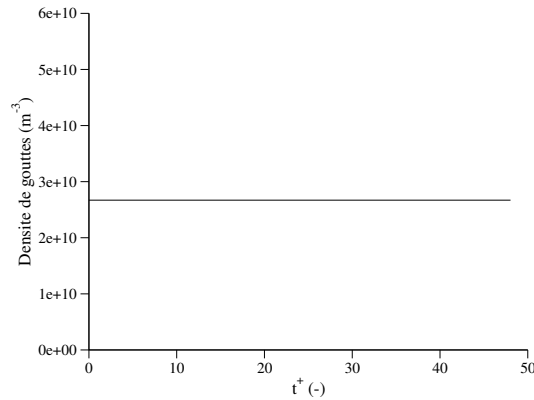


FIG. 6.5 - Évolution temporelle de la densité moyenne de gouttes

La propriété de conservativité du code est donc rigoureusement assurée pour la masse et l'énergie quelle que soit la phase.

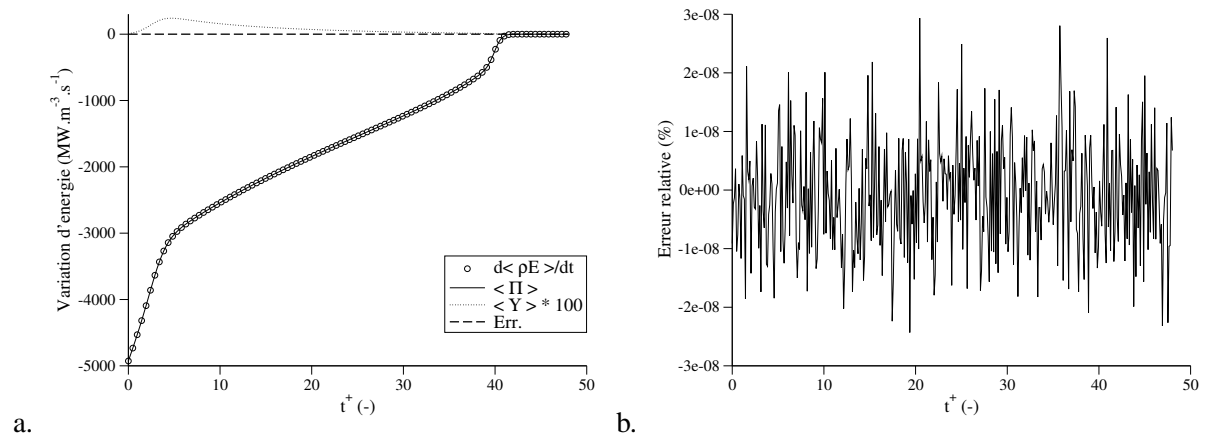


FIG. 6.6 - Bilan instantané d'énergie gazeuse (a.) et erreur relative (b.)

6.5 Comparaison avec l'approche lagrangienne

AVBP version 4.8 a été couplé au solveur lagrangien SPARTE de l'ONERA par Harran-Klotz et Ville-dieu [98]. Afin de comparer l'approche eulérienne (EE) adoptée ici à l'approche lagrangienne (EL) (cf. section 3.1), la configuration présentée dans ce chapitre a été calculée avec AVBP-SPARTE par l'ONERA dans le cadre du PRC Combustion [60]. Le Tab. 6.6 résume les caractéristiques respectives du calcul EE avec AVBP (version TPF) et EL avec AVBP-SPARTE. SPARTE n'étant pas parallèle, la résolution 32^3 et le schéma numérique Lax-Wendroff ont été retenus pour la simulation car ces paramètres représentent

un faible temps de calcul. Au nombre de Reynolds choisi ($Re_t = 32.1$), cette résolution est toutefois un peu faible pour réaliser une véritable DNS (cf. Eq. 6.26). En revanche, la résolution 64^3 avec le schéma TTGC ne pose pas de problème pour AVBP TPF qui est massivement parallèle. Ces paramètres ont donc été retenus pour le calcul EE car ils permettent une simulation plus réaliste. En dépit de ces différences, les conditions physiques sont les mêmes (cf. Tab. 6.4). On cherche alors à comparer les deux calculs sur certaines grandeurs moyennes caractéristiques.

	Euler-Lagrange	Euler-Euler
Code de calcul :	AVBP-SPARTE	AVBP TPF
Couplage numérique :	2 codes par échanges de fichiers	code unique
Parallélisme :	non parallèle	massivement parallèle
Nombre de cellules :	32^3	64^3
Résolution spatiale :	$\Delta x = 0.196 \text{ mm}$	$\Delta x = 0.0982 \text{ mm}$
Schéma numérique :	Lax-Wendroff	TTGC

TAB. 6.6 - Caractéristiques du calcul AVBP-SPARTE [98] en Euler-Lagrange et du calcul AVBP TPF en Euler-Euler

La Fig. 6.7a représente l'évolution temporelle de l'énergie cinétique turbulente de la phase gazeuse et de la phase liquide. L'écart sur l'évolution de l'énergie turbulente gazeuse montre que la phase gazeuse n'est pas calculée de la même façon par les deux codes, ce qui rend la comparaison délicate. On note néanmoins que la différence d'énergie cinétique entre les deux phases est plus grande dans la simulation lagrangienne. D'après Kaufmann [110], le terme d'énergie décorrélée q_{RUM} devrait contribuer à l'énergie cinétique totale des particules et permettre de retrouver le niveau prédit par la simulation lagrangienne. Dans le cas présent, l'énergie décorrélée reste négligeable car les termes de production ne compensent pas le terme de destruction par la traînée (courbes non présentées). Ce problème doit faire l'objet d'une investigation future. Toutefois, le nombre de Stokes étant assez faible ($St_0 = 0.261$), on peut supposer que le défaut de représentation du mouvement décorrélé a un effet de second ordre sur le mouvement mésoscopique et que les caractéristiques principales de la phase dispersée sont correctement décrites.

La Fig. 6.7b illustre les effets des transferts de chaleur par évaporation sur la température des phases gazeuses et liquides. Les deux codes prédisent de façon similaire la phase de préchauffage qui amène la température liquide à une valeur d'équilibre (cf. section 3.3.2). On note cependant que les variations des statistiques lagrangiennes se traduisent par des oscillations sur $\langle T_l \rangle_v$. Concernant la phase gazeuse, la diminution de température due à l'évaporation du nuage de gouttes est prédite de façon semblable par les deux codes.

Une fois la phase de préchauffage liquide terminée, l'évaporation se traduit par une diminution du carré du diamètre de goutte suivant la loi linéaire du d^2 (cf. section 3.3.2). Cette décroissance est prédite de manière identique par AVBP TPF et AVBP-SPARTE (cf. Fig. 6.8a). La Fig. 6.8b illustre la variation du Reynolds de goutte moyen. Re_d traduit à la fois les effets de la vitesse de glissement entre phases u_s et de l'évaporation via le diamètre de goutte ($Re_d = u_s d / \nu$). Dans les premiers instants, les deux codes prédisent une augmentation de Re_d qui correspond à l'apparition d'une vitesse relative entre phases. Pour les deux codes, la valeur maximale de Re_d est proche et ce maximum est atteint pour un temps de simulation semblable. Par la suite, le Reynolds de goutte diminue pour deux raisons. Premièrement, le diamètre de goutte décroît par évaporation. Deuxièmement, cette diminution entraîne une décroissance

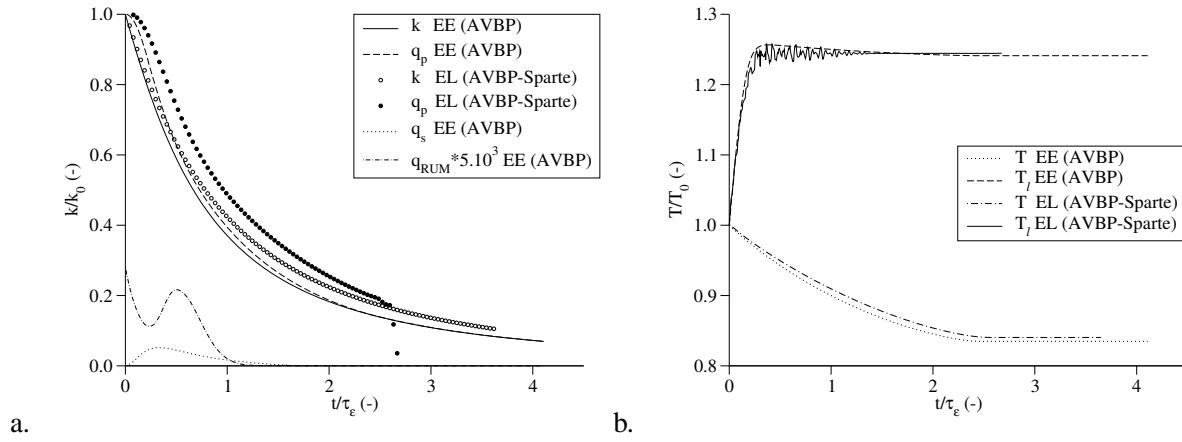


FIG. 6.7 - Énergie cinétique turbulente (a.) et températures moyennes gazeuse et liquide (b.) calculées par AVBP TPF en Euler-Euler et par AVBP couplé à SPARTE [98] (code ONERA) en Euler-Lagrange

du temps de relaxation des particules qui correspond à un effet plus grand de la traînée sur la phase dispersée. Comme l'atteste la courbe de q_s tracée sur la Fig. 6.7a, la vitesse de glissement se trouve alors réduite et contribue à la diminution de Re_d . Dans cette phase décroissante, l'écart de Re_d entre le calcul lagrangien et eulérien est attribué au fait que la dynamique de particules est un peu plus forte dans le cas lagrangien (cf. Fig. 6.7a, courbes q_p).

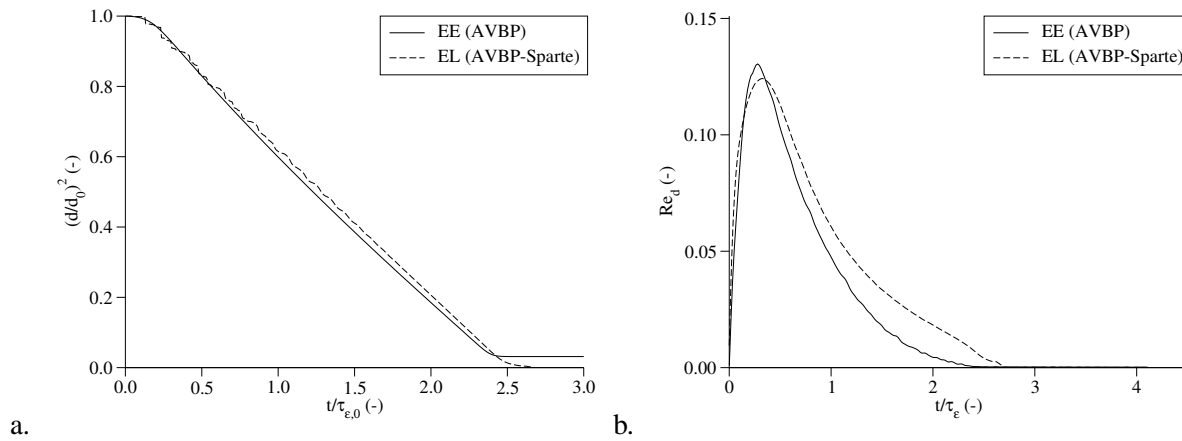


FIG. 6.8 - Surface de goutte moyenne sans dimension (a.) et Reynolds de goutte moyen (b.) calculés par AVBP TPF en Euler-Euler et AVBP-SPARTE [98] (code ONERA) en Euler-Lagrange

La Fig. 6.9 représente des coupes instantanées de la position des particules (Fig. 6.9a) et de la densité volumique de gouttes (Fig. 6.9b). Étant donné les différences entre les paramètres de simulation, on se limite à une comparaison qualitative. Les deux coupes présentent une analogie dans la forme que prennent les hétérogénéités de la concentration particulaire : les particules se retrouvent agrégées dans

des fronts plissés par les structures turbulentes. Dans les deux cas, on observe des régions assez vastes où la concentration de particules est très faible. Ce phénomène appelé ségrégation est étudié dans la section 6.6.

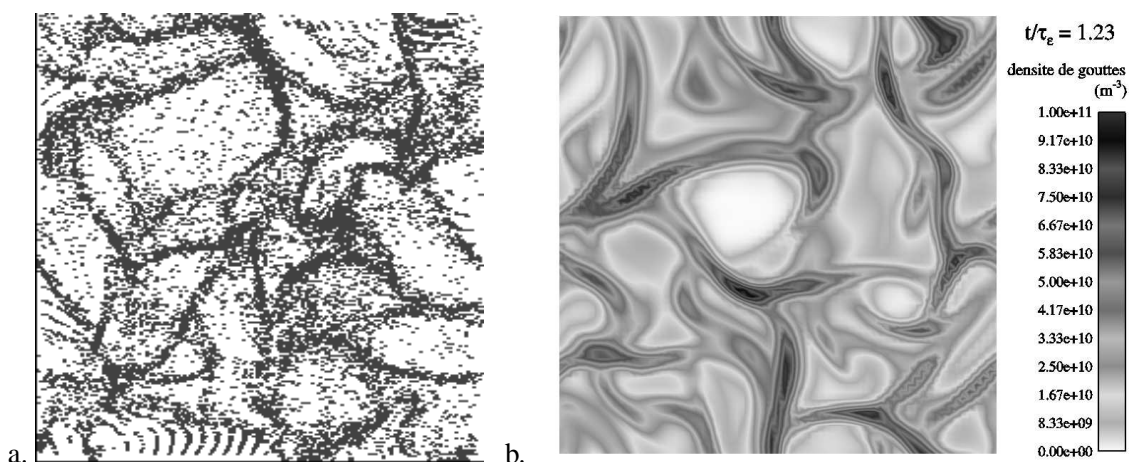


FIG. 6.9 - Coupe instantanée de la position des particules lagrangiennes calculées par AVBP-SPARTE (données ONERA) (a.) et de la densité de gouttes calculée par AVBP TPF en Euler-Euler (b.)

6.6 Analyse des mécanismes de production et de destruction de la variance de vapeur

6.6.1 Rôle de la concentration préférentielle des gouttes

La Fig. 6.10 illustre la décroissance de la masse volumique du nuage de gouttes par évaporation au profit de la masse volumique de vapeur d'eau. La fluctuation de $\rho_l \alpha_l$, liée à la ségrégation des gouttelettes, entraîne une fluctuation de ρY dans la phase gazeuse. Février [73, 75] montre que la ségrégation est un phénomène qui apparaît pour les nombres de Stokes intermédiaires (proche de l'unité). D'après Maxey [152] et Squires et Eaton [249], les particules ont tendance à s'accumuler dans les zones de faible vorticit  et de fort cisaillement du champ gazeux. Ce ph nom ne s'explique par un m canisme de centrifugation qui tend    jecter les particules du coeur des tourbillons dont l' chelle de temps caract ristique est comparable au temps de relaxation particulaire.

La Fig. 6.11 illustre les effets de concentration pr f rentielle observ s dans le calcul AVBP   $t/\tau_{\epsilon,0} = 1.23$. On constate que les tourbillons les plus intenses g n rent des r gions vides de particules (Fig. 6.11a). Ces derni res se retrouvent concentr es dans des fronts situ s dans les zones de faible vorticit  (Fig. 6.11b).

Afin de quantifier la corr lation entre les grandeurs fluctuantes jouant un r le dans la dispersion de carburant, on calcule les coefficients de corr lations lin aires pour chaque couple de ces grandeurs.  

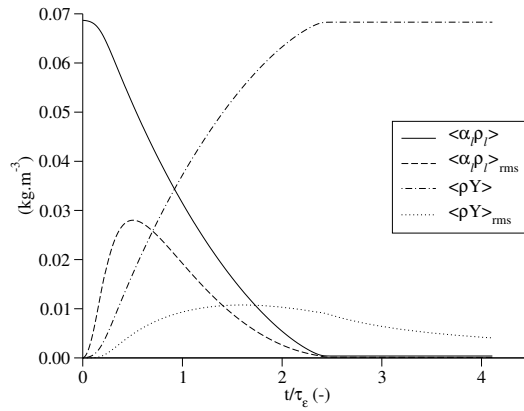


FIG. 6.10 - Évolution temporelle des moyennes et fluctuations de la masse volumique du nuage de gouttes et de la masse volumique de vapeur

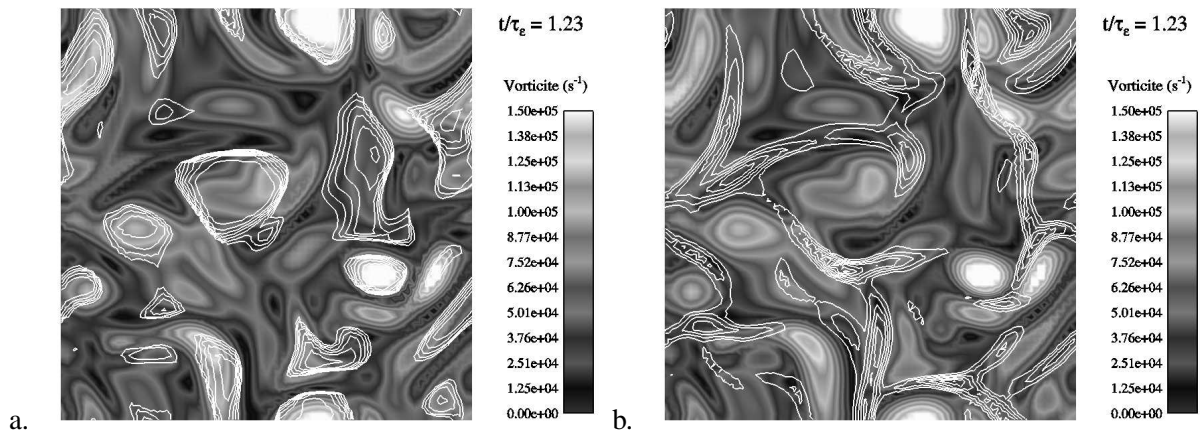


FIG. 6.11 - Phénomène de concentration préférentielle : les particules sont éjectées des zones de forte vorticité (a.) (iso-contours de densité de gouttes inférieure à $\langle \check{n}_l \rangle - \check{n}'_l$) et s'accablent dans les zones de faible vorticité (b.) (iso-contours de densité de gouttes supérieure à $\langle \check{n}_l \rangle + \check{n}'_l$)

partir de l'équivalence entre moyenne statistique et moyenne volumique (cf. section 6.1.3), le coefficient de corrélation entre les variables ϕ_1 et ϕ_2 est calculé de la manière suivante :

$$R(\phi_1, \phi_2) = \frac{\text{covar}(\phi_1, \phi_2)}{\sqrt{\text{var}(\phi_1) \text{var}(\phi_2)}} = \frac{\langle \phi_1 \phi_2 \rangle_v - \langle \phi_1 \rangle_v \langle \phi_2 \rangle_v}{\sqrt{(\langle \phi_1^2 \rangle_v - \langle \phi_1 \rangle_v^2) (\langle \phi_2^2 \rangle_v - \langle \phi_2 \rangle_v^2)}} \quad (6.58)$$

Le coefficient de corrélation (ou corrélation), compris entre -1 et 1 , évalue le degré de dépendance linéaire entre ϕ_1 et ϕ_2 . Une corrélation proche de 1 signifie que ϕ_1 évolue linéairement avec ϕ_2 . Une corrélation proche de -1 correspond à la relation linéaire inverse. Si les variables sont indépendantes la corrélation vaut 0 (sans que la réciproque soit vraie).

La corrélation des fluctuations de densité de gouttes et de vortacité $R(\omega, \tilde{n}_l)$ est tracée sur la Fig. 6.12. Sa valeur reste négative tout au long de la simulation, ce qui confirme que les fortes densités de gouttes sont associées aux faibles vorticités, bien que la relation ne soit pas linéaire. Par ailleurs, la Fig. 6.12 montre que le taux d'évaporation Γ (proportionnel à \tilde{n}_l) est fortement corrélé à la fraction massique de vapeur d'eau. Autrement dit, les zones de forte concentration de vapeur coïncident avec les régions où le taux d'évaporation est grand, c.-à-d. où la phase dispersée est densément peuplée. Ainsi, le coefficient de corrélation vapeur-gouttes $R(Y, \tilde{n}_l)$ reste proche de l'unité. La conséquence du mécanisme de concentration préférentielle de la phase dispersée est de produire de la vapeur dans les régions de faible vortacité, comme l'atteste la courbe négative de $R(Y, \omega)$. Toutefois, en particulier après la fin de l'évaporation, $R(Y, \omega)$ diminue car la vapeur de carburant est homogénéisée par diffusion moléculaire.

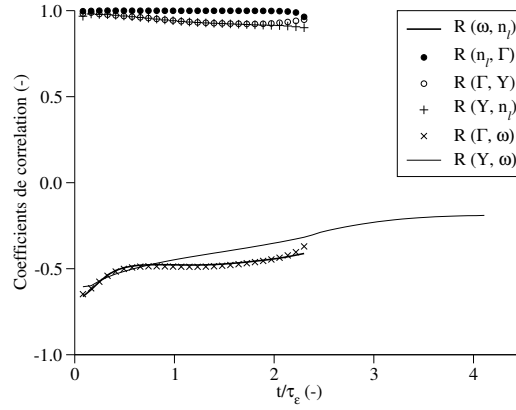


FIG. 6.12 - Évolution temporelle de différents coefficients de corrélation : vortacité–densité de gouttes, densité de gouttes–taux d'évaporation, taux d'évaporation–fraction de vapeur, fraction de vapeur–densité de gouttes, taux d'évaporation–vortacité et fraction de vapeur–vortacité (les coefficients faisant intervenir la phase dispersée sont tracés jusqu'au temps d'évaporation)

6.6.2 Bilan de variance de vapeur

Afin de quantifier les termes responsables des variations temporelles de la variance de vapeur Y'^2 , on cherche à établir son bilan instantané de conservation.

En utilisant l'équivalence entre moyenne statistique et moyenne volumique (cf. section 6.1.3), on écrit la variance de la fraction massique de vapeur de la façon suivante :

$$Y'^2 = \text{var}(Y) = \langle Y^2 \rangle_v - \langle Y \rangle_v^2 \quad (6.59)$$

En dérivant l'Eq. 6.59 par rapport au temps, on obtient la variation temporelle de Y'^2 :

$$\frac{d}{dt} Y'^2 = \frac{d}{dt} \langle Y^2 \rangle_v - 2 \langle Y \rangle_v \frac{d}{dt} \langle Y \rangle_v \quad (6.60)$$

On rappelle les équations de conservation de la masse totale et de la masse de vapeur respectivement :

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_i} \rho u_i = \Gamma \quad (6.61)$$

$$\frac{\partial \rho Y}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_i} \rho Y u_i = -\frac{\partial J_{i,F}}{\partial x_i} + \Gamma \quad (6.62)$$

avec $J_i = -\rho D \frac{W_{H_2O}}{W} \frac{\partial X}{\partial x_i}$ et sans vitesse de correction grâce au choix des nombres de Schmidt (cf. section 6.2.1). À partir des Eq. 6.62 et 6.61, on déduit l'équation de transport de la fraction massique de vapeur :

$$\frac{\partial Y}{\partial t} + u_i \frac{\partial}{\partial x_i} Y = \underbrace{-\frac{1}{\rho} \frac{\partial J_i}{\partial x_i}}_{\mathcal{T}_{\text{diff}}} + \underbrace{(1-Y) \frac{\Gamma}{\rho}}_{\mathcal{T}_{\text{evap}}} \quad (6.63)$$

où $\mathcal{T}_{\text{diff}}$ et $\mathcal{T}_{\text{evap}}$ sont les taux de variation de fraction massique de vapeur par diffusion moléculaire et par évaporation respectivement. En multipliant l'Eq. 6.63 par $2Y$, on obtient l'équation de transport du carré de la fraction massique de vapeur :

$$\frac{\partial Y^2}{\partial t} + u_i \frac{\partial}{\partial x_i} Y^2 = 2Y \mathcal{T}_{\text{diff}} + 2Y \mathcal{T}_{\text{evap}} \quad (6.64)$$

En moyennant les Eq. 6.63 et 6.64 sur le volume V du domaine de calcul, on a respectivement :

$$\left\langle \frac{\partial Y}{\partial t} \right\rangle_v + \left\langle u_i \frac{\partial}{\partial x_i} Y \right\rangle_v = \langle \mathcal{T}_{\text{diff}} \rangle_v + \langle \mathcal{T}_{\text{evap}} \rangle_v \quad (6.65)$$

$$\left\langle \frac{\partial Y^2}{\partial t} \right\rangle_v + \left\langle u_i \frac{\partial}{\partial x_i} Y^2 \right\rangle_v = 2 \langle Y \mathcal{T}_{\text{diff}} \rangle_v + 2 \langle Y \mathcal{T}_{\text{evap}} \rangle_v \quad (6.66)$$

On note que :

$$\left\langle u_i \frac{\partial}{\partial x_i} Y^2 \right\rangle_v = 2 \left\langle Y u_i \frac{\partial}{\partial x_i} Y \right\rangle_v = -2 \langle Y \mathcal{T}_{\text{conv}} \rangle_v \quad (6.67)$$

$$\text{avec : } \mathcal{T}_{\text{conv}} = -u_i \frac{\partial Y}{\partial x_i} \quad (6.68)$$

où $\mathcal{T}_{\text{conv}}$ est la variation convective de la fraction de vapeur. Le volume V étant fixe, la dérivée temporelle peut être sortie de l'intégrale : $\left\langle \frac{\partial}{\partial t} \cdot \right\rangle_v \equiv \frac{d}{dt} \langle \cdot \rangle_v$. Les Eq. 6.65 et 6.66 se mettent alors sous la forme :

$$\frac{d}{dt} \langle Y \rangle_v = \langle \mathcal{T}_{\text{conv}} \rangle_v + \langle \mathcal{T}_{\text{diff}} \rangle_v + \langle \mathcal{T}_{\text{evap}} \rangle_v \quad (6.69)$$

$$\frac{d}{dt} \langle Y^2 \rangle_v = 2 \langle Y \mathcal{T}_{\text{conv}} \rangle_v + 2 \langle Y \mathcal{T}_{\text{diff}} \rangle_v + 2 \langle Y \mathcal{T}_{\text{evap}} \rangle_v \quad (6.70)$$

D'après l'Eq. 6.60, en prenant (Eq. 6.66) $-2 \langle Y \rangle_v \times$ (Eq. 6.65), on obtient le bilan instantané de variance de la fraction massique de vapeur :

$$\frac{d}{dt} Y'^2 = \varepsilon_{\text{conv}} + \varepsilon_{\text{diff}} + \mathcal{P}_{\text{evap}} \quad (6.71)$$

$$\text{avec : } \varepsilon_{\text{conv}} = 2 \langle Y \mathcal{T}_{\text{conv}} \rangle_v - 2 \langle Y \rangle_v \langle \mathcal{T}_{\text{conv}} \rangle_v = 2 \langle Y' \mathcal{T}'_{\text{conv}} \rangle_v \quad (6.72)$$

$$\varepsilon_{\text{diff}} = 2 \langle Y \mathcal{T}_{\text{diff}} \rangle_v - 2 \langle Y \rangle_v \langle \mathcal{T}_{\text{diff}} \rangle_v = 2 \langle Y' \mathcal{T}'_{\text{diff}} \rangle_v \quad (6.73)$$

$$\mathcal{P}_{\text{evap}} = 2 \langle Y \mathcal{T}_{\text{evap}} \rangle_v - 2 \langle Y \rangle_v \langle \mathcal{T}_{\text{evap}} \rangle_v = 2 \langle Y' \mathcal{T}'_{\text{evap}} \rangle_v \quad (6.74)$$

où $\varepsilon_{\text{conv}}$, $\varepsilon_{\text{diff}}$ et $\mathcal{P}_{\text{evap}}$ sont des termes de (double) covariance. $\varepsilon_{\text{conv}}$ est la variation par la corrélation des fluctuations de fraction de vapeur et de flux convectif. $\varepsilon_{\text{diff}}$ représente la dissipation par diffusion moléculaire (cf. remarque ci-dessous). $\mathcal{P}_{\text{evap}}$ est le terme de production par la corrélation des fluctuations de fraction de vapeur et de taux de production de vapeur par évaporation.

Remarque : Étant donné que la fraction massique de vapeur reste faible ($\leq 1\%$), on peut supposer :

$$\bar{W} = \text{cste} = W_{\text{air}} \quad (6.75)$$

$$\rho = \text{cste} = \rho_0 \quad (6.76)$$

En rappelant que $\rho D = \frac{\mu}{Sc}$ avec la viscosité μ fixée constante dans cette étude, on a :

$$\varepsilon_{\text{diff}} \approx \frac{2\mu}{\rho_0 Sc} \left[\left\langle Y \frac{\partial^2 Y}{\partial x_i \partial x_i} \right\rangle_v - \langle Y \rangle_v \left\langle \frac{\partial^2 Y}{\partial x_i \partial x_i} \right\rangle_v \right] \quad (6.77)$$

En appliquant le théorème de Green-Ostrogradski et en rappelant que le domaine de calcul est périodique, on a :

$$\left\langle \frac{\partial^2 Y}{\partial x_i \partial x_i} \right\rangle_v = \iint_A \frac{\partial Y}{\partial x_i} n_i dA \equiv 0 \quad (6.78)$$

où A représente la frontière du domaine de calcul et \mathbf{n} la normale à cette frontière. En utilisant la propriété de négativité de l'opérateur laplacien, $\varepsilon_{\text{diff}}$ s'écrit finalement :

$$\varepsilon_{\text{diff}} \approx -\frac{2\mu}{\rho_0 Sc} \left\langle \frac{\partial Y}{\partial x_i} \frac{\partial Y}{\partial x_i} \right\rangle_v \leq 0 \quad (6.79)$$

$\varepsilon_{\text{diff}}$ est donc bien un terme de dissipation. Il est analogue au taux de dissipation scalaire χ utilisé dans la modélisation des flammes de diffusion et dans le cas présent non-réactif, la fraction de vapeur est équivalente à la fraction de mélange. Réveillon et Vervisch [204] ont dérivé l'équation de conservation de la variance de la fraction de mélange en tenant compte de l'évaporation. La forme de cette équation diffère légèrement celle de l'Eq. 6.71 car ils utilisent une moyenne de Favre alors que la dérivation présentée ici est basée sur une moyenne de Reynolds. À partir de résultats DNS de THI temporellement décroissantes, ces auteurs proposent un modèle prédisant les fluctuations de fraction de mélange destiné aux codes LES ou RANS.

Les différents termes de l'Eq. 6.71 sont tracés sur la Fig. 6.13. On constate que le terme convectif $\varepsilon_{\text{conv}}$ reste négligeable. Le terme d'évaporation $\mathcal{P}_{\text{evap}}$ est seul responsable de la production de Y'^2 et

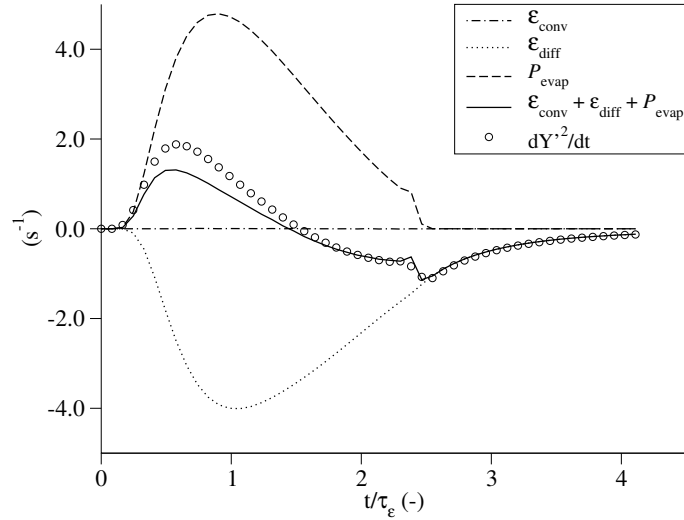


FIG. 6.13 - Bilan instantané de variance de la fraction massique de vapeur

s'oppose au terme de dissipation par diffusion moléculaire $\varepsilon_{\text{diff}}$. Pour un temps de simulation inférieur à $1.5\tau_\varepsilon$, $\mathcal{P}_{\text{evap}}$ est supérieur à $-\varepsilon_{\text{diff}}$ ce qui crée de la variance de vapeur. Selon la loi du $d2$, le taux d'évaporation Γ diminue en racine carré du temps après la phase de préchauffage (cf. section 6.5). Pour $t > 1.5\tau_\varepsilon$, la contribution de Γ dans $\mathcal{P}_{\text{evap}}$ n'est plus suffisante pour compenser la dissipation $\varepsilon_{\text{diff}}$ et le bilan de Y'^2 devient négatif. Ce comportement est conforme aux observations faites par Mashayek dans une étude DNS Euler-Lagrange de gouttelettes en évaporation dans une THI forcée [148]. Au delà du temps d'évaporation ($t_{\text{evap}} = 2.5\tau_\varepsilon$), la fraction de vapeur devient un scalaire passif et la dissipation moléculaire est le seul terme contribuant au bilan ($\varepsilon_{\text{conv}} \approx 0$) :

$$\frac{d}{dt} Y'^2 = \varepsilon_{\text{diff}} \quad (6.80)$$

L'Eq. 6.80 est similaire à l'Eq. 6.17 décrivant la décroissance de l'énergie cinétique turbulente. On définit l'échelle de temps $\tau_{\varepsilon,D}$ caractéristique des fluctuations de fraction de vapeur par : $\tau_{\varepsilon,D} = Y'^2/|\varepsilon_{\text{diff}}|$. La Fig. 6.14 montre qu'au-delà du temps d'évaporation, $\tau_{\varepsilon,D}$ suit une croissance linéaire semblable à l'évolution théorique de τ_ε prédite l'Eq. 6.19. Dans ce cas, la constante du modèle vaut $C_{\varepsilon,D} = 0.54$, proche de la valeur $C_\varepsilon = 0.50$ mesurée pour le temps turbulent dynamique. Cette observation est conforme à l'existence d'un rapport constant (proche de 1) entre les échelles de temps du champ dynamique et du champ d'un scalaire passif (cf. Schiestel [221]).

Note : Le fait que l'erreur de fermeture du bilan de Y'^2 (Fig. 6.13) soit assez importante (en particulier durant la phase d'évaporation) n'est pas vraiment surprenant. D'une part, l'évaluation des termes $\varepsilon_{\text{conv}}$ et $\varepsilon_{\text{diff}}$ faisant intervenir les opérateurs de gradient et de divergence est réalisée à l'aide d'un logiciel de visualisation (Ensign) et non par les opérateurs d'AVBP. D'autre part, le bilan est construit à

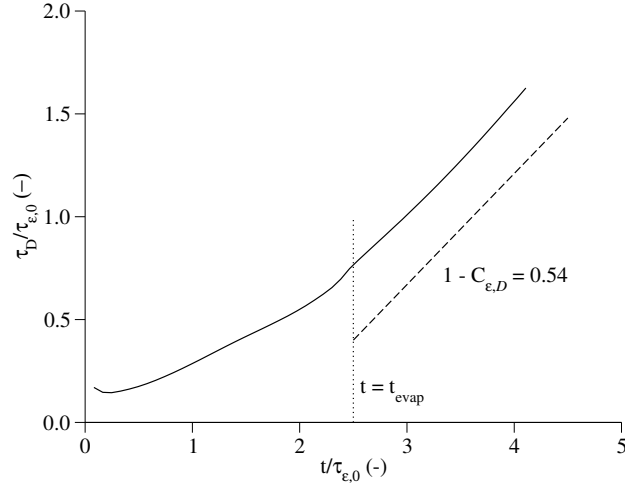


FIG. 6.14 - Évolution temporelle de l'échelle de temps des fluctuations de vapeur

partir du carré de la fraction massique de vapeur qui n'est pas une variable transportée par le code et la forme continue de l'Eq. 6.71 n'est pas résolue explicitement. Une fermeture faisant apparaître l'erreur du schéma numérique pourrait être obtenue en écrivant le bilan sous forme discrète par la méthode décrite dans la section 6.3.

6.6.3 Bilan de covariance de densité de gouttes-fraction de vapeur

En appliquant la méthode décrite ci-dessus au produit $\check{n}_l Y$, on obtient le bilan instantané de covariance de concentration de gouttes-fraction de vapeur :

$$\frac{d}{dt} \langle \check{n}_l' Y' \rangle_v = \varepsilon_{\text{conv}} + \varepsilon_{\text{slip}} + \varepsilon_{\text{diff}} + \mathcal{P}_{\text{evap}} \quad (6.81)$$

$$\text{avec :} \quad \varepsilon_{\text{conv}} = -\check{n}_{l,0} \langle \mathcal{T}_{\text{conv}} \rangle_v \quad (6.82)$$

$$\varepsilon_{\text{slip}} = \left\langle Y \frac{\partial}{\partial x_i} \check{n}_l u_{s,i} \right\rangle_v = - \left\langle \check{n}_l u_{s,i} \frac{\partial Y}{\partial x_i} \right\rangle_v \quad (6.83)$$

$$\varepsilon_{\text{diff}} = \langle \check{n}_l \mathcal{T}_{\text{diff}} \rangle_v - \check{n}_{l,0} \langle \mathcal{T}_{\text{diff}} \rangle_v = \langle \check{n}_l' \mathcal{T}_{\text{diff}}' \rangle_v \quad (6.84)$$

$$\mathcal{P}_{\text{evap}} = \langle \check{n}_l \mathcal{T}_{\text{evap}} \rangle_v - \check{n}_{l,0} \langle \mathcal{T}_{\text{evap}} \rangle_v = \langle \check{n}_l' \mathcal{T}_{\text{evap}}' \rangle_v \quad (6.85)$$

où $u_{s,i}$ est la vitesse relative gaz/liquide (ou vitesse de glissement) définie par : $u_{s,i} = u_i - \check{u}_{l,i}$. $\check{n}_{l,0}$ est le nombre de gouttes moyen dans le domaine : $\check{n}_{l,0} = \langle \check{n}_l \rangle_v = \text{cste}$. $\varepsilon_{\text{conv}}$ représente l'effet du transport convectif de la fraction de vapeur. $\varepsilon_{\text{diff}}$ et $\mathcal{P}_{\text{evap}}$ sont des termes de covariance qui représentent respectivement la dissipation par diffusion moléculaire et la production par la corrélation des fluctuations de densité de gouttes et de taux d'évaporation. Par rapport au bilan de variance de vapeur (Eq. 6.71), $\varepsilon_{\text{slip}}$ est un terme supplémentaire qui traduit l'effet de la vitesse de glissement entre phases.

Ces différents termes sont tracés sur la Fig. 6.15. Comme attendu, le terme convectif $\varepsilon_{\text{conv}}$ reste négligeable. On retrouve l'effet des termes $\varepsilon_{\text{diff}}$ et $\mathcal{P}_{\text{evap}}$ qui sont des termes de dissipation et de production de variance respectivement. Le terme dû au glissement entre phases $\varepsilon_{\text{slip}}$ représente une source positive de covariance tout au long du calcul et contribue pour une part relativement importante dans le bilan. Ce résultat pourrait sembler surprenant dans la mesure où la vitesse de glissement est associée à une séparation des trajectoires gazeuse et liquide donc à une décorrélation des champs scalaires des deux phases. En réalité, $\varepsilon_{\text{slip}} > 0$ traduit le fait que les gradients positifs de fraction de vapeur ($\frac{\partial Y}{\partial x_i} > 0$) sont associés à des flux de gouttes relatifs liquide/gaz positifs ($-\tilde{n}_l u_{s,i} > 0$). Autrement dit, les gouttes qui vont plus vite que le gaz ($u_{s,i} < 0$) génèrent des fronts de fraction croissante de vapeur par évaporation dans la direction i . À l'inverse, celles qui vont moins vite ($u_{s,i} > 0$) induisent des fronts décroissants dans la direction i .

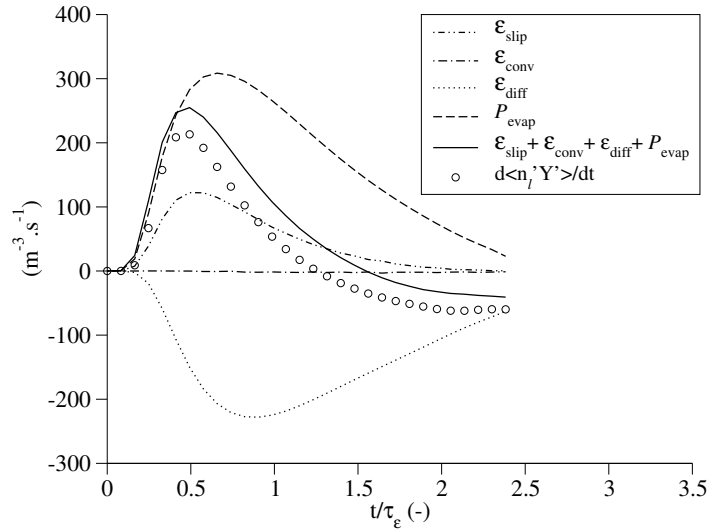


FIG. 6.15 - Bilan instantané de la covariance densité de gouttes-fraction massique de vapeur

6.7 Taux d'évaporation filtré en LES

Dans la section 4.4.5, on a écrit le taux d'évaporation filtré en LES de la manière suivante :

$$\bar{\Gamma} = \overline{\pi \tilde{n}_l \check{d} Sh [\rho D_F] \ln(1 + B_M)} \quad (6.86)$$

$$\text{approximation : } \Gamma_{LES} \approx \pi \bar{n}_l \check{d} \overline{Sh} \frac{\bar{\mu}}{S_{CF}} \ln(1 + \bar{B}_M) \quad (6.87)$$

$$\text{avec : } \bar{B}_M \approx \frac{Y_{F,\zeta}(\hat{T}_l) - \tilde{Y}_F}{1 - Y_{F,\zeta}(\hat{T}_l)} \quad (6.88)$$

où $\overline{Sh} = 2$ dans le cas présent. Afin de vérifier la validité de l'approximation de l'Eq. 6.87, on compare les expressions des Eq. 6.86 et 6.87 en évaluant les valeurs filtrées par moyenne volumique sur le domaine de calcul. La Fig. 6.16 montre que l'Eq. 6.87 est une approximation valable pour le taux d'évaporation filtré quel que soit le temps du calcul.

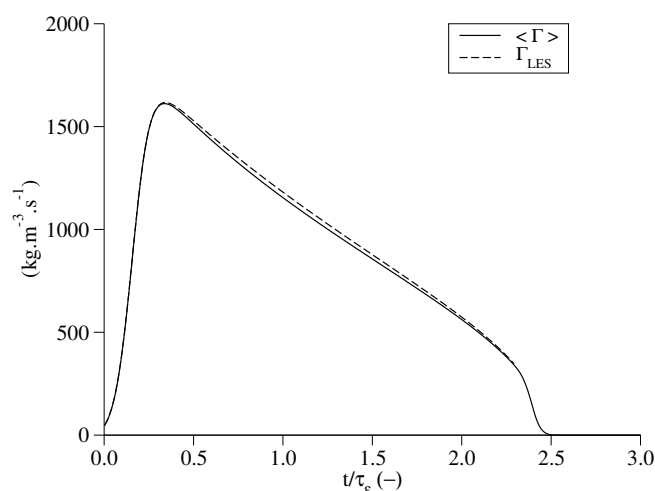


FIG. 6.16 - Comparaison entre le taux d'évaporation moyen $\langle \Gamma \rangle_v$ et le taux d'évaporation Γ_{LES} calculé à partir des variables moyennes

6.8 Conclusion

La THI diphasique avec évaporation met en évidence l'existence d'interactions complexes entre la turbulence du gaz, la dynamique des gouttes et la variance du champ de vapeur produit. Ces interactions mettent en jeu des effets inertiels, diffusifs ainsi que des transferts de quantité de mouvement, d'énergie et de masse entre phases. Tous ces phénomènes sont pris en compte par le modèle diphasique eulérien implanté dans AVBP.

Du point de vue de la validation, plusieurs points ont été traités. Concernant la dynamique de la phase gazeuse, un bilan d'énergie cinétique incluant l'effet de l'évaporation est présenté. La conservativité du code pour la masse et l'énergie de chaque phase a été vérifiée par des bilans intégraux instantanés. Le calcul Euler-Euler a été comparé à une simulation lagrangienne. Concernant l'évolution temporelle de certaines grandeurs moyennes telles que la température, le diamètre et le Reynolds des gouttes, l'accord est bon. Des différences ont été notées sur la dynamique moyenne de la phase dispersée bien que les champs de densité de gouttes obtenus soient qualitativement comparables. À travers l'écriture d'une équation de bilan pour la variance de vapeur, on a montré la capacité d'AVBP à prédire le mélange turbulent d'un nuage de gouttes qui s'évapore en configuration homogène. Le rôle du phénomène de concentration préférentielle des gouttes dans la production de variance de vapeur a été mis en évidence ainsi que les effets compétitifs du transfert de masse par évaporation et de la diffusion moléculaire.

Cet exercice de validation pourrait être étendu à certains points qui n'ont pas été abordés. Par exemple, une étude spectrale permettrait de comprendre à quelles échelles se font les transferts entre phases afin d'évaluer l'importance de modéliser les termes de sous-maille négligés dans le modèle LES de la phase dispersée (cf. section 4.4). Par ailleurs, les transferts de chaleur n'ont pas été analysés ici. En particulier, l'étude de l'effet du spray sur le champ de température de la phase gazeuse présente un intérêt dans les écoulements chargés où l'on s'attend à observer des phénomènes de saturation locale en fonction des fluctuations de fraction volumique et de température. Enfin, dans la perspective de l'extension du modèle Euler-Euler d'AVBP aux écoulements polydispersés, le modèle de Mossa [173] pourrait être testé dans cette configuration et comparé au modèle Euler-Lagrange récemment implanté dans AVBP par M. García au cours de sa thèse [84, 207].

Chapitre 7

Flammes laminaires diphasiques

7.1 Introduction

7.1.1 Intérêt de l'étude

Comme le montre la section 1.2.1, la combustion diphasique est un phénomène complexe. On recherche donc des situations où le problème se présente sous une forme simplifiée, tant du point de vue de la théorie que du calcul numérique. La flamme plane laminaire diphasique est une simplification majeure qui présente plusieurs intérêts :

- elle prend en compte des caractéristiques essentielles de la combustion de spray en représentant la flamme comme la propagation d'une onde où interviennent la cinétique chimique, le transport et l'évaporation de gouttes de carburants, les flux d'espèces et de chaleur dans le gaz, etc. ;
- elle permet la comparaison entre les études théoriques, expérimentales et numériques ;
- elle se prête facilement aux études paramétriques qui fournissent des informations précieuses sur la physique et les limites des modèles théoriques et numériques ;
- bien que l'approche de type flammelettes ne soit pas aussi évidente que pour la combustion gazeuse, cette flamme peut servir d'élément de base pour bâtir un modèle de combustion diphasique turbulente (cf. section 4.6).

Dans le cadre de ce travail, les calculs de flammes planes sont orientés vers l'application du code AVBP aux simulations tridimensionnelles turbulentes présentées dans la partie III. Dans un premier temps, on cherche à valider le code sur la base d'une solution analytique (flamme diphasique homogène). Dans un second temps, on étudie le mode de combustion rencontré dans les calculs LES et on analyse le comportement du modèle de flamme épaissie en prévision de ces calculs (flamme diphasique saturée).

7.1.2 Classification des flammes laminaires diphasiques

Les auteurs proposent différents niveaux de classement pour décrire les flammes laminaires diphasiques. Williams [269] distingue les flammes homogènes des flammes hétérogènes. En comparant le

temps convectif du spray $\tau_{conv} = D/S_L$ avec le temps d'évaporation τ_{evap} , la Fig. 7.1 illustre la différence entre :

- **La flamme homogène** (ou flamme à préévaporation). Le front de flamme se situe dans une région purement gazeuse car le temps convectif permet l'évaporation totale du spray de carburant ($\tau_{conv} \geq \tau_{evap}$);
- **La flamme hétérogène**. Le front de flamme rencontre un écoulement diphasique car le temps d'évaporation est supérieur ($\tau_{evap} \rightarrow \infty$ dans le cas de la flamme saturée présentée ci-dessous) au temps de convection du spray ($\tau_{conv} < \tau_{evap}$).

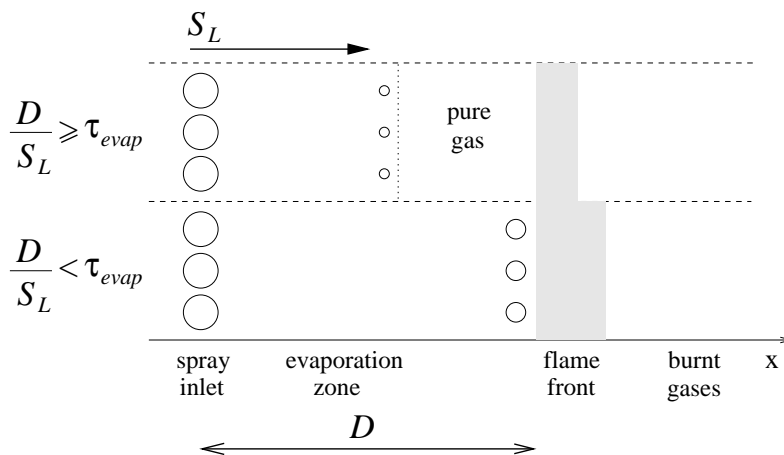


FIG. 7.1 - Schéma de la flamme diphasique monodimensionnelle : flamme homogène (en haut) et flamme hétérogène (en bas)

Dans la catégorie des flammes hétérogènes, Ben Dakhliia [20] fait une distinction théorique entre deux types pour les flammes planes non étirées :

- **La flamme saturée.** Lorsque le mélange injecté est froid ou lorsque le carburant est peu volatil, la pression partielle de carburant à la surface des gouttes¹ est faible. Lorsque la pression partielle dans le gaz environnant tend vers cette valeur de surface, le taux d'évaporation des gouttes tend vers zéro : le mélange est dit saturé. Du point de vue de l'évaporation (et non de la chimie), l'état amont est à l'équilibre thermodynamique et ne varie plus en espace. En pénétrant dans le front de flamme, les gouttes voient leur température augmenter au contact des gaz chauds et le mélange n'est plus à l'équilibre : l'évaporation reprend et produit la vapeur de carburant qui alimente la réaction chimique. La flamme saturée peut donc être vue comme une onde de déflagration se propageant dans un milieu (diphasique) infini. Elle est stationnaire lorsque la vitesse de l'écoulement infini amont est égale à la vitesse de propagation du front de flamme. Sur ce plan, elle présente une analogie avec la flamme gazeuse de prémélange.
- **La flamme ancrée.** L'état amont est un mélange diphasique non-saturé qui impose une frontière amont située à une distance finie du front de flamme. Dans ce cas, l'évaporation du spray débute

¹égale à la pression de vapeur saturante imposée par la loi de Clapeyron (cf. section 3.3.2)

dès la condition d'entrée et la flamme se stabilise à l'endroit où la vitesse de propagation (qui varie avec la fraction de carburant évaporé) est égale à celle du spray. Contrairement à la flamme plane saturée, le caractère propagatif de la flamme ancrée ne peut pas être clairement défini car il est impossible de déterminer un état amont non perturbé. On ne peut donc pas lui associer une véritable vitesse de flamme. Par conséquent, ce type de configuration est moins propice à la validation et n'a pas été retenu dans cette étude.

7.1.3 Précédents travaux

Bien qu'elles présentent un intérêt dans la modélisation de la combustion diphasique turbulente (cf. section 7.1.1), les flammes laminaires diphasiques non étirées ont fait l'objet de relativement peu d'études. La rareté des résultats expérimentaux tient aux difficultés de créer les conditions pour de telles flammes et de réaliser des mesures précises. Les résultats théoriques se limitent souvent à des cas où la proportion de carburant liquide dans le mélange initial est faible. La simplicité des modèles d'évaporation et de combustion réduit ces études à des analyses qualitatives. Sur le plan numérique, les études existantes visent principalement à modéliser et analyser certains effets complexes comme la chimie détaillée, la polysdispersion du spray, etc., dans des configurations simplifiées.

Études expérimentales

Hayashi et Kumagai [101] ont étudié la combustion de mélanges saturés de gouttes et vapeur d'éthanol dans de l'air au moyen d'une chambre de Wilson. Le dispositif permet de générer par condensation un brouillard saturé quasiment monodisperse dont la teneur en carburant liquide reste faible. Ces auteurs observent que la présence de carburant liquide diminue la vitesse de flamme pour les mélanges pauvres ou stœchiométriques et l'augmente très légèrement en régime riche. Hayashi *et al.* [102] fournissent des résultats pour l'éthanol et le n-octane. Leur étude met en évidence un diamètre de goutte au-dessus duquel la vitesse de flamme augmente en régime riche par rapport au cas monophasique. Ils attribuent cette observation à un effet d'augmentation de la surface effective du front de flamme en présence de gouttelettes suffisamment grosses.

Ballal et Lefebvre [17] ont mesuré la vitesse de propagation laminaire d'une flamme plane dans des mélanges pauvres et stœchiométriques pour divers carburants en minimisant les effets de gravité grâce à un dispositif de chute libre. La proportion de carburant liquide dans le mélange initial varie sur une large gamme et le diamètre moyen de Sauter des gouttes (SMD) va de $30 \mu\text{m}$ à $150 \mu\text{m}$. Quel que soit le carburant, les auteurs observent une diminution de la vitesse de flamme d'autant plus grande que la proportion initiale de liquide est élevée et que le SMD est important. Ils proposent une formule donnant la vitesse de flamme diphasique à partir de la vitesse de flamme gazeuse en basant leur raisonnement sur la comparaison des temps caractéristiques de la flamme. Dans une flamme monophasique, le temps de coïncidence τ_q^* , caractéristique de la diffusion thermique dans le front de flamme, est égal au temps chimique τ_c car il y a équilibre entre le dégagement de chaleur par réaction et les pertes par diffusion.

On en déduit l'expression suivante pour le temps chimique :

$$\tau_c = \tau_q^* = \frac{D_{th}}{S_L^{*2}} \quad (7.1)$$

où D_{th} et S_L^* sont la diffusivité thermique et la vitesse de flamme laminaire monophasique respectivement. Pour une flamme diphasique, le temps de coincement τ_q est fonction de la vitesse de flamme laminaire diphasique S_L :

$$\tau_q = \frac{D_{th}}{S_L^2} \quad (7.2)$$

Les auteurs supposent par ailleurs que le temps de coincement de la flamme diphasique est la somme du temps d'évaporation τ_e et du temps de chimique τ_c :

$$\tau_q = \tau_e + \tau_c \quad (7.3)$$

Ils évaluent le temps d'évaporation τ_e à partir de la loi du d^2 basée sur un nombre de Spalding caractéristique de chaque carburant. En combinant les Eq. 7.1–7.3, la vitesse de flamme diphasique est exprimée alors par :

$$S_L = \left(\frac{\tau_e}{D_{th}} + \frac{1}{S_L^{*2}} \right)^{-\frac{1}{2}} \quad (7.4)$$

Pour un temps d'évaporation court, cette relation prédit une vitesse de flamme proche de la vitesse de flamme gazeuse. À l'inverse, la vitesse de flamme est déterminée par le temps d'évaporation lorsque celui-ci est grand devant le temps chimique.

Études analytiques

Lin *et al.* [137] et Lin et Sheu [138] proposent une solution asymptotique de flamme hétérogène qui suppose une vitesse de glissement nulle et une inflammation des gouttes lorsqu'elles traversent le front de flamme. Par rapport à la combustion homogène, ils constatent une diminution de la vitesse de flamme diphasique en régime pauvre mais une augmentation en régime riche pour des diamètres de gouttes modérés. La principale limitation de leur approche est la faible teneur en carburant liquide dans le mélange réactif. Leur solution analytique de la zone d'évaporation a été utilisée pour calculer la flamme diphasique homogène présentée dans la section 7.2.

Silverman *et al.* [234, 235] et Greenberg *et al.* [95] ont analysé les flammes diphasiques laminares en prenant en compte les effets de coalescence et de polydispersion par une approche sectionnelle [94] dans laquelle le spray est divisée en sections contenant une classe de goutte traitée de façon séparée. Leur étude envisage la combustion de gouttes isolées comme un des mécanismes influençant la propagation de la flamme. Dans une étude complémentaire, Greenberg *et al.* [96] proposent d'appliquer un facteur correctif sur la vitesse de flamme afin de prendre en compte l'augmentation due à la présence du spray conforme à l'observation expérimentale de Hayashi *et al.* [102] mentionnée ci-dessus.

Études numériques

Zhu et Rogg [273] ont simulé numériquement le problème traité de façon analytique par Silverman *et al.* [234, 235]. Le spray est résolu avec une méthode lagrangienne où les aspects polydisperses sont traités avec une approche de type Monte Carlo. La résolution de l'écoulement gazeux est assurée par le code de flamme laminaire monodimensionnelle RUN-1DL avec une chimie simplifiée. Leur étude fait apparaître un diamètre initial de goutte pour lequel la vitesse de flamme est maximale. Ils montrent par ailleurs que l'approximation monodisperse est valable si la distribution initiale de diamètres ne présente qu'un seul maximum.

Versaevel [259] a mené une étude en chimie complexe de flammes diphasiques non étirées sur une grande plage de richesse, diamètre et teneur en carburant liquide. Le spray est résolu au moyen d'une approche eulérienne en moyenne volumique². Ses résultats présentent un bon accord avec les mesures expérimentales de Ballal et Lefebvre [17]. Conformément aux résultats expérimentaux de Hayashi et Kumagai [101] et Hayashi *et al.* [102], ils prédisent, par rapport à la flamme gazeuse, une diminution de la vitesse de flamme en régime pauvre et une augmentation en régime riche. Ces effets sont d'autant plus grand que le diamètre initial de gouttes est élevé et font apparaître une courbe de $S_L(\phi)$ présentant une forme en S près de la limite d'extinction riche. Enfin, l'auteur justifie l'importance de la prise en compte de la vitesse de glissement dans la dynamique de la flamme.

Ben Dakhliia [20] a calculé des flammes de spray en chimie complexe au moyen d'une approche cinétique eulérienne avec des propriétés de transport détaillées. Il confirme la déformation de la courbe $S_L(\phi)$ et l'augmentation de la limite d'extinction riche diphasique observées par Versaevel [259]. Il note que ces effets sont d'autant plus grand que la teneur en carburant liquide est élevée. Ses résultats montrent également que l'épaisseur de flamme augmente avec le diamètre d'injection en régime pauvre mais décroît avec la richesse en régime riche.

Laurent et Massot [128, 129] ont clarifié le formalisme de l'approche sectionnelle initialement proposée par Greenberg *et al.* [94]. Leur étude montre que le modèle eulérien sectionnel fournit des résultats comparable à l'approche lagrangienne dans un calcul de flamme plane contre-courant polydisperse [128]. Ils montrent toutefois que la discrétisation au premier ordre de la distribution de taille de gouttes induit une diffusion numérique importante.

Réveillon et Vervisch [205] ont réalisé des simulations numériques directes lagrangiennes de flammes laminaires diphasiques en configuration bidimensionnelle. Leur analyse illustre l'effet de la richesse initiale du spray sur la structure de flamme. Elle montre ainsi la prédominance d'un régime de combustion partiellement prémélangée avec une évolution vers une structure de flamme triple lorsque le cœur du spray est suffisamment riche.

Les études monodimensionnelles présentées dans ce chapitre ne visent pas à tester une modélisation fine de la physique. Il s'agit plutôt de montrer que le code LES, avec des modèles simples, est capable de reproduire les caractéristiques essentielles de la combustion diphasique dans des configurations simplifiées où la précision du calcul peut être facilement quantifiée.

²par opposition à l'approche statistique utilisée dans la présente étude (cf. chapitre 3)

7.1.4 Equations de conservation

Les hypothèses du problème de flamme plane diphasique sont les suivantes :

- régime stationnaire,
- problème à une dimension,
- pas de gravité,
- échauffement visqueux négligeable.

Les équations de Navier-Stokes décrites dans la partie I se présentent alors sous la forme suivante :

Phase gazeuse :

$$\frac{d}{dx}\rho u = \Gamma \quad (7.5)$$

$$\frac{d}{dx}\rho u Y_k = -\frac{dJ_{x,k}}{dx} + \delta_{kF}\Gamma + \dot{\omega}_k \quad (7.6)$$

$$\frac{d}{dx}\rho u^2 = -\frac{dP}{dx} + \frac{d\tau_{xx}}{dx} - F_d + \Gamma\check{u}_l \quad (7.7)$$

$$\frac{d}{dx}\rho u E = -\frac{dPu}{dx} - \frac{dq_x}{dx} + \Lambda + \Phi + u(\Gamma\check{u}_l - F_d) + \dot{\omega}_T \quad (7.8)$$

avec le flux visqueux $\tau_{xx} = \frac{4}{3}\mu\frac{du}{dx}$, le flux diffusif d'espèces $J_{x,k} = \rho Y_k (V_x^k + V_x^c)$ et le flux diffusif de chaleur $q_x = -\lambda\frac{dT}{dx} + \sum_{k=1}^N J_{x,k} h_{s,k}$. Ces flux ainsi que les différents termes sources sont détaillés dans la partie I.

Phase liquide :

$$\frac{d}{dx}\check{n}_l\check{u}_l = 0 \quad (7.9)$$

$$\frac{d}{dx}\rho_l\check{\alpha}_l\check{u}_l = -\Gamma \quad (7.10)$$

$$\frac{d}{dx}\rho_l\check{\alpha}_l\check{u}_l^2 = -\Gamma\check{u}_l - F_d \quad (7.11)$$

$$\frac{d}{dx}\rho_l\check{\alpha}_l\check{u}_l\check{h}_{s,l} = -\Lambda - \Phi \quad (7.12)$$

avec les conditions aux limites suivantes :

Entrée : injection (vitesse, température et composition fixées) d'un mélange diphasique non saturé, dans le cas de la flamme homogène (section 7.2.4) ou saturé froid dans le cas de la flamme saturée (section 7.3.1)

Sortie : pression imposée

7.2 Flamme diphasique homogène

7.2.1 Configuration

La flamme homogène est la configuration la plus simple incluant effets diphasiques et réaction de combustion (cf. section 7.1.2). La Fig. 7.2 illustre le principe de ce type de flamme :

- une injection diphasique en $x = x_0$ produisant un spray qui s'évapore intégralement avant $x = x_{ev}$;
- un écoulement purement gazeux parfaitement prémélangé ($x_{ev} \leq x < x_f$) qui alimente une flamme de prémélange gazeuse ($x = x_f$) ;
- un écoulement en aval de la flamme ($x_f < x \leq x_2$) constitué de gaz brûlés à l'équilibre thermodynamique en $x = x_2$.

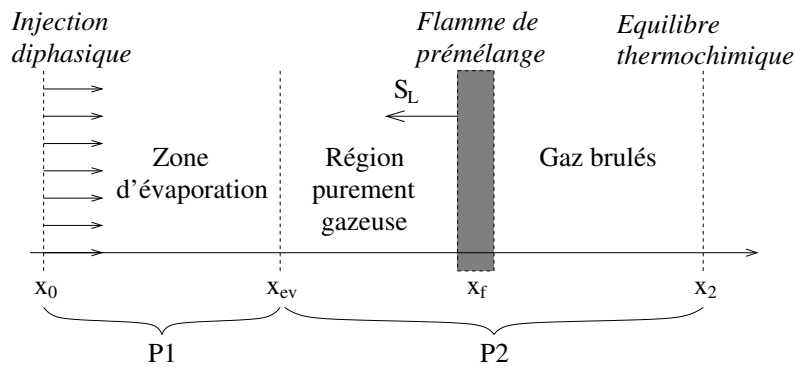


FIG. 7.2 - Schéma de la flamme diphasique homogène

La section 7.2.2 précise les définitions des différentes richesses qui caractérisent un mélange diphasique. La section 7.2.3 décrit la solution analytique du problème qui sert de référence pour évaluer les prédictions du code AVBP. Enfin, après avoir fourni les paramètres du calcul (section 7.2.4), on présente les résultats comparant les calculs AVBP à la solution analytique dans la section 7.2.5.

7.2.2 Définition des richesses pour un mélange diphasique

On rappelle l'Eq. 4.129 qui définit la richesse du mélange d'un carburant gazeux F avec l'oxydant O contenu dans l'air :

$$\phi = s \frac{Y_F}{Y_O} \quad (7.13)$$

Afin de prendre en compte la contribution du carburant liquide à la richesse, on exprime la fraction massique de carburant liquide (appelée aussi charge massique de liquide) :

$$Y_{F,l} = \frac{\text{masse de carburant liquide}}{\text{masse du gaz}} = \frac{\rho_l \check{\alpha}_l}{\rho} \quad (7.14)$$

La richesse liquide s'exprime alors comme :

$$\phi_l = s \frac{Y_{F,l}}{Y_O} = s \frac{\rho_l \check{\alpha}_l}{\rho Y_O} \quad (7.15)$$

La somme de la fraction massique gazeuse et liquide de carburant est appelée fraction massique totale de carburant et notée $Y_{F,t}$:

$$Y_{F,t} = Y_F + Y_{F,l} \quad (7.16)$$

La somme de la richesse gazeuse et liquide définit la richesse totale du mélange diphasique :

$$\phi_t = \phi + \phi_l = s \frac{Y_{F,t}}{Y_O} = s \frac{\frac{\rho_l \check{\alpha}_l}{\rho} + Y_F}{Y_O} \quad (7.17)$$

La richesse totale possède la propriété de rester constante dans un mélange diphasique qui est seulement évaporé et convecté (sans diffusion moléculaire et sans différentiel de vitesse gaz/liquide). On définit enfin le paramètre Ω qui compare la masse de carburant gazeux à la masse totale de carburant dans le mélange :

$$\Omega = \frac{\rho Y_F}{\rho_l \check{\alpha}_l + \rho Y_F} = \frac{Y_F}{Y_{F,t}} = \frac{\phi}{\phi_t} \quad (7.18)$$

Ω permet de distinguer les flammes pour lesquelles l'injection est purement liquide ($\Omega = 0$) des flammes purement gazeuses ($\Omega = 1$).

Lorsqu'on utilise les Eq. 7.13, 7.15 et 7.17 pour caractériser la richesse locale d'un écoulement réactif, on rencontre un problème dans les gaz brûlés en régime riche où la fraction massique d'oxydant tend vers zéro. Pour la richesse gazeuse, on préfère alors l'expression suivante basée sur la fraction de mélange [197] :

$$\phi = \frac{z}{1-z} \frac{1-z_{st}}{z_{st}} \quad (7.19)$$

où z est un scalaire passif normalisé définit par :

$$z = \frac{sY_F - Y_O + Y_O^0}{sY_F^0 + Y_O^0} \quad (7.20)$$

où Y_F^0 est la valeur de Y_F dans l'écoulement amenant le carburant, Y_O^0 est la valeur de Y_O dans l'écoulement amenant l'oxydant et z_{st} est la valeur de z à la stœchiométrie :

$$z_{st} = \frac{Y_O^0}{sY_F^0 + Y_O^0} \quad (7.21)$$

Si on considère que le mélange est obtenu à partir d'un écoulement de JP10 pur et d'un écoulement d'air pur, on a : $Y_{JP10}^0 = 1$, $Y_O^0 = 0.233$ et $z_{st} = 6.617 \times 10^{-2}$.

Remarque : Imposer simplement $\phi_t(x = x_0) = \phi_{t,0}$ en entrée ne suffit pas pour obtenir $\phi_{ev} = \phi(x = x_{ev}) = \phi_{t,0}$ après évaporation totale du spray. En effet, contrairement au cas de la flamme de prémélange gazeuse (cf. section 4.7) ou de la flamme diphasique saturée (cf. section 7.3), la condition d'entrée de la flamme diphasique homogène comporte des gradients importants du fait de l'évaporation qui démarre dès $x = x_0$. En particulier, le gradient de fraction massique de carburant est responsable du flux diffusif de carburant gazeux :

$$J_{x,F}^0 = - \left[[\rho D_F] \frac{W_F}{W} \frac{\partial X_F}{\partial x} - \rho V_c Y_F \right]_0 \quad (7.22)$$

$$\text{estimé ici par : } J_{x,F}^0 \approx - \left[[\rho D_F] \frac{dY_F}{dx} \right]_0 \quad (7.23)$$

où l'indice 0 désigne l'entrée. Afin de contrôler précisément le flux massique entrant de carburant, on cherche à compenser le flux diffusif gazeux sortant $J_{x,F}^0$ par le flux convectif gazeux entrant :

$$G_{x,F}^c = [\rho u Y_F^c]_0 \quad (7.24)$$

où la correction de fraction massique de carburant Y_F^c est telle que :

$$J_{x,F}^0 + G_{x,F}^c = 0 \quad (7.25)$$

La condition de l'Eq. 7.25 assure que la richesse gazeuse du mélange après évaporation complète est bien égale à la richesse liquide du mélange injecté : $\phi_{ev} = \phi_{t,0}$. En pratique, cette condition est appliquée en corrigeant la fraction massique de carburant dans le mélange gazeux injecté de la manière suivante :

$$Y_{F,0}' = Y_{F,0} + Y_F^c \quad (7.26)$$

où $Y_{F,0}$ est fonction de la richesse gazeuse d'injection ϕ_0 (cf. Eq. 7.13) :

$$Y_{F,0} = \frac{\phi_0}{s} Y_{O,0} \quad (7.27)$$

avec $Y_{O,0}$ la fraction massique d'oxydant en entrée (à ne pas confondre avec Y_O^0 dans l'Eq. 7.20).

7.2.3 Solution analytique

Les zones d'évaporation et de combustion étant séparées dans l'espace, on peut découper le problème en deux sous-problèmes (cf. Fig. 7.2) :

P1 : un écoulement non réactif où le spray s'évapore dans l'air ($x_0 \leq x < x_{ev}$);

P2 : un écoulement purement gazeux où se propage une flamme de prémélange stationnaire ($x_{ev} \leq x \leq x_2$).

Les deux problèmes sont raccordés en prenant la condition de sortie de P1 comme condition d'entrée pour P2. La stationnarité du problème est assurée si la vitesse de propagation de la flamme de prémélange S_L est égale à la vitesse de l'écoulement en $x = x_{ev}$:

$$u(x_{ev}) = S_L \quad (7.28)$$

La valeur S_L peut être fournie par une formule analytique issue de l'analyse asymptotique telle que celle proposée par Mitani [168]. Toutefois, pour faciliter la comparaison avec AVBP, S_L a été fixée par le calcul d'une flamme de prémélange gazeuse avec PREMIX (cf. section 4.7.2) à partir des conditions obtenues en $x = x_{ev}$ car elle est plus proche de la vitesse de flamme prédite par AVBP.

P1 : zone d'évaporation ($x_0 \leq x < x_{ev}$)

Cette section décrit de façon succincte la méthode de résolution analytique du problème d'évaporation monodimensionnel proposée initialement par Lin *et al.* [137, 138]. La démonstration est détaillée dans le rapport de stage de C. Saulnier [218]. La formulation présentée ici a été adaptée par l'auteur au formalisme multi-espèces adopté dans les versions courantes d'AVBP. On rappelle les hypothèses simplificatrices du problème :

- nombre de Spalding constant : $B_M = B_{M,0}$,
- température constante dans la phase liquide : $\check{T}_l = T_{l,0}$,
- même vitesse pour les deux phases : $St \equiv 0$,
- pression constante : $P = P_0$,
- régime stationnaire : $\frac{\partial}{\partial t} \equiv 0$,
- diffusion moléculaire suivant la loi de Fick avec un coefficient de diffusion : $[\rho D_F] = cste$,
- diffusion thermique suivant la loi de Fourier avec une conductivité : $\lambda = cste$.

où l'indice 0 désigne les conditions d'entrée (cf. Fig. 7.2). Sous ces hypothèses, le problème est décrit par le système suivant :

$$(\rho + \rho_l \check{\alpha}_l) u = cste = F_0 \quad (7.29)$$

$$\rho u \frac{dY_F}{dx} - [\rho D_F] \frac{d^2 Y_F}{dx^2} = (1 - Y_F) \Gamma \quad (7.30)$$

$$\rho u \frac{dh_s}{dx} - \lambda \frac{d^2 T}{dx^2} = -(h_s - \check{h}_{s,l}) \Gamma \quad (7.31)$$

où l'enthalpie du carburant liquide est constante et vaut : $\check{h}_{s,l} = h_{l,0} = h_{s,F}(T_{l,0}) - L_v$. On définit le changement de variable suivant :

$$\beta = \frac{1 - Z}{1 - Z_0} \quad (7.32)$$

$$\text{avec : } Z = \frac{\rho}{\rho + \rho_l \check{\alpha}_l} \quad (7.33)$$

On note par ailleurs qu'on a $\check{\alpha}_l(x_{ev}) = 0$, d'où :

$$F_0 = [\rho u]_{ev} \quad (7.34)$$

où u_{ev} est donné par l'Eq. 7.28 et ρ_{ev} vaut :

$$\rho_{ev} = \frac{P_0 \bar{W}_{ev}}{\mathcal{R} T_{ev}} \quad (7.35)$$

où \bar{W}_{ev} et T_{ev} sont exprimés en fonction de $Y_{F,ev}$ et $h_{s,ev}$ par :

$$\bar{W}_{ev} = Y_{F,ev} W_F + (1 - Y_{F,ev}) W_{air} \quad (7.36)$$

$$h_{s,ev} = Y_{F,ev} h_{s,F}(T_{ev}) + (1 - Y_{F,ev}) h_{s,air}(T_{ev}) \quad (7.37)$$

où W_F , W_{air} , $h_{s,F}(T_{ev})$ et $h_{s,air}(T_{ev})$ sont les masses molaires et les enthalpies sensibles à T_{ev} du carburant et de l'air respectivement. Dans l'Eq. 7.37, $h_{s,ev}$ et $Y_{F,ev}$ sont évalués par les expressions suivantes :

$$h_{s,ev} = Z_0 h_{s,0} + (1 - Z_0) h_{l,0} \quad (7.38)$$

$$Y_{F,ev} = \left(1 + \frac{s}{Y_{O_2}^0 \phi_t}\right)^{-1} \quad (7.39)$$

L'Eq. 7.38 est obtenue par intégration de l'Eq. 7.31 entre x_0 et x_{ev} en négligeant le flux conductif $-\lambda \frac{dT}{dx}$. Dans l'Eq. 7.39, $Y_{O_2}^0$ est la fraction massique de dioxygène dans l'air : $Y_{O_2}^0 = Y_{O_2}^{air} = 0.233$ et ϕ_t est la richesse totale (cf. section 7.2.2). Enfin, on pose :

$$\sigma_Y = \frac{[\rho D_F]}{F_0} \quad \text{et} \quad \sigma_T = \frac{\lambda}{F_0} \quad (7.40)$$

Avec le changement de variable (Eq. 7.32), on peut alors exprimer le système 7.29 – 7.31 sous la forme suivante :

$$-\frac{d\beta}{dx} + (1 - Z_0) \beta \frac{d\beta}{dx} = \frac{\mathcal{A}}{T} \beta^{1/3} \quad (7.41)$$

$$\frac{dY_F}{dx} - (1 - Z_0) \frac{d}{dx} \beta Y_F - \sigma_Y \frac{d^2 Y_F}{dx^2} = -(1 - Z_0) \frac{d\beta}{dx} \quad (7.42)$$

$$\frac{dh_s}{dx} - (1 - Z_0) \frac{d}{dx} \beta h_s - \sigma_T \frac{d^2 T}{dx^2} = -\check{h}_{s,l}^0 (1 - Z_0) \frac{d\beta}{dx} \quad (7.43)$$

$$\text{avec : } \mathcal{A} = \frac{6P_0 \bar{W}_0 S h[\rho D_F] \ln(1 + B_{M,0})}{\mathcal{R} \rho_l d_0^2 F_0} = cste \quad (7.44)$$

avec les conditions aux limites suivantes :

$$\begin{cases} \beta(x_0) = 1 & ; & \beta(x_{ev}) = 0 \\ Y_F(x_0) = Y_{F,0} & ; & Y_F(x_{ev}) = Y_{F,ev} \\ h_s(x_0) = h_{s,0} & ; & h_s(x_{ev}) = h_{s,ev} \end{cases} \quad (7.45)$$

La résolution à l'ordre 0 de l'Eq. 7.41 donne une approximation de β :

$$\beta^0(x) = \left(1 - \frac{2\mathcal{A}}{3T_0} x\right)^{3/2} \quad (7.46)$$

La résolution à l'ordre 0 puis à l'ordre 1 des Eq. 7.42 et 7.43 aboutit aux expressions suivantes :

$$Y_F(x) = Y_{F,0} + (Y_{F,ev} - Y_{F,0}) \left(1 - e^{-\frac{x-x_0}{\sigma_Y}} \frac{I_Y(x)}{I_Y(x_0)}\right) \quad (7.47)$$

$$T(x) = T_0 + (T_{ev} - T_0) \left(1 - e^{-\frac{x-x_0}{\sigma_T}} \frac{I_T(x)}{I_T(x_0)}\right) \quad (7.48)$$

avec :

$$I_Y(x) = \int_x^{x_{ev}} e^{-\frac{x'-x_0}{\sigma_Y}} \beta^0(x') dx' \quad (7.49)$$

$$I_T(x) = \int_x^{x_{ev}} e^{-\frac{x'-x_0}{\sigma_T}} \beta^0(x') dx' \quad (7.50)$$

Remarque : Afin de respecter la condition exprimée par l'Eq. 7.25, il est nécessaire d'imposer la valeur corrigée de $Y_F(x_0)$ dans l'Eq. 7.45. D'après l'Eq. 7.26 et en négligeant les effets du flux diffusif, on a :

$$Y(x_0) = Y'_{F,0} = Y_{F,0} + \sigma_Y (1 - Y_{F,0}) \frac{1 - Z_0}{Z_0^2} \frac{\mathcal{A}}{T_0} \quad (7.51)$$

où $Y_{F,0}$ est donné par l'Eq. 7.27.

P2 : flamme de prémélange ($x_{ev} \leq x \leq x_2$)

Les valeurs de T_{ev} et $Y_{k,ev}$ calculées lors de la résolution du problème P1 sont utilisées en combinaison avec la condition de pression constante p_0 et la condition de vitesse $u_{ev} = S_L$ (Eq. 7.28). Les hypothèses du problème P2 sont les suivantes :

- nombre de Lewis unitaire pour toutes les espèces : $Le_k = 1$;
- l'épaisseur de flamme est donnée par la formule de Blint (Eq. 7.88) ;
- le profil de température réduite Θ (équivalente au taux d'avancement) est de type tangente hyperbolique (tanh) ou bien imposé par la formule asymptotique d'Echekki et Ferziger [69]. Dans le cas présent, le profil de type tanh présente un meilleur accord avec la solution calculée par AVBP.

Connaissant le profil $\Theta(x)$, on calcule la température et les fractions massiques des espèces de la façon suivante :

$$T(x) = \Theta(x) (T_2 - T_{ev}) + T_{ev} \quad (7.52)$$

$$Y_k(x) = Y_{k,ev} - \Theta(x) Y_{L,ev} \frac{W_k \nu_k}{W_L \nu_L} \quad (7.53)$$

où l'indice L désigne le réactif en défaut dans le mélange à $x = x_{ev}$:

$$\begin{cases} L = F & \text{si } \phi_{ev} \leq 1 \\ L = O & \text{si } \phi_{ev} > 1 \end{cases} \quad (7.54)$$

T_2 est la température des gaz brûlés que l'on cherche à exprimer en intégrant les équations de conservation 1D stationnaires des espèces et de l'enthalpie sensible h_s de la façon suivante :

$$\int_{x_{ev}}^{x_2} d(\rho u Y_k) = \int_{x_{ev}}^{x_2} dJ_{x,k} + \int_{x_{ev}}^{x_2} \dot{\omega}_k dx \quad (7.55)$$

$$\int_{x_{ev}}^{x_2} d(\rho u h_s) = \int_{x_{ev}}^{x_2} dq_x + \int_{x_{ev}}^{x_2} d(\rho u P) + \int_{x_{ev}}^{x_2} \dot{\omega}_T dx \quad (7.56)$$

$J_{x,L}(x_{ev}) = J_{x,L}(x_2) = 0$ et $q_x(x_{ev}) = q_x(x_2) = 0$ car les gradients d'espèces et de température sont nuls en x_{ev} et x_2 . De plus, on a $\rho u P = F_0 P_0$ d'où $d(\rho u P) = 0$. Enfin, on rappelle l'Eq. 2.43 qui exprime le taux de dégagement de chaleur $\dot{\omega}_T$:

$$\dot{\omega}_T = - \sum_{k=1}^N \Delta h_{f,k}^0 \dot{\omega}_k \quad (7.57)$$

Après simplification par F_0 , on obtient :

$$\int_{x_{ev}}^{x_2} dY_k = \int_{x_{ev}}^{x_2} \dot{\omega}_k dx \quad (7.58)$$

$$\int_{x_{ev}}^{x_2} dh_s = - \sum_{k=1}^N \Delta h_{f,k}^0 \int_{x_{ev}}^{x_2} \dot{\omega}_k dx \quad (7.59)$$

Soit, en utilisant l'Eq. 7.53 avec $\Theta(x_2) = 1$:

$$Y_{k,2} = Y_{k,ev} - Y_{L,ev} \frac{W_k \nu_k}{W_L \nu_L} \quad (7.60)$$

$$h_{s,2} = h_{s,ev} + \frac{Y_{L,ev}}{W_L \nu_L} \sum_{k=1}^N \Delta h_{f,k}^0 W_k \nu_k \quad (7.61)$$

On obtient finalement T_2 à partir de l'Eq. 2.15 en prenant $T = T_2$:

$$h_{s,2} = \sum_{k=1}^N Y_{k,2} h_{s,k}(T_2) \quad (7.62)$$

Connaissant Y_k et T , on déduit ρ et u :

$$\rho(x) = \frac{p_0 \overline{W}(x)}{\mathcal{R}T(x)} \quad (7.63)$$

$$u(x) = \frac{F_0}{\rho(x)} = S_L \frac{\rho_{ev}}{\rho(x)} \quad (7.64)$$

7.2.4 Paramètres de calcul

Le carburant utilisé est le JP10 dont les propriétés physico-chimiques sont décrites dans la section 4.7. Le calcul AVBP est initialisé au moyen de la solution analytique. Les paramètres physiques du calcul (cf. Tab. 7.1) sont choisis de façon à respecter au plus près les hypothèses de la solution analytique détaillée dans la section 7.2.3. En particulier, la température liquide à l'injection est fixée de sorte que la variation de température liquide dans la zone d'évaporation soit faible. Afin d'atteindre la richesse totale effective $\phi_{t,0}$ en fin d'évaporation, il est nécessaire d'appliquer la richesse corrigée $\phi'_{t,0}$ (cf. section 7.2.2).

Conditions d'entrée		
Température du gaz :	T_0	= 450 K
Vitesse gaz et liquide :	$u_0 = u_{l,0}$	= 0.5071 m.s ⁻¹
Température du spray :	$T_{l,0}$	= 385 K
Diamètre des gouttes :	d_0	= 20 μm
Richesse totale :	$\phi_{t,0}$	= 0.7
Paramètre Ω :	Ω_0	= 0
Richesse totale corrigée :	$\phi'_{t,0}$	= 0.710
Paramètre Ω corrigé :	Ω'_0	= 1.43×10^{-2}
Condition de sortie		
Pression	P_0	= 1 atm
Condition initiale		
Solution analytique (cf. section 7.2.3)		

TAB. 7.1 - Paramètres du calcul de flamme homogène diphasique

7.2.5 Résultats

La Fig. 7.3 illustre le caractère homogène de la flamme. Sur la Fig. 7.3a, on observe l'apparition de l'espèce JP10 dans la phase gazeuse par évaporation de la phase liquide puis sa disparition totale par réaction chimique dans la flamme. Lors de l'évaporation, la richesse liquide diminue jusqu'à zéro au profit de la richesse gazeuse. Le flux diffusif de carburant gazeux valant :

- $J_{x,F}(x_0) = J_{x,F}^0 < 0$, en entrée (cf. remarque de la section 7.2.2),
- $J_{x,F}(x_{ev}) = 0$, à la fin de l'évaporation,

on aboutit à un déficit de carburant entre l'entrée et la sortie de la zone d'évaporation qui se traduit par une légère diminution de la richesse totale. Cet effet est prédit tant par la solution analytique que par AVBP. D'autre part, la flamme calculée avec AVBP présente une variation de la richesse totale à travers le front de flamme en raison de la diffusion différentielle des espèces (les S_{C_k} varient en fonction de k), effet non pris en compte dans la solution analytique.

Dans un premier temps, la température gazeuse (Fig. 7.4a) décroît lentement en raison du transfert de chaleur par évaporation puis augmente brusquement à travers le front de flamme sous l'effet du dégagement de chaleur de la réaction. Sur la Fig. 7.4b, on observe l'accélération de l'écoulement due à l'expansion des gaz brûlés. Pour tous ces profils caractérisant la phase gazeuse, la comparaison entre les résultats d'AVBP et la solution analytique est excellente.

Dans la phase liquide, l'évaporation se traduit par une diminution du diamètre de goutte comme le montre la Fig. 7.5. En raison de la raideur du modèle d'évaporation lorsque le diamètre tend vers 0, on fixe un diamètre seuil en dessous duquel le terme source d'évaporation est coupé. Ici, avec un seuil de 2 μm pour un diamètre initial de 20 μm , 99.9% de la masse liquide est effectivement évaporée. Lorsque la température de la phase liquide est constante, l'évaporation se fait selon la loi dite du d^2 (cf. section 3.3.2). L'écart que présente AVBP vis-à-vis de la loi du d^2 correspond aux variations de la

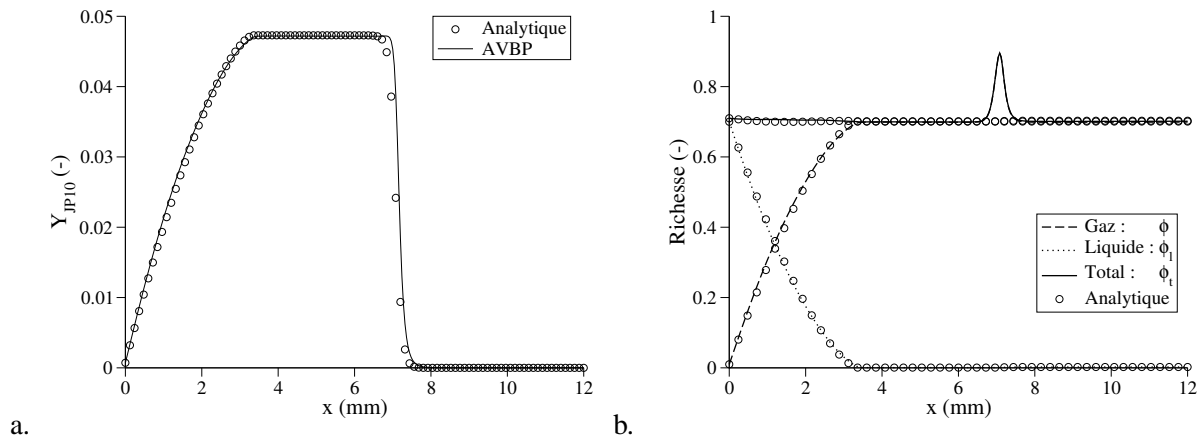


FIG. 7.3 - Profils de fraction massique de carburant (a.) et de richesse (b.)

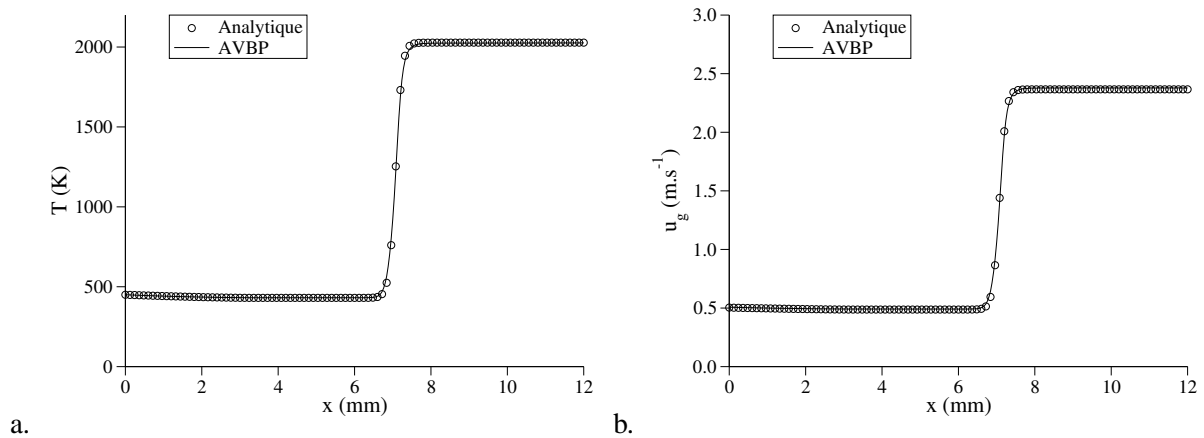


FIG. 7.4 - Profils de température (a.) et de vitesse (b.) de la phase gazeuse

température liquide illustrée sur la Fig. 7.6a. Ces variations dépendent directement du flux conductif Φ_l entrant dans la phase liquide (Fig. 7.6b). Elles se traduisent par une courte zone de chauffage par la phase gazeuse, suivie d'une phase plus étendue de refroidissement due à la diminution de la température du gaz. Ces variations restant de l'ordre de quelques degrés Kelvin, l'accord entre AVBP et la solution analytique reste excellent, en particulier pour la distance d'évaporation.

Les profils de fractions massiques d'espèces réactives calculés par AVBP (Fig. 7.7) sont également en très bon accord avec la solution analytique. Les seules différences notables se situent dans la zone de réaction où le nombre de Schmidt élevé du carburant ($Sc_{JP10} = 1.9$) induit des effets de diffusion différentielle observables sur le profil de Y_{JP10} (cf. Fig. 7.3a). La structure de flamme de cette zone de réaction correspond précisément à celle d'une flamme de prémélange purement gazeuse.

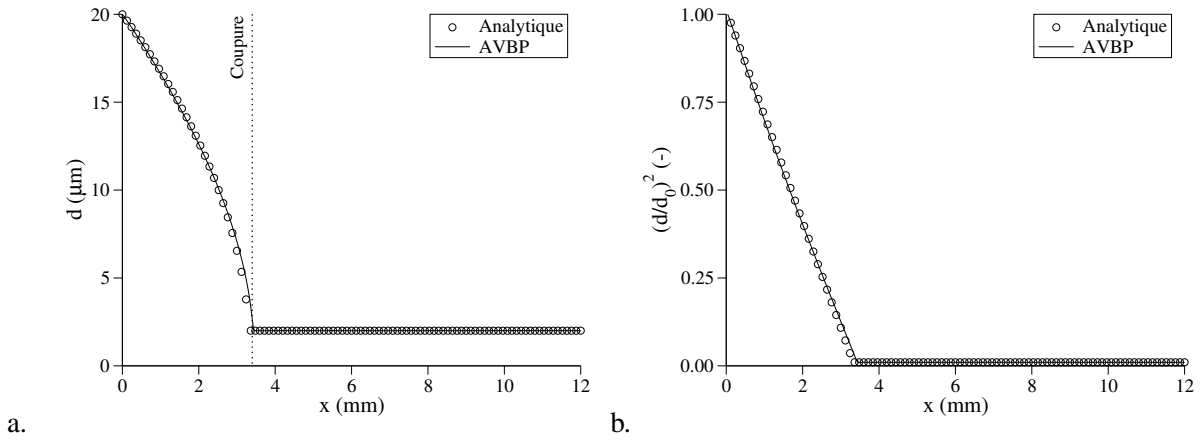


FIG. 7.5 - Profils de diamètre de goutte (a.) et de surface de goutte sans dimension (b.)

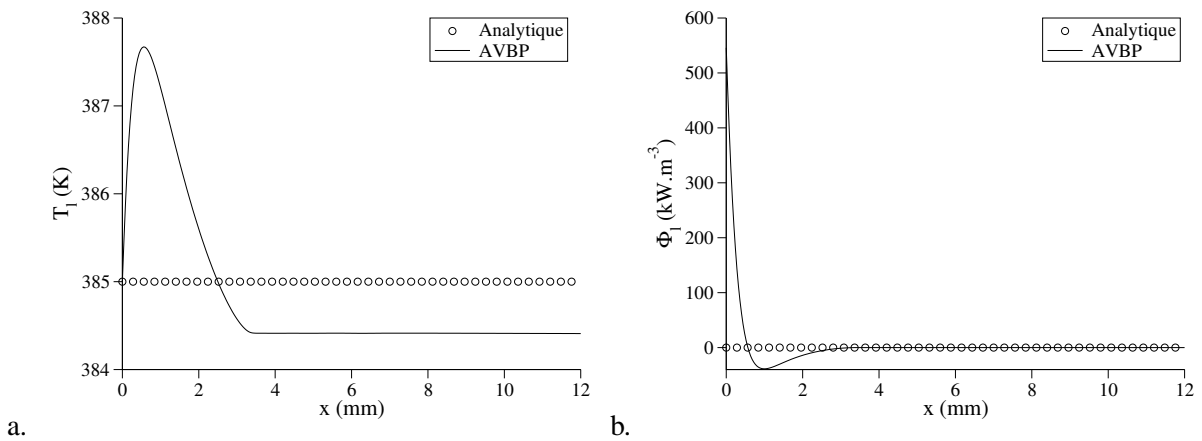


FIG. 7.6 - Profils de température de goutte (a.) et flux de chaleur conductif liquide (b.)

Afin d’observer l’effet du spray liquide sur la flamme, une flamme plane purement gazeuse de JP10 a été calculée. Pour maintenir une équivalence avec la flamme diphasique, les propriétés suivantes ont été conservées :

- schéma cinétique identique,
- température d’entrée et pression de sortie identiques,
- richesse gazeuse égale à la richesse liquide d’entrée.

Le tableau 7.2 compare les caractéristiques globales de la flamme gazeuse et de la flamme diphasique.

L’écart de 16 K sur la température adiabatique de flamme est due à l’énergie cédée par le gaz lors de l’évaporation et correspond à la chaleur latente d’évaporation prédite analytiquement. Cette différence entraîne une diminution d’environ 5% de la vitesse de flamme dans le cas diphasique. La flamme s’en retrouve alors épaissie d’environ 2.5%.

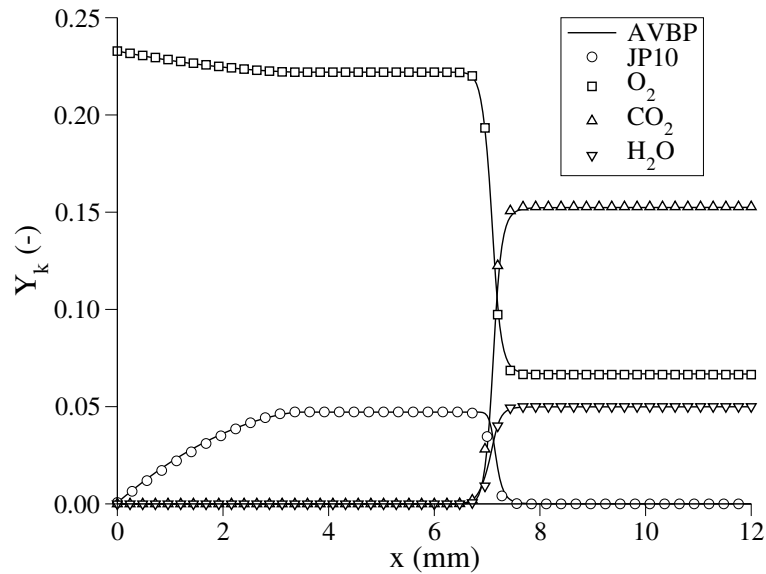


FIG. 7.7 - Profils de fractions massiques des espèces gazeuses réactives obtenus avec la solution analytique (symboles) et AVBP (traits pleins)

	Flamme diphasique homogène	Flamme gazeuse
S_L ($m.s^{-1}$)	0.507	0.536
T_2 (K)	2026	2042
δ_L (mm)	0.377	0.368

TAB. 7.2 - Comparaison entre la flamme diphasique homogène et la flamme purement gazeuse à $\phi = 0.7$

7.2.6 Conclusion

Ce cas test valide la capacité d'AVBP à prédire la combustion dans un écoulement diphasique dans le cas parfaitement homogène. Les calculs sont conformes aux prédictions de la solution analytique tant pour l'écoulement gazeux que pour la phase liquide. Dans cette configuration, l'effet du spray sur la flamme est cependant limité. Il se réduit à un couplage par convection de l'état aval de la zone d'évaporation à l'état amont de la flamme prémélangée gazeuse. La vitesse de flamme reste très proche de celle d'une flamme gazeuse équivalente. La température des gaz brûlés est légèrement inférieure, ce qui peut avoir une importance lorsqu'on étudie les émissions d'espèces polluantes. Dans le cas de la flamme hétérogène, en revanche, on s'attend à ce que le couplage intime entre évaporation et combustion modifie fortement les propriétés globales de la flamme.

7.3 Flamme diphasique saturée

On s'intéresse particulièrement au cas de la flamme plane saturée car il est représentatif du régime de combustion que l'on rencontre dans les séquences d'allumages telles que celles étudiées dans le chapitre 9 et la partie IV. En effet, pour des conditions de faible température ambiante, le processus d'évaporation est figé car les conditions de saturation sont atteintes à l'interface liquide/air. La Fig. 7.8 illustre la configuration d'une onde de déflagration plane se propageant un mélange diphasique saturé. Dans ce cas, le carburant gazeux de fraction massique Y_F présent dans l'écoulement amont est négligeable et l'essentiel du carburant consommé au taux $\dot{\omega}_F$ par la réaction est fourni au taux Γ par l'évaporation du carburant liquide qui a lieu dans la zone amont de la flamme. La vitesse de propagation S_L , l'épaisseur de flamme δ_L et la température adiabatique de flamme T_2 seront donc fortement influencées par la présence du spray.

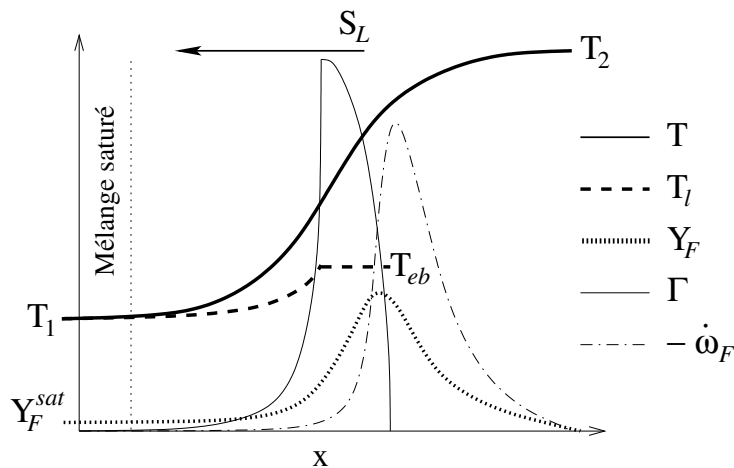


FIG. 7.8 - Schéma d'une flamme plane saturée diphasique se propageant à la vitesse S_L

Dans le cas de la flamme saturée, il est essentiel de prendre en compte les variations des conditions thermodynamiques à la surface des gouttes. Contrairement à la flamme homogène, la température du liquide ne peut pas être supposée constante car ses variations jouent un rôle important dans la dynamique du processus d'évaporation. Une flamme saturée stationnaire s'obtient en choisissant les conditions aux limites telles que :

- le mélange diphasique injecté soit saturé (cf. section 7.3.1) ;
- la vitesse d'injection soit égale à la vitesse de consommation (cf. section 7.3.2).

7.3.1 Mélange diphasique saturé

La saturation d'un mélange diphasique a lieu lorsque les transferts de masse et de chaleur entre les phases gazeuse et liquide sont nuls. On l'exprime donc en annulant les termes sources dus à l'évaporation dans les équations de conservation (Eq. 7.5-7.12) :

Transfert de masse : D'après l'Eq. 3.64, $\Gamma = 0$ équivaut à $B_M = 0$ soit $Y_{F,\zeta} = Y_F$. Autrement dit, l'évaporation cesse lorsque s'annule le transport diffusif du carburant gazeux de la surface de la goutte vers l'air ambiant. En remplaçant $Y_{F,\zeta}$ par Y_F dans l'Eq. 3.68, on obtient l'expression de la fraction massique de carburant en fonction de la pression partielle de carburant à la surface de la goutte :

$$Y_F = \frac{P_{F,\zeta} W_F}{P \bar{W}_\zeta} \quad (7.65)$$

La relation de Clausius-Clapeyron (Eq. 3.71) fournit la pression partielle $P_{F,\zeta}$ en fonction de la température de la goutte T_l .

Transfert de chaleur : La condition $\Lambda = \Gamma h_{F,\zeta} = 0$ (annulation du flux de chaleur par changement de phase) est déjà vérifiée. D'après l'Eq. 3.74, la condition $\Phi = 0$ (annulation du flux de chaleur par conduction gaz/liquide) est vérifiée lorsque la température du liquide et du gaz s'égalisent : $T_l = T$.

Le mélange est donc saturé si les conditions suivantes sont réunies :

$$T = T_l = T^{sat} \quad (7.66)$$

$$Y_F = Y_F^{sat} = \frac{W_F}{\bar{W}_\zeta} X_F^{sat} \quad (7.67)$$

$$\text{avec : } X_F^{sat} = \frac{P_{cc}}{P} \exp\left(\frac{W_F L_v}{\mathcal{R}} \left(\frac{1}{T_{cc}} - \frac{1}{T^{sat}}\right)\right) \quad (7.68)$$

Dans l'Eq. 7.67, la masse molaire \bar{W}_ζ est fonction du mélange gazeux à l'interface. Si l'on suppose que le carburant s'évapore dans de l'air pur, on peut exprimer Y_F^{sat} uniquement en fonction de $X_F^{sat} = X_F^{sat}(P, T^{sat})$:

$$Y_F^{sat} = \frac{W_F X_F^{sat}}{W_F X_F^{sat} + W_{air} (1 - X_F^{sat})} \quad (7.69)$$

On en déduit la richesse gazeuse atteinte lors de la saturation :

$$\phi^{sat} = s \frac{Y_F^{sat}}{Y_O^{sat}} = s \frac{Y_F^{sat}}{0.233 (1 - Y_F^{sat})} \quad (7.70)$$

Y_F^{sat} et ϕ^{sat} représentent respectivement les valeurs maximales de la fraction massique de carburant et de la richesse gazeuse que peut produire par évaporation un mélange diphasique. Ces grandeurs sont donc particulièrement importantes lorsqu'on s'intéresse à l'allumage de ce mélange. Pour une pression donnée, Y_F^{sat} et ϕ^{sat} dépendent fortement de la température du gaz comme le montrent les Fig. 7.9a et 7.9b.

Lorsqu'on injecte un spray dont la richesse liquide est supérieure à ϕ^{sat} , l'évaporation est stoppée par la saturation du mélange diphasique. Dans les conditions d'injection typiques de l'allumage d'une chambre aéronautique ($T = 273 \text{ K}$, $p = 1.18 \text{ bar}$), la Fig. 7.9 montre que le mélange est très faiblement évaporé avant saturation. Les conditions saturées de la flamme plane étudiée sont fournies par un calcul 0D où le mélange dans les conditions d'allumage est évaporé à volume constant. Le tableau 7.3 montre que le mélange obtenu contient très peu de vapeur de carburant.

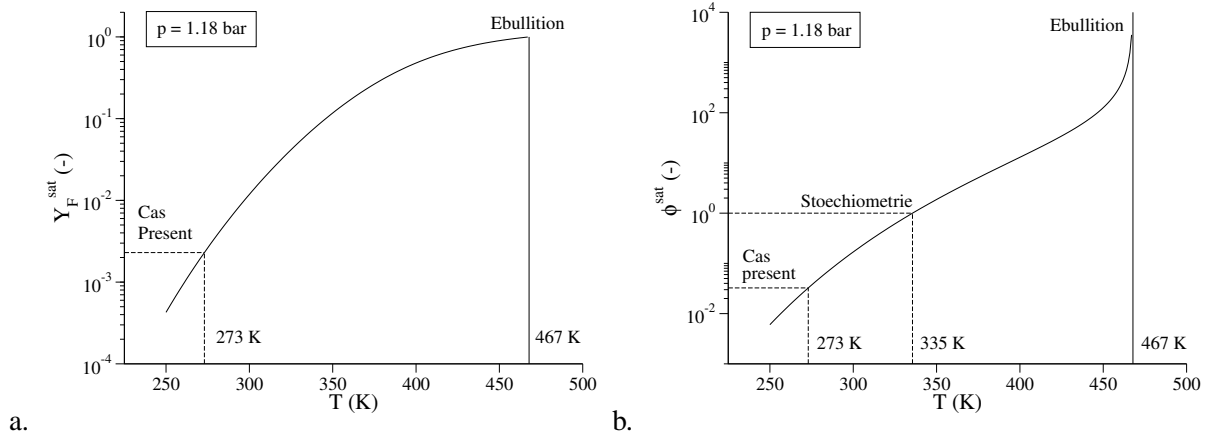


FIG. 7.9 - Fraction massique de carburant (a.) et richesse gazeuse (b.) en fonction de la température pour un mélange diphasique saturé de JP10 et d'air

	Conditions typiques d'un allumage (mélange non saturé)	→ évap.	Conditions amont de la flamme saturée (mélange saturé)
T	$= 273\text{ K}$		272.1 K
T_l	$= 273\text{ K}$		272.1 K
d	$= 25\ \mu m$		$24.86\ \mu m$
Y_F	$= 0$		2.175×10^{-3}
ϕ	$= 0$		3.076×10^{-2}
P	$= 1.18 \times 10^5\ Pa$		$1.177 \times 10^5\ Pa$

TAB. 7.3 - Conditions typiques d'un allumage produisant les conditions saturées du calcul de flamme plane

7.3.2 Vitesse de consommation d'une flamme saturée

La vitesse de consommation, définie comme l'intégrale du taux de réaction à travers le front de flamme, est égale à la vitesse de déplacement dans le cas des flammes saturées comme pour les flammes de prémélange monophasiques. L'expression de cette vitesse doit tenir compte de la présence de carburant liquide dans l'écoulement. Dans sa thèse, Kaufmann [110] dérive cette expression en intégrant les Eq. 7.5, 7.6 et 7.10 entre l'état à l'infini amont du front de flamme ($x = -\infty$, indice 1) et l'état infini aval ($x = +\infty$, indice 2) :

$$\int_{-\infty}^{+\infty} d(\rho u) = \int_{-\infty}^{+\infty} \Gamma dx \tag{7.71}$$

$$\int_{-\infty}^{+\infty} d(\rho Y_F u) = \dot{\Omega}_F + \int_{-\infty}^{+\infty} \Gamma dx \tag{7.72}$$

$$\int_{-\infty}^{+\infty} d(\rho_l \check{\alpha}_l \check{u}_l) = - \int_{-\infty}^{+\infty} \Gamma dx \tag{7.73}$$

où $\dot{\Omega}_F = \int_{-\infty}^{+\infty} \dot{\omega}_F dx$ est le taux de consommation intégral du carburant.

On fait les hypothèses suivantes :

- la flamme est stationnaire donc la vitesse des gaz frais u_1 est égale à la vitesse de déplacement S_L donc à la vitesse de consommation S_c ;
- étant donné la température élevée des gaz brûlés, la phase liquide est supposée complètement évaporée en $x = +\infty$;
- la vitesse liquide est égale à la vitesse gazeuse en $x = -\infty$ et en $x = +\infty$.

En combinant les Eq. 7.71 et 7.73, on obtient le système suivant :

$$[\rho u]_2 - [\rho u]_1 = [\rho_l \check{\alpha}_l \check{u}_l]_1 \quad (7.74)$$

$$[\rho u Y_F]_2 - [\rho u Y_F]_1 = \dot{\Omega}_F + [\rho u]_2 - [\rho u]_1 \quad (7.75)$$

Sachant que $[u]_1 = [\check{u}_l]_1$, on en déduit l'expression de la vitesse de consommation :

$$S_c = \frac{\dot{\Omega}_F}{\rho_1 (Y_{F2} - Y_{F1}) + [\rho_l \check{\alpha}_l]_1 (Y_{F2} - 1)} = S_L \quad (7.76)$$

Lorsque $[\rho_l \check{\alpha}_l]_1$ tend vers zéro, on retrouve l'expression de la vitesse de consommation d'une flamme monophasique (cf. Poinot et Veynante [197], p. 38) :

$$S_c = \frac{\dot{\Omega}_F}{\rho_1 (Y_{F2} - Y_{F1})} = S_L^* \quad (7.77)$$

7.3.3 Paramètres du calcul

Les conditions physiques de la flamme saturée sont détaillées dans le Tab. 7.3. Afin d'étudier leur influence, la richesse totale et le diamètre initial des gouttes ont été modifiés. Pour ce faire, on a fait varier la concentration initiale de gouttes :

- à diamètre constant pour modifier la richesse ;
- à fraction volumique constante pour modifier le diamètre.

Ces flammes diphasiques sont comparées également à des flammes monophasiques à la richesse correspondante. Le Tab. 7.4 donne les conditions utilisées dans ces différents cas tests.

ϕ_t^0	Flamme saturée D25		Flamme saturée D50	Flamme gazeuse G
	Ω_0	$d_0 = 24.86 \mu m$	$d_0 = 49.72 \mu m$	$\Omega_0 = 1$
0.73	0.0421	LD25	LD50	LG
1.0	0.0307	SD25	SD50	SG
1.18	0.0261	RD25	RD50	RG

TAB. 7.4 - Dénomination des cas tests étudiés pour des conditions d'injection variables : type de mélange (diphasique saturé ou gazeux), richesse totale ϕ_t^0 et diamètre de gouttes d_0

7.3.4 Bilans de masse et d'énergie sur la flamme SD25

Dans un souci de validation, on s'intéresse tout d'abord à la capacité du code à conserver avec précision les grandeurs transportées telles que la masse et l'énergie. En combustion diphasique ces grandeurs subissent des variations importantes dans les deux phases³. Les bilans présentés concernent les résultats de la flamme SD25 (cf. Tab. 7.4) mais les mêmes bilans ont été réalisés sur toutes les flammes avec des conclusions analogues.

Le système 7.5–7.12 décrivant la flamme diphasique suppose un écoulement stationnaire. Toutefois, le code AVBP conserve une méthode de résolution instationnaire. Si on ne regarde que la masse et l'énergie, on obtient le système instationnaire suivant :

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial \rho u}{\partial x} = \Gamma \quad (7.78)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} \rho Y_F + \frac{\partial}{\partial x} (\rho u Y_F + J_{x,F}) = \Gamma + \dot{\omega}_F \quad (7.79)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} \rho_l \check{\alpha}_l + \frac{\partial}{\partial x} \rho_l \check{\alpha}_l \check{u}_l = -\Gamma \quad (7.80)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} \rho E + \frac{\partial}{\partial x} \rho u E = -\frac{\partial P u}{\partial x} - \frac{\partial q_x}{\partial x} + \Lambda + \Phi + u (\Gamma \check{u}_l - F_{d,x}) + \dot{\omega}_T \quad (7.81)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} \rho_l \check{\alpha}_l \check{h}_{s,l} + \frac{\partial}{\partial x} \rho_l \check{\alpha}_l \check{u}_l \check{h}_{s,l} = -\Lambda - \Phi \quad (7.82)$$

où l'Eq. 7.78 représente la conservation de la masse totale gazeuse, l'Eq. 7.79 la masse de carburant gazeux, l'Eq. 7.80 la masse totale liquide, l'Eq. 7.81 l'énergie totale gazeuse et l'Eq. 7.82 l'enthalpie liquide. Lorsqu'on intègre, par exemple, l'Eq. 7.79 sur le volume de contrôle V correspondant au domaine de calcul délimité par la surface A , on obtient l'équation de conservation intégrale de la masse de carburant gazeux :

$$\underbrace{\frac{d}{dt} \int_V \rho Y_F dV}_{\frac{d}{dt} m_{F,g}} = - \underbrace{\int_A \rho Y_F \mathbf{u} \cdot \mathbf{n} dA}_{\Sigma_{\text{flux}}} + \underbrace{\int_V \Gamma dV}_{\text{Evap}} + \underbrace{\int_V \dot{\omega}_F dV}_{\text{Réac}} \quad (7.83)$$

$m_{F,g} = \int_V \rho Y_F dV$ est la masse totale de carburant gazeux contenue dans le domaine. $\rho Y_F u$ est la densité de flux massique convectif de carburant gazeux et \mathbf{n} est la normale à la surface A . $\int_V \Gamma dV$ est le taux d'évaporation intégral et $\int_V \dot{\omega}_F dV$ est le taux de réaction intégral du carburant. Étant donné l'absence de gradients aux frontières amont et aval du domaine, les flux de pression pu et les flux diffusifs $\rho V_F Y_F$ et q_x sont nuls sur ces frontières. D'autre part, on néglige le terme $u (\Gamma \check{u}_l - F_d)$ dans le bilan d'énergie totale gazeuse. Les bilans intégraux de masse et d'énergie s'écrivent donc sous la forme générale :

$$\frac{d}{dt} \Psi_\phi = \Sigma_{\text{flux}} + \text{Evap} + \text{Réac} \quad (7.84)$$

où Ψ_ϕ est la variable intégrale de la phase ϕ (masse ou énergie). L'Eq. 7.84 signifie que la variation temporelle de la variable Ψ_ϕ a pour origine un terme de flux convectif, un terme de transfert entre phases

³La conservation de la quantité de mouvement n'a pas été vérifiée ici car elle nécessite des développements supplémentaires des outils de bilan. Ces développements devront faire l'objet d'une étude future.

et un terme dû à la réaction. Ces termes sont tracés dans les Fig. 7.10 à 7.14. L'erreur de fermeture représente la différence entre le terme de gauche et les termes de droite de l'Eq. 7.84 :

$$\text{Err.} = \frac{d}{dt} \Psi_{\phi} - (\Sigma_{\text{flux}} + \text{Evap} + \text{Réac}) \quad (7.85)$$

Selon que réaction ou évaporation interviennent ou non dans l'équation de conservation locale, les termes *Réac* ou *Evap* peuvent être nuls dans le bilan intégral correspondant. Afin de quantifier l'importance de l'erreur de conservativité, on définit l'erreur relative comme le rapport entre l'erreur absolue *Err.* et un terme significatif du membre de droite de l'Eq. 7.84 qui peut varier selon la variable étudiée.

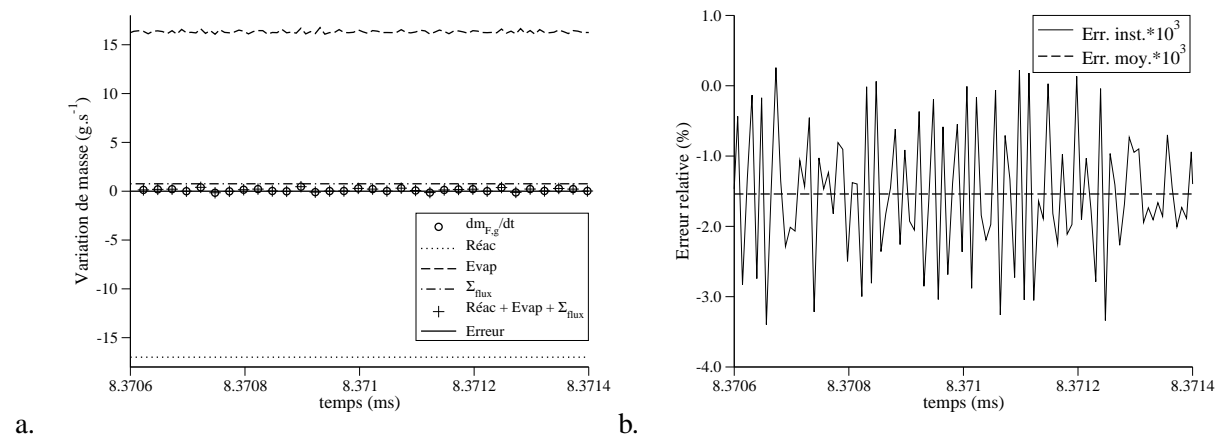


FIG. 7.10 - Bilan de masse de carburant gazeux comparant les termes de l'Eq. 7.84 (a). Erreur relative instantanée $((dm_{F,g}/dt)/Evap)$ et moyennée dans le temps (b).

Dans le bilan de masse du carburant gazeux (Fig. 7.10a), les termes prépondérants sont dus à l'évaporation et à la réaction chimique car l'essentiel du flux de carburant injecté en entrée est sous forme liquide. La Fig. 7.10b montre que l'erreur de conservativité est de l'ordre de 10^{-5} fois la masse évaporée.

Lorsqu'on s'intéresse à la masse gazeuse (Fig. 7.11a), on constate que l'essentiel de sa variation est due à la fluctuation du taux d'évaporation total. L'erreur de fermeture (Fig. 7.11b) reste inférieure à 10^{-4} fois la masse injectée et en moyenne temporelle, cette erreur est inférieure à 10^{-7} .

Le bilan de masse liquide (Fig. 7.12) montre l'équilibre entre la masse injectée (Σ_{flux}) et la masse évaporée (*Evap*). L'erreur de fermeture est d'environ 0.4%, ce qui est supérieur à l'erreur commise sur la masse gazeuse. Cette différence s'explique par l'imprécision de l'évaluation du flux massique aux limites. En effet, la méthode exacte d'estimation des flux aux frontières développée pour le solveur gazeux n'a pas été implantée à ce jour dans le traitement de la partie liquide. Cette implantation doit être réalisée afin d'améliorer la précision des conditions d'injection du spray.

Lorsqu'on étudie la combustion, il est crucial de calculer précisément les variations d'énergie car elles conditionnent la dynamique de l'écoulement et de la flamme. La Fig. 7.13a illustre les différents

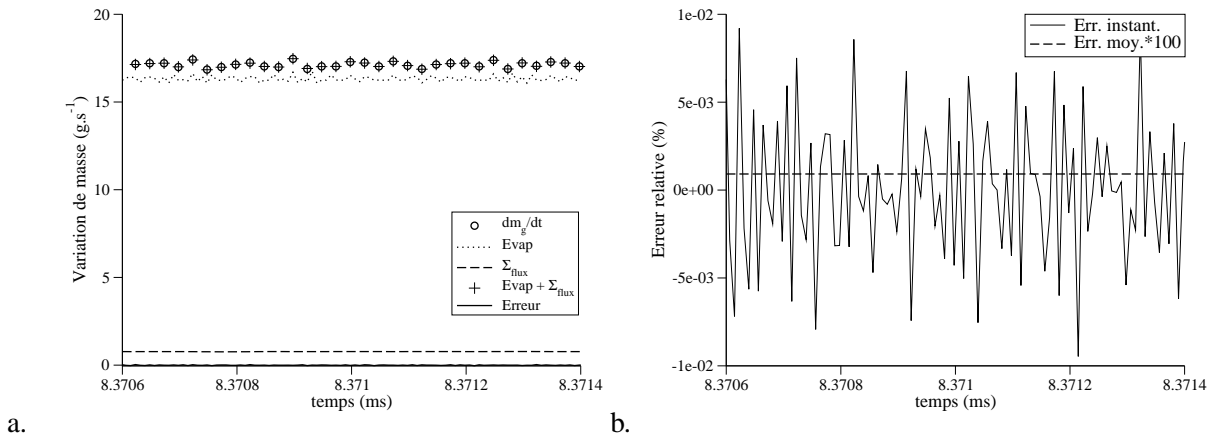


FIG. 7.11 - Bilan de masse gazeuse comparant les termes de l'Eq. 7.84 (a). Erreur relative instantanée $((dm_g/dt)/(Flux\ gazeux\ entrant))$ et moyennée dans le temps (b).

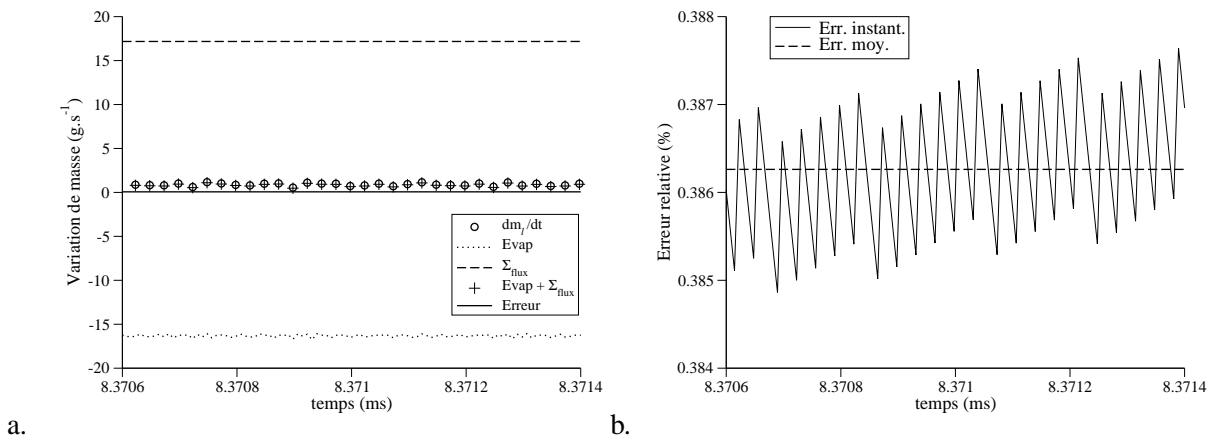


FIG. 7.12 - Bilan de masse liquide comparant les termes de l'Eq. 7.84 (a). Erreur relative instantanée $((dm_l/dt)/(Flux\ liquide\ entrant))$ et moyennée dans le temps (b).

termes du bilan d'énergie totale non chimique. On note en particulier que le dégagement de chaleur dû à la réaction chimique (*Réac*) est presque 200 fois supérieur à la chaleur absorbée par l'évaporation (*Evap*). L'erreur relative instantanée est toujours inférieure à 0.03% du dégagement de chaleur et reste en moyenne inférieure à $2 \cdot 10^{-7}$ (cf. Fig 7.13b).

Le bilan d'enthalpie liquide (Fig. 7.14a) montre un équilibre entre la somme des flux convectifs et le transfert de chaleur par évaporation. L'erreur moyenne instantanée dépasse parfois 2% de la puissance échangée par évaporation et sa valeur moyenne est d'environ 0.3% en norme. Cette erreur de fermeture est supérieure à l'erreur du bilan d'énergie gazeuse pour les mêmes raisons qui expliquent l'erreur de fermeture de la masse liquide (cf. ci-dessus). Toutefois, son effet est d'ordre secondaire dans la mesure

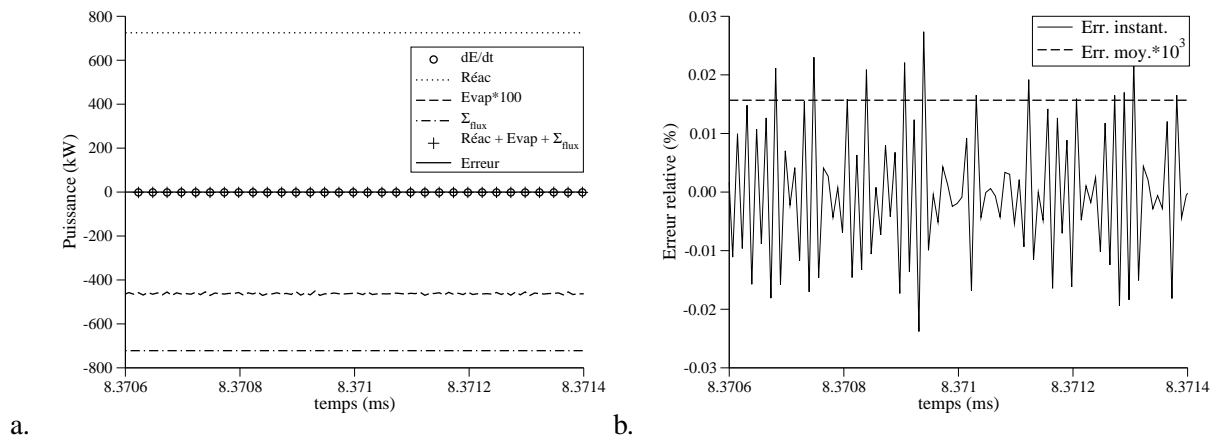


FIG. 7.13 - Bilan d'énergie totale gazeuse comparant les termes de l'Eq. 7.84 (a). Erreur relative instantanée $((dE/dt)/Réac)$ et moyennée dans le temps (b).

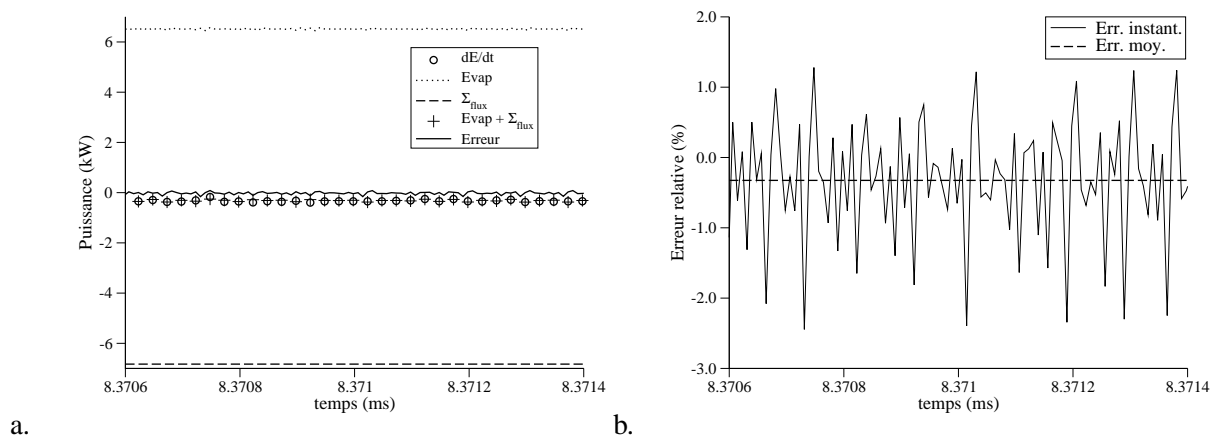


FIG. 7.14 - Bilan d'enthalpie liquide comparant les termes de l'Eq. 7.84 (a). Erreur relative instantanée $((dH_l/dt)/\Sigma_{flux})$ et moyennée dans le temps (b).

où l'enthalpie liquide n'intervient que dans le calcul des conditions thermodynamiques nécessaires au modèle d'évaporation (cf. section 3.3.2).

7.3.5 Structure de la flamme SD25

La Fig. 7.15 illustre les profils de fractions massiques des espèces réactives. En dehors de l'espèce carburant, les profils de la flamme diphasique saturée sont semblables à ceux d'une flamme purement gazeuse ou d'une flamme diphasique homogène. Concernant le carburant, on note que sa fraction massique :

- est faible et constante dans les gaz frais où le mélange air/carburant liquide est saturé ;
- est maximum dans le front de flamme en raison de l'évaporation ;
- tend vers zéro dans les gaz brûlés comme l'impose la condition de mélange stœchiométrique.

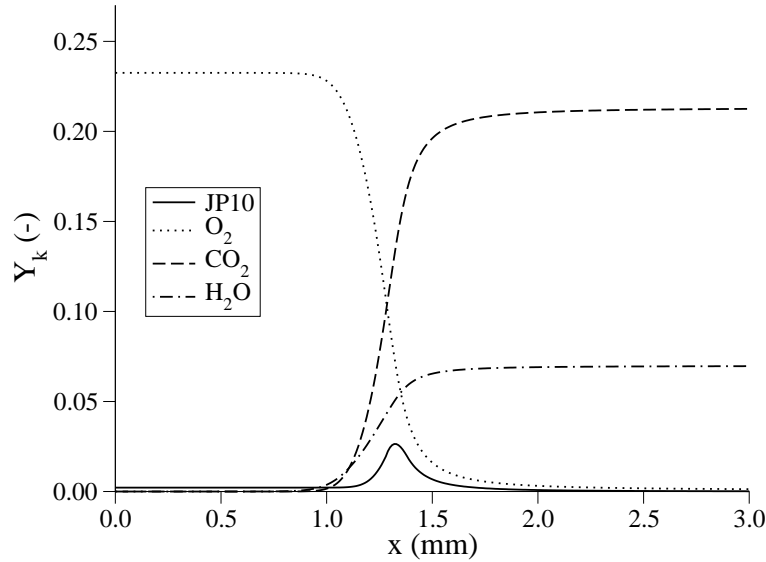


FIG. 7.15 - Profils de fractions massiques des espèces gazeuses réactives de la flamme SD25

La Fig. 7.16 illustre la structure du front de la flamme saturée. De l'amont vers l'aval, on observe :

1. une zone où la température augmente alors que les transferts de masse par évaporation et combustion sont négligeables (*Zone 1*). Cette zone correspond au classique préchauffage des gaz frais par diffusion thermique contre-courant (cf. Williams [269]).
2. une élévation brutale du taux d'évaporation suite à l'augmentation de la température du carburant liquide (*Zone 2*), puis sa décroissance lorsque les gouttes finissent de s'évaporer (*Zone 3*) ;
3. une augmentation du taux de réaction du carburant en raison de la présence de carburant gazeux (*Zone 2*). Lors de cette phase, le profil du taux de réaction augmente avec un léger retard par rapport au taux d'évaporation ;
4. une augmentation de la fraction massique de carburant sous l'effet de l'évaporation (*Zone 2*) puis sa diminution sous l'effet de la réaction chimique (*Zone 3*) ;
5. en aval de la zone d'évaporation, une région purement gazeuse où le taux de réaction diminue jusqu'à consommation totale du carburant gazeux (*Zone 4*).

L'étape 2 permet de perturber l'état d'équilibre thermodynamique du mélange saturé dans le sens de l'évaporation. En effet, la réaction produit des gaz plus chauds qui, par conduction, chauffent les gouttelettes liquides. En augmentant la température liquide on élève la fraction massique de carburant à la surface de la goutte $Y_{F,\zeta}$ (cf. Eq. 7.69 et Fig. 7.9a). Or d'après l'Eq. 3.64, le taux d'évaporation est piloté par $Y_{F,\zeta}$. En produisant de la vapeur de carburant, l'évaporation alimente la réaction de combustion.

Celle-ci dégage de la chaleur dans les gaz brûlés, fermant ainsi la boucle du couplage intime entre évaporation et réaction chimique.

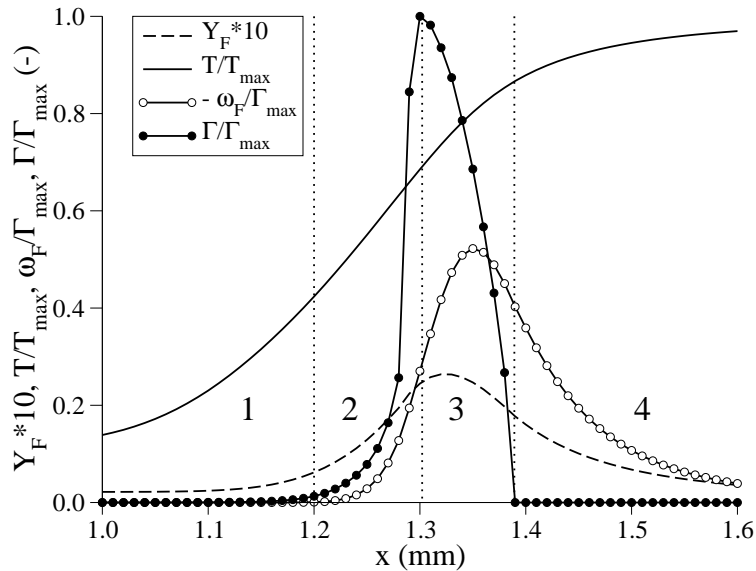


FIG. 7.16 - Structure du front de flamme, cas SD25. Définition des zones 1 à 4 caractérisant la structure de flamme.

L'effet de vitesse relative entre phases joue également un rôle important dans la dynamique de la flamme. En effet, le temps de résidence des gouttes dans le front de flamme détermine fortement les zones 1, 2 et 3 de la Fig. 7.16. Or, ce temps dépend essentiellement du temps de relaxation des gouttes qui induit un retard entre l'accélération de la phase gazeuse et celle de la phase liquide, comme le montre la Fig. 7.17. Ce retard est lié à la force de traînée et se traduit par la vitesse de glissement gaz/liquide ou vitesse relative :

$$u_s = u - \check{u}_l \quad (7.86)$$

La traînée dépendant du diamètre de goutte, on s'attend à des dynamiques de flamme différentes pour des sprays dont le diamètre initial de goutte est différent.

La Fig. 7.19a illustre les deux zones qui caractérisent le comportement du spray liquide :

- une zone de *préchauffage* des gouttes qui coïncide avec la zone 2 de la Fig 7.16 et qui amène la phase liquide à température d'ébullition par conduction thermique du gaz vers le liquide. A la fin de cette phase, la masse de liquide est faiblement évaporée car le taux d'évaporation est bas tant que l'ébullition n'est pas atteinte.
- La température liquide ne pouvant dépasser la température d'ébullition prédite par la loi de Clausius-Clapeyron (Eq. 3.97), l'évaporation se fait à température constante et suit la loi du d^2 (cf. section 3.3.2) qui prescrit une décroissance linéaire du carré du diamètre de goutte (cf. section 3.3.2) . L'essentiel de la masse liquide est évaporée lors de cette deuxième phase qui coïncide avec la zone 3 de la Fig. 7.16.

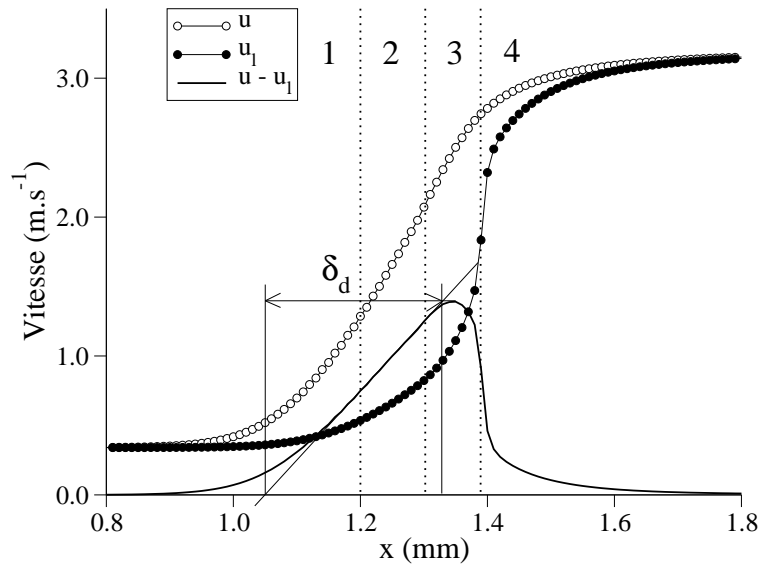


FIG. 7.17 - Profil de vitesse gazeuse (u), liquide (u_l) et relative ($u_s = u - u_l$) (zoom). Définition de l'épaisseur caractéristique de la traînée du liquide (δ_d). Chaque symbole correspond à un point du calcul.

L'ensemble des étapes impliquées dans le processus de propagation de la flamme saturée sont détaillées dans la Fig. 7.18. Par rapport à la flamme purement gazeuse, la flamme diphasique saturée comporte des étapes supplémentaires liées à l'évaporation de la phase liquide. On met en évidence par la suite que ces processus modifient fortement les caractéristiques globales de la flamme : épaisseur, vitesse de propagation, température de gaz brûlés, etc.

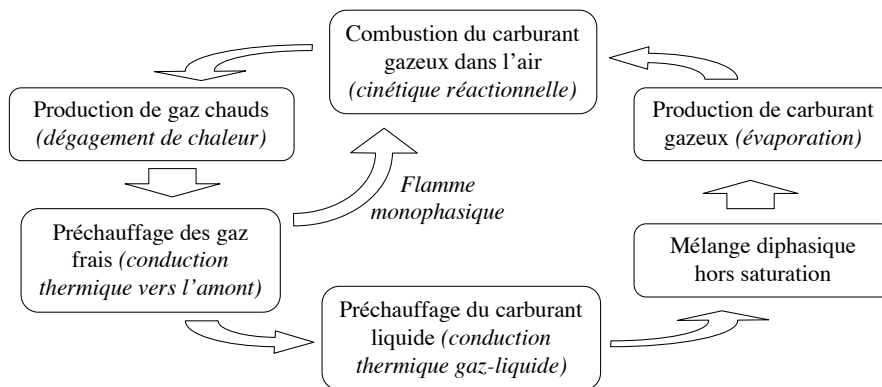


FIG. 7.18 - Principe de la propagation d'une flamme diphasique saturée

Afin de comparer les différentes échelles caractéristiques d'une flamme diphasique saturée, on définit :

- l'épaisseur thermique de flamme δ_L et le temps de combustion τ_c qui sont des caractéristiques globales de la flamme (cf. Fig. 7.19b) ;
- l'épaisseur δ_d et le temps τ_p , caractéristiques de la traînée de goutte (cf. Fig. 7.17). Dans le cas présent où le diamètre de goutte varie constamment en raison de l'évaporation, on choisit une définition différente du temps de relaxation classique défini dans la section 3.3.1.
- l'épaisseur δ_h et le temps τ_h caractéristiques du préchauffage du liquide (cf. Fig. 7.19a) ;
- l'épaisseur δ_v et le temps τ_v caractéristiques de la vaporisation des gouttes lorsqu'elles sont à température d'ébullition (cf. Fig. 7.19a).
- l'épaisseur δ_e et le temps τ_e qui sont la somme des épaisseurs et temps de préchauffage et d'évaporation respectivement. Ils caractérisent l'effet global de l'évaporation du spray sur la flamme.

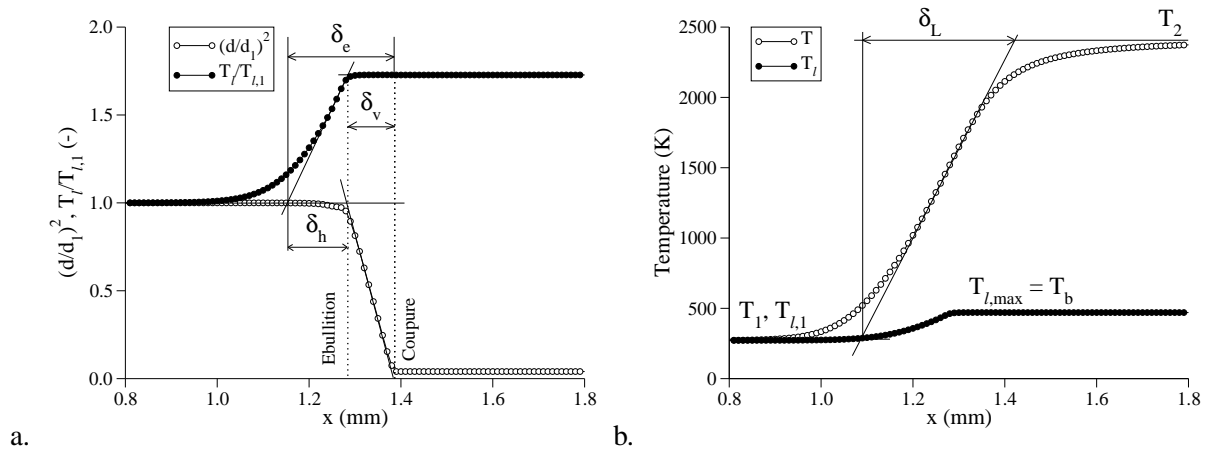


FIG. 7.19 - Profil de la surface et de la température de goutte sans dimension (zoom) (a). Profils des températures gazeuse et liquide (b). Définition des épaisseurs caractéristiques du préchauffage de liquide (δ_h), de la vaporisation à T_{eb} (δ_v), de la flamme (δ_L) et de l'épaisseur globale d'évaporation (δ_e). Chaque symbole correspond à un point du calcul.

Ces échelles caractéristiques sont détaillées dans le Tab 7.5. Elles permettent d'établir les nombres sans dimension suivants : le nombre de Stokes caractéristique de la flamme St_c , le Damköhler de préchauffage Da_h , le Damköhler de vaporisation à T_{eb} Da_v , et le Damköhler global d'évaporation Da_e .

Une petite valeur de St_c signifie que la traînée est rapide devant le temps de la flamme et n'influence donc pas la dynamique de flamme. À l'inverse, un grand nombre de Stokes signifie que la vitesse des gouttes met du temps à s'adapter à la vitesse du gaz alors que celui-ci est accéléré dans le front de flamme par dilatation thermique. Ce glissement entre phases provoque une augmentation du temps de résidence des gouttes par rapport au cas sans glissement (temps de relaxation nul). Dans ce cas, la dynamique de la flamme sera fortement influencée par le phénomène de traînée, comme l'observe Versaavel [259] qui a effectué des tests avec et sans force de traînée (cf. section 7.1.3).

Une petite valeur de Da_h signifie que le préchauffage est rapide devant le temps de la flamme donc

Phénomène physique	Épaisseur caractéristique	Échelle de temps	Nombre caractéristique
<i>Trainée de goutte</i>	$\delta_d = \frac{u_{s,max}}{\max(du_s/dx)}$	$\tau_p = \delta_d/S_L$	$St_c = \delta_d/\delta_c = \tau_p/\tau_c$
<i>Préchauffage du liquide</i>	$\delta_h = \frac{T_{eb}-T_{l,1}}{\max(dT_l/dx)}$	$\tau_h = \delta_h/S_L$	$Da_h = \delta_h/\delta_c = \tau_h/\tau_c$
<i>Vaporisation à T_{eb}</i>	$\delta_v = \frac{d_1^2}{\max(dd^2/dx)}$	$\tau_v = \delta_v/S_L$	$Da_v = \delta_v/\delta_c = \tau_v/\tau_c$
<i>Préchauffage + évaporation</i>	$\delta_e = \delta_h + \delta_v$	$\tau_e = \delta_e/S_L$	$Da_e = \delta_e/\delta_c = \tau_e/\tau_c$
<i>Flamme</i>	$\delta_L = \frac{T_2-T_1}{\max(dT/dx)}$	$\tau_c = \delta_L/S_L$	—

TAB. 7.5 - Définition des épaisseurs (cf. Fig. 7.17 et 7.19), temps et nombres sans dimension caractérisant la structure d'une flamme plane saturée

que cette phase n'est pas limitante dans la dynamique de flamme. À l'inverse, un grand Da_h signifie que les gouttes n'ont pas le temps d'atteindre la température d'ébullition avant de traverser le front de flamme. Dans ce cas, la dynamique de la flamme sera fortement influencée par les caractéristiques du préchauffage liquide.

Une petite valeur Da_v signifie une évaporation rapide du liquide par rapport au temps de la flamme. Il s'agit de la combustion d'un spray de gouttelettes très fines où l'on s'approche d'une situation de combustion purement gazeuse. Par opposition, un Da_v supérieur à l'unité signifie que l'évaporation se poursuit au-delà du front de flamme.

Les effets d'évaporation sont globalement pris en compte par Da_e . Un faible Da_e signifie que les effets du spray sur la dynamique de la flamme sont négligeables. À l'inverse, un Da_e proche de l'unité voire supérieur signifie que la dynamique de l'évaporation joue un rôle prépondérant dans la propagation du front de flamme.

Le Tab. 7.6 présente les caractéristiques globales mesurées dans les différents calculs de flammes planes présentés dans la section 7.3.3. Les valeurs de St_c , Da_h , Da_v et Da_e obtenues pour la flamme SD25 suggèrent que les effets de trainée, transferts de chaleur et de masse entre phases ont une influence importante sur la dynamique de la flamme (cf. section 7.3.7). On note par ailleurs que le temps caractéristique de la trainée est proche du temps global d'évaporation.

La Fig. 7.20 compare les différents termes sources de masse d'énergie dus à l'évaporation et à la combustion. Sur la Fig. 7.20a, on note une première zone amont où le taux d'évaporation dépasse le taux de réaction du carburant, ce qui correspond à l'augmentation de la fraction de carburant gazeux observée sur la Fig. 7.15. Dans un deuxième temps, le bilan est en faveur de la disparition du carburant gazeux sous l'effet de la réaction. D'une part, on remarque que la zone de réaction est plus étendue que la zone d'évaporation. D'autre part, le maximum de taux d'évaporation vaut près du double du maximum de taux de réaction. Cet effet a des conséquences sur la capacité à résoudre correctement un front de flamme saturée. En effet, bien que la présence du spray entraîne un épaississement du front de flamme qui est favorable du point de vue numérique, les gradients de température liquide et de diamètre liés à l'évaporation

	LD25	SD25	RD25	LD50	SD50	RD50	LG	SG	RG
d_0 (μm)	24.86			49.72			–		
ϕ (–)	0.70	1.00	1.18	0.70	1.00	1.18	0.70	1.00	1.18
S_L ($\text{m}\cdot\text{s}^{-1}$)	0.219	0.340	0.370	0.155	0.215	0.230	0.247	0.421	0.495
T_2 (K)	1944	2405	2357	1946	2408	2358	1969	2434	2376
δ_L (mm)	0.418	0.326	0.291	0.574	0.494	0.447	0.382	0.261	0.224
St_c (–)	0.764	0.793	0.863	1.011	0.918	0.967	–	–	–
Da_h (–)	0.438	0.391	0.420	0.492	0.450	0.458	–	–	–
Da_v (–)	0.277	0.307	0.330	0.382	0.386	0.416	–	–	–
Da_e (–)	0.715	0.698	0.750	0.874	0.836	0.874	–	–	–

TAB. 7.6 - Grandeurs caractéristiques des flammes planes saturées et monophasiques

peuvent poser des problèmes de résolution spatiale en fonction du rapport entre δ_h ou δ_v et la taille de la maille Δx . Dans le cas présent, on a environ 35 points dans l'épaisseur de flamme δ_L , ce qui correspond, avec $Da_h = 0.391$ et $Da_v = 0.307$, à respectivement 14 points dans δ_h et 12 points dans δ_v .

Par ailleurs, lorsque la loi d'évaporation est appliquée aux petits diamètres, on rencontre un problème de résolution temporelle et spatiale que l'on évite en effectuant une coupure des termes sources d'évaporation en-dessous d'un diamètre seuil (cf. Fig. 7.19a). Ce diamètre seuil est choisi de telle sorte que le pas de temps reste faible devant le temps nécessaire pour évaporer la goutte au diamètre considéré. On s'assure également que ce diamètre de coupure correspond à plus de 99% de masse liquide évaporée soit au moins 20% du diamètre initial. Au-delà de ce seuil, pour des raisons de continuité des équations du spray, le code continue de transporter le spray liquide à diamètre constant même si la phase dispersée est physiquement inexistante.

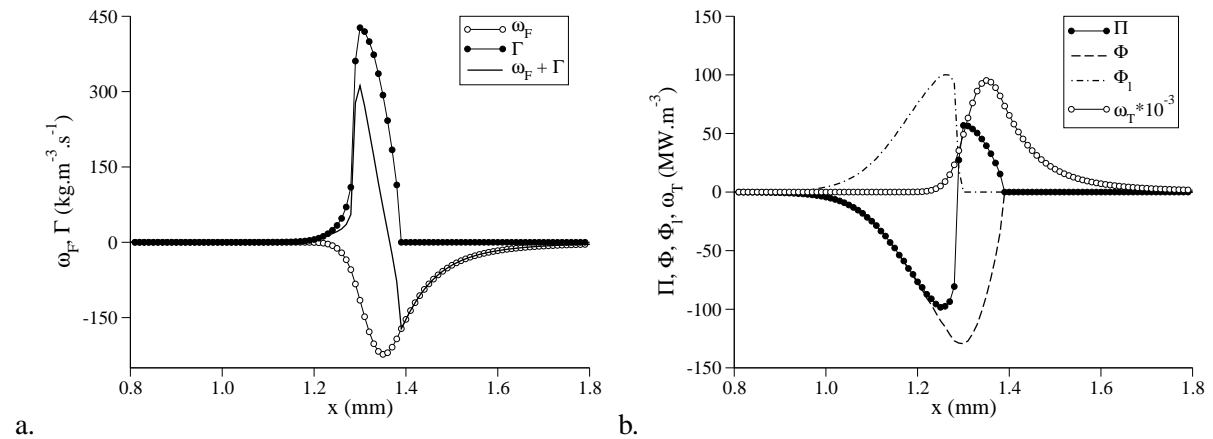


FIG. 7.20 - Profils de transferts de masse (a.) et de chaleur (b.) par évaporation/combustion (zooms)

Lorsqu'on s'intéresse aux transferts de chaleur (Fig. 7.20b), on constate que :

- le flux conductif gazeux Φ est toujours positif car la température du gaz est toujours supérieure à

- celle du spray liquide (cf. Fig. 7.19a) ;
- le flux conductif liquide Φ_l responsable du préchauffage des gouttes devient nul lorsqu'on est à l'ébullition ;
 - à l'ébullition, toute l'énergie transférée par conduction dans le gaz (Φ) est absorbée par le transfert de masse via le terme $\Lambda = \Gamma h_{s,F}(T_{eb})$ qui apparaît dans le bilan de flux à l'interface gaz/liquide : $\Pi = \Lambda + \Phi = \Lambda_l = -\Gamma h_l(T_{eb})$ (cf. Eq. 3.85) ;
 - le dégagement de chaleur par combustion $\dot{\omega}_T$ se manifeste lorsque les gouttes sont à ébullition et que le taux d'évaporation est suffisant pour alimenter la réaction en carburant gazeux ;
 - l'énergie libérée par la combustion est environ trois ordres de grandeur plus grande que l'énergie absorbée par l'évaporation.

7.3.6 Étude paramétrique

L'étude précédente ne fait intervenir qu'une valeur de diamètre. Or, d'une part, le spray réel est polydispersé. D'autre part, le diamètre moyen du spray atomisé varie avec les conditions d'opération de la chambre de combustion (vitesse et température du gaz et du liquide, pression ambiante, etc.). Il semble donc important d'étudier l'effet du diamètre sur la propagation de la flamme saturée. On sait par ailleurs que la cinétique chimique d'une flamme gazeuse est directement influencée par la richesse du mélange (cf. section 4.7). L'étude paramétrique doit permettre de comparer la dépendance des flammes saturées (D_{25} et D_{50}) en fonction de la richesse avec celle de la flamme gazeuse (G). Toutefois, les résultats concernant le régime riche doivent être interprétés avec précaution car le schéma cinétique simplifié commet une erreur dans la prédiction de la vitesse de flamme laminaire gazeuse dans ce régime (cf. section 4.7). En particulier, il prédit une croissance monotone de S_L pour $\Phi > 1$ alors que la chimie détaillée indique un maximum vers $\phi = 1.1$. Le comportement des flammes diphasiques riches relevé par Versaevel [259] et Ben Dakhliia [20] ne pourra donc être mis en évidence ici.

Sur la Fig. 7.21a, on note l'effet thermodynamique de la présence de carburant liquide sur la température adiabatique de flamme (cf. section 7.2). L'énergie dépensée pour évaporer la phase liquide est soutirée au gaz (cf. Fig. 7.13a) et se traduit par une réduction de température de flamme. Cette diminution est minimale pour la flamme riche (18 K) et maximale pour la flamme stoechiométrique (26 K). Comme le montre la Fig. 7.21a, le diamètre n'a pas d'influence sur la température car celle-ci ne dépend que d'un bilan thermodynamique où intervient seulement les grandeurs thermodynamiques des deux phases (pression, température et masse).

La Fig. 7.21b montre que le diamètre d'injection influence fortement la vitesse de flamme laminaire. Une augmentation du diamètre entraîne une diminution de la vitesse de flamme et cet effet est d'autant plus grand que la richesse est élevée. L'augmentation de S_L entre les richesses 0.7 et 1.1 est d'environ 100% pour la flamme G alors qu'elle vaut seulement 30% pour la flamme D_{50} . Cette observation suggère que dans la combustion d'un spray saturé, les effets de la cinétique chimique sur la vitesse de flamme sont réduits au profit des effets diphasiques et ce d'autant plus que le diamètre initial est grand. Ce comportement est illustré théoriquement par la formule analytique de Ballal et Lefebvre [17] (cf. Eq. 7.4) que l'on cherche à comparer à la vitesse de flamme calculée par AVBP. Dans leur analyse théorique, les auteurs utilisent directement la diffusivité thermique D_{th} (certainement prise dans les gaz

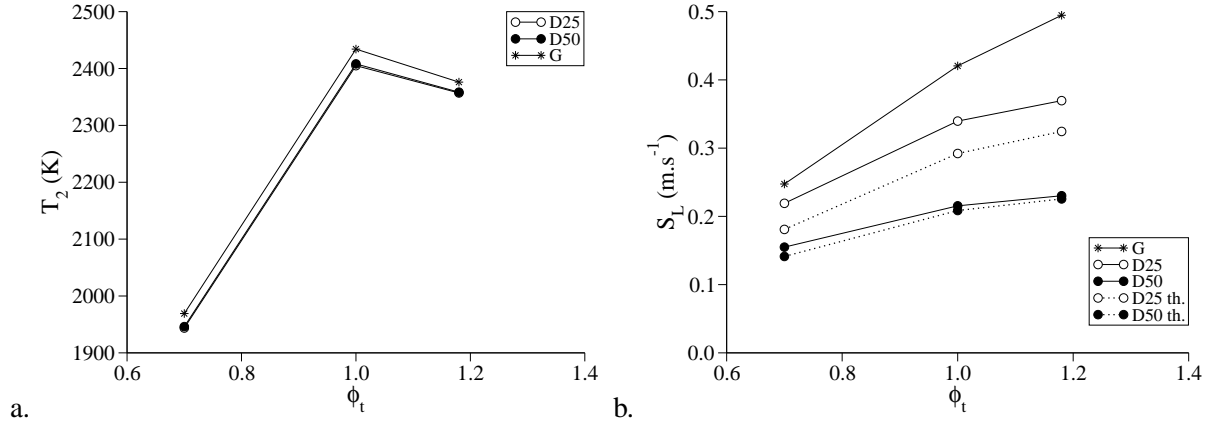


FIG. 7.21 - Température adiabatique de flamme (a.) et vitesse de flamme laminaire (b.) en fonction de la richesse totale pour le régime diphasique saturé à 25 μm (D25), à 50 μm (D50) et le régime purement gazeux (G)

frais) pour définir l'échelle de temps caractéristique de la flamme gazeuse τ_c (Eq. 7.1). L'échelle de longueur correspondante est donc l'épaisseur diffusive définie par :

$$\delta = \frac{D_{th}^1}{S_L} \quad (7.87)$$

L'Eq. 7.87 est une évaluation très approximative de l'épaisseur de flamme (cf. Poinot et Veynante [197]). Elle est connue pour sous-estimer nettement l'épaisseur thermique δ_L définie dans le Tab. 7.5. Pour des flammes gazeuses, Blint [23] propose de corriger l'épaisseur diffusive de la façon suivante :

$$\delta_L^b = 2\delta \left(\frac{T_2}{T_1} \right)^b = 2 \frac{D_{th}^1}{S_L} \left(\frac{T_2}{T_1} \right)^b \quad (7.88)$$

où b est l'exposant de la loi puissance pour la viscosité dynamique (cf. section 2.6) valant $b = 0.665$ dans le cas présent.

La Fig. 7.22 montre que l'Eq. 7.88 fournit le bon ordre de grandeur de l'épaisseur de la flamme gazeuse G et prédit correctement ses variations en fonction de la vitesse de flamme S_L et de la température adiabatique de flamme T_2 car δ_L/δ_L^b varie peu en fonction de la richesse : $\delta_L/\delta_L^b = C_\delta \approx 0.77$. On définit alors la diffusivité efficace D_{eff} par :

$$D_{\text{eff}} = \delta_L S_L = C_\delta \delta_L^b S_L \quad (7.89)$$

En remplaçant D_{th}^1 par D_{eff} dans l'Eq. 7.1, on obtient une meilleure évaluation du temps chimique. On réécrit alors l'Eq. 7.4 de la façon suivante :

$$S_L^{th} = \left(\frac{\tau_e}{D_{\text{eff}}} + \frac{1}{S_L^{*2}} \right)^{-\frac{1}{2}} \quad (7.90)$$

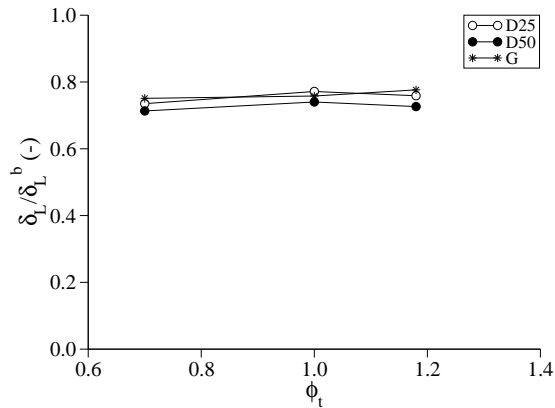


FIG. 7.22 - Comparaison entre l'épaisseur de flamme calculée (δ_L) et la formule de Blint (δ_L^b) en fonction de la richesse totale pour le régime diphasique saturé à 25 μm (D25) et à 50 μm (D50) et le régime purement gazeux (G)

En prenant les valeurs du temps d'évaporation τ_e et de la vitesse de flamme gazeuse S_L^* fournies par les calculs AVBP, on obtient une évaluation théorique de la vitesse de flamme diphasique saturée. D'après la Fig. 7.21b, le calcul AVBP est conforme à la prédiction théorique pour les flammes D50. En revanche, pour les flammes D25, les tendances sont bien prédites mais la formule théorique sous-estime la valeur calculée par AVBP. Pour les faibles diamètres d'injection, la décomposition algébrique du temps de combustion diphasique τ_q en deux temps caractéristiques séparés τ_e et τ_c (Eq. 7.3) est une approximation qui surestime τ_q . Pour les diamètres élevés où le temps d'évaporation τ_e est plus limitant, cette décomposition est valable d'où le faible écart observé pour les flammes D50.

La Fig. 7.23 compare les différentes épaisseurs caractéristiques de la flamme saturée (cf. Tab 7.5). Conformément aux résultats de Ben Dakhliia [20] (cf. section 7.1.3), l'épaisseur de flamme augmente sensiblement avec le diamètre. D'autre part, la Fig. 7.22 montre que la formule de Blint (Eq. 7.88) reliant S_L , δ_L et D_{th}^1 reste valable pour les flammes saturées. L'épaississement de la flamme lié aux effets diphasiques provient donc directement de la réduction de la vitesse de flamme (due à la diminution du taux de réaction) alors que l'effet de la diffusion thermique contenu dans D_{th}^1 joue un rôle identique. Sur la Fig. 7.23a, on note que l'épaisseur caractéristique de traînée est d'autant plus importante que le diamètre initial est grand et que sa valeur diminue avec la richesse.

La Fig. 7.24 montre que les nombres sans dimension St_c et Da_e varient peu avec la richesse. Les structures de flammes sont donc sensiblement les mêmes pour des richesses différentes. En revanche, le diamètre d'injection des gouttes a une influence notable sur les épaisseurs de traînée et d'évaporation. L'épaisseur d'évaporation, en particulier, augmente de 25% à 38% (fonction de la richesse) lorsque le diamètre passe de 25 à 50 μm (cf. Fig. 7.23a). Pour le plus faible diamètre, le nombre de Stokes est déjà proche de l'unité et il augmente lorsque le diamètre est supérieur. Quel que soit le régime riche ou pauvre ou le diamètre d'injection, on a donc un effet important de la force de traînée sur la dynamique de la phase liquide.

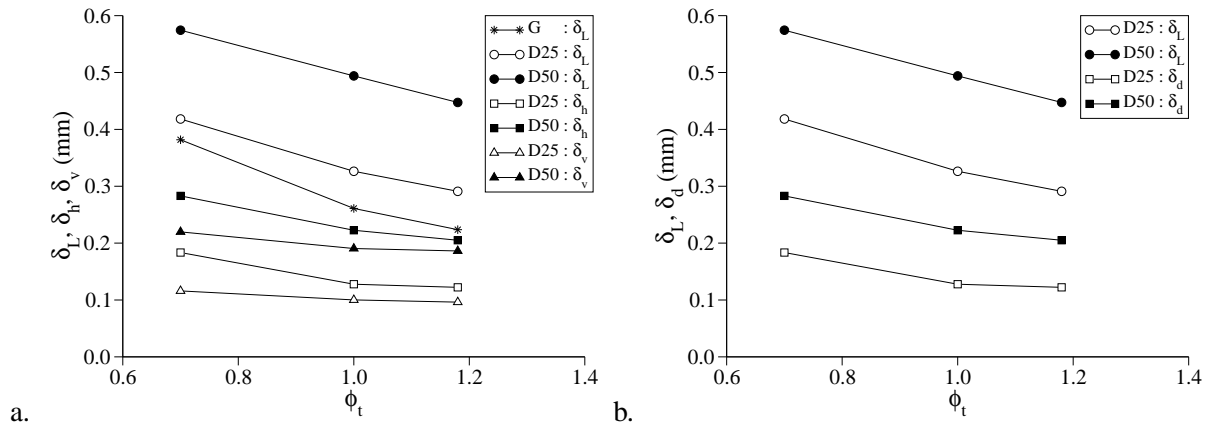


FIG. 7.23 - Comparaison entre l'épaisseur de flamme δ_L et les épaisseurs caractéristiques de l'évaporation δ_h et δ_v (a.) et de traînée δ_d (b.) en fonction de la richesse totale pour le régime diphasique saturé à 25 μm (D25) et à 50 μm (D50) et le régime purement gazeux (G)

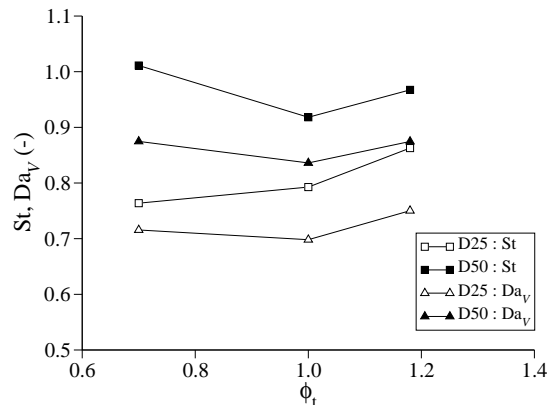


FIG. 7.24 - Nombres sans dimension caractéristiques de la traînée St_c et de l'évaporation du spray Da_e en fonction de la richesse totale pour les flammes saturées à 25 μm (D25) et à 50 μm (D50)

7.3.7 Influence du diamètre

À richesse constante, on fait varier le diamètre initial de goutte afin d'observer son influence sur la propagation de la flamme plane saturée. Parmi les trois points de richesse étudiés, l'étude comparative est faite à $\phi = 0.73$ (flammes L), richesse pour laquelle les effets du diamètre sont les plus grands.

Afin de comparer les profils des flammes $LD25$, $LD50$ et LG , on définit les abscisses modifiées suivantes :

- $x - x_0$ où $x_0 = x(|\dot{\omega}_F|_{max})$ est l'abscisse du maximum de taux de réaction ;
- Θ , la température réduite définie par $\Theta = (T(x) - T_1) / (T_2 - T_1)$.

La Fig. 7.25a illustre les profils de température obtenus pour les différents paramètres d'injection. La flamme *LD25* présente un profil proche de la flamme gazeuse avec une épaisseur légèrement plus importante et une température de gaz brûlés plus faible (cf. Fig. 7.21). En revanche, la flamme *LD50* possède des profils de température gazeuse et liquide aux épaisseurs nettement supérieures à celles de la flamme *LD25*. Sur la Fig. 7.25b, on note que la forme des profils de température liquide et de diamètre de goutte sont semblables, avec une fin de zone de préchauffage qui a lieu à une distance identique du maximum de taux de réaction. Cette figure illustre également l'effet d'épaississement de la zone de préchauffage et d'évaporation observé sur la Fig. 7.21 lorsqu'on passe de la flamme *LD25* à la flamme *LD50*.

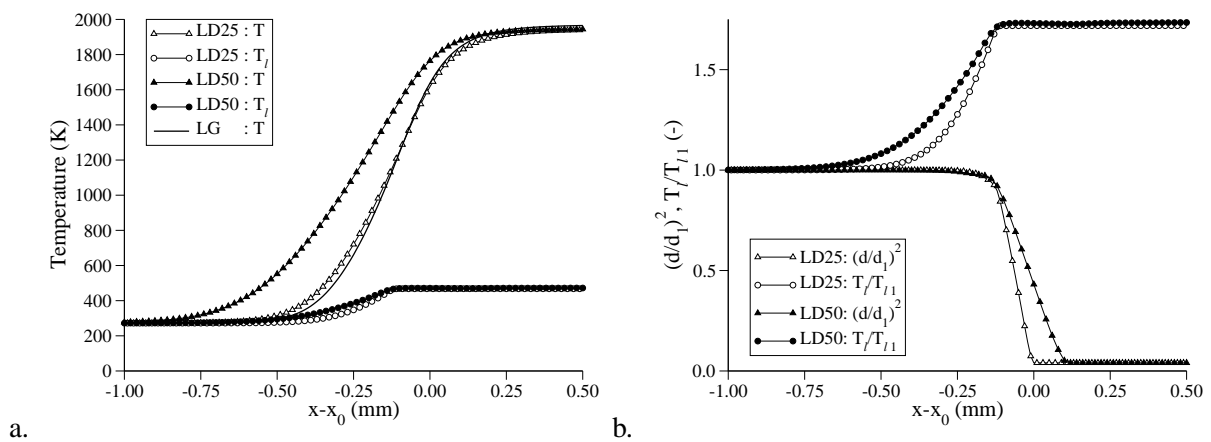


FIG. 7.25 - Profils de température gazeuse et liquide (zoom) (a.). Profils du carré du diamètre et de la température liquide (zoom) (b.).

Les profils de vitesse gazeuse des flammes diphasiques (Fig. 7.26a et 7.26b) présentent une forme semblable à celui de la flamme gazeuse, aux écarts près dus à la différence de vitesse de propagation du front. La Fig. 7.26b montre en particulier que la vitesse gazeuse u suit une évolution linéaire en fonction de la température réduite Θ car les effets de la traînée de goutte sur le gaz sont faibles. En revanche, la vitesse liquide présente un retard important sur la vitesse gazeuse dans la zone où le diamètre est proche du diamètre initial. Cette zone atteint une température réduite de 0.8 pour *LD25* et 0.95 pour *LD50*. Ces valeurs sont proches du nombre de Stokes que l'on a défini dans la section précédente. Elles confirment que les effets d'inertie de gouttelettes, qui augmente avec leur diamètre, jouent un rôle important dans la structure d'une flamme diphasique saturée.

On note que la région où la vitesse du liquide est très proche de celle du gaz contient une phase liquide virtuelle où les gouttes ont atteint le diamètre seuil de l'évaporation et ne représentent plus le spray réel. Dans cette zone, le profil de u_l de la flamme *LD50* présente un maximum local qui n'est pas physique mais résulte d'un effet dispersif lié à la raideur du gradient de vitesse liquide lorsque le diamètre de goutte tend vers zéro en raison de l'évaporation. Cet artefact est sans gravité car il ne met pas en cause la stabilité du calcul et n'intervient que là où la phase liquide est pratiquement absente.

Sur la Fig. 7.27a, on distingue des profils de fraction massique de carburant qui présente des maxima

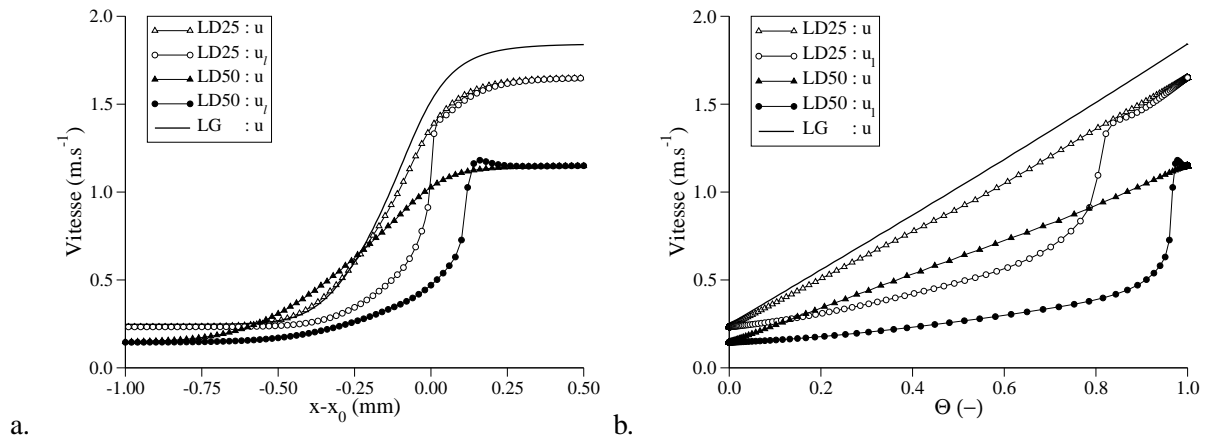


FIG. 7.26 - Profils de vitesse gazeuse (u) et liquide (u_l) en fonction de l'abscisse $x - x_0$ (zoom) (a.) et en fonction de la température réduite Θ (b.)

en amont du maximum de taux de réaction ($x - x_0 = 0$) pour les flammes diphasiques. Concernant la flamme $LD25$, on remarque que ce Y_F^{max} correspond environ à la moitié de la valeur d'injection de la flamme gazeuse LG . En aval de ce maximum, la flamme $LD25$ présente une structure identique à celle de la flamme LG où Y_F tend vers zéro car le mélange injecté est pauvre (carburant en défaut). La flamme $LD50$ comporte un Y_F^{max} plus faible que la flamme $LD25$ et cette valeur est atteinte pour une température réduite plus élevée, comme l'indique la Fig. 7.27b. Cette figure montre également que la structure de la flamme $LD50$ s'éloigne nettement de la flamme gazeuse pour des températures réduites inférieure à 0.9.

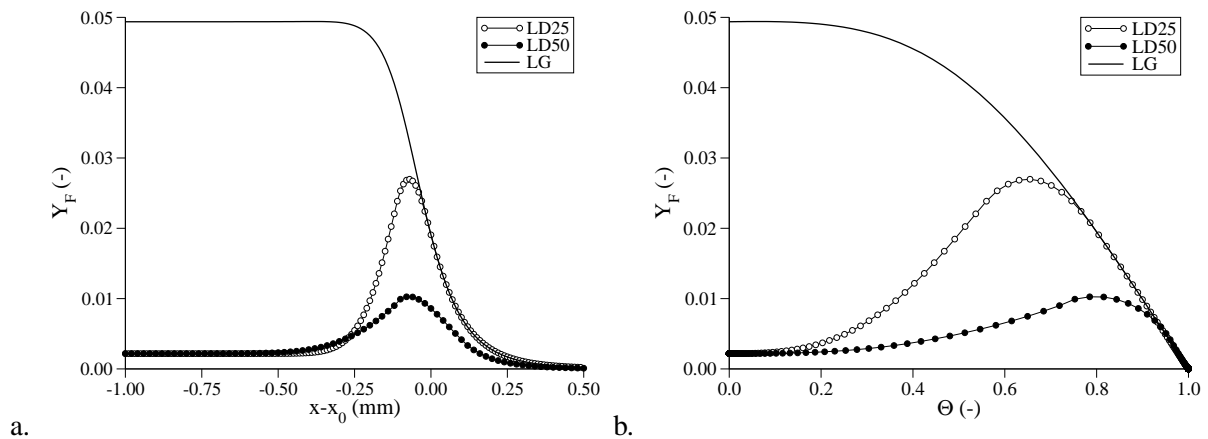


FIG. 7.27 - Profils de fraction massique de carburant gazeux en fonction de l'abscisse $x - x_0$ (zoom) (a.) et en fonction de la température réduite Θ (b.)

La différence de structure entre une flamme gazeuse et diphasique est également illustrée par les

profils de masse volumique de carburant gazeux ρY_F et liquide $\alpha_l \rho_l$ (cf. Fig. 7.28a et 7.28b). Alors que la masse volumique de carburant gazeux de la flamme LG diminue régulièrement à travers le front de flamme, les flammes diphasiques $LD25$ et $LD50$ voient les évolutions suivantes :

- la masse volumique de carburant liquide décroît d’abord avec un taux lié à l’augmentation de la vitesse liquide dans la zone de préchauffage (cf. Fig. 7.26) puis plus rapidement en raison de l’évaporation ;
- la fraction massique de carburant gazeux augmente — nettement pour $LD25$, faiblement pour $LD50$ — jusqu’à un maximum où elle rejoint le profil de la flamme LG .

La Fig. 7.28b montre que pour la flamme $LD50$, le carburant reste sous forme liquide dans une grande portion de l’épaisseur du front de flamme.

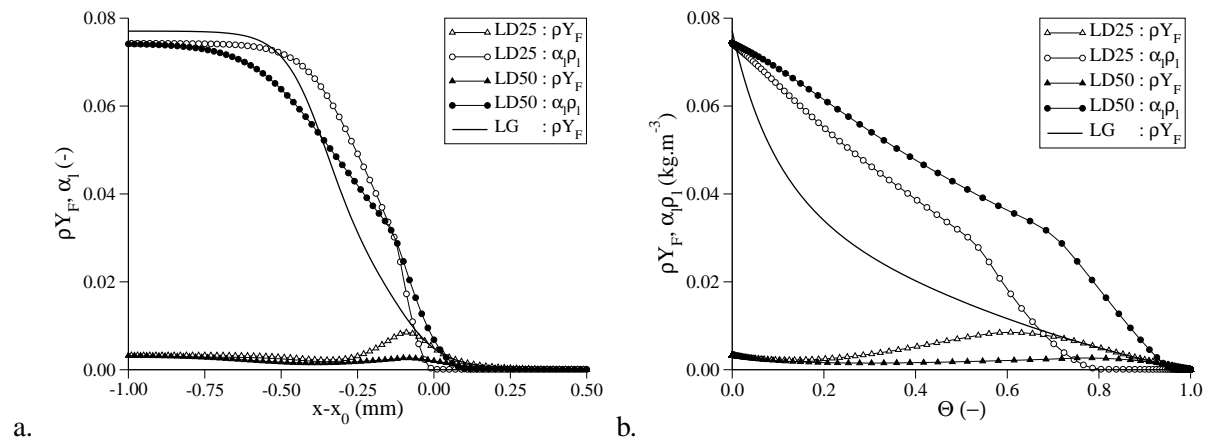


FIG. 7.28 - Profils de masse volumique de carburant gazeux (ρY_F) et liquide ($\alpha_l \rho_l$) en fonction de l’abscisse $x - x_0$ (zoom) (a.) et en fonction de la température réduite Θ (b.)

Les Fig. 7.29a et 7.29b illustrent les profils de taux de réaction $\dot{\omega}_F$ et d’évaporation Γ , variables jouant le rôle de termes sources dans les équations de ρY_F (Eq. 7.6) et $\alpha_l \rho_l$ (Eq. 7.10). Dans le cas de la flamme $LD25$, le taux d’évaporation est présent sur une épaisseur plus faible que le taux de réaction (cf. Fig. 7.29a) et son intensité maximale est plus grande. Quel que soit l’endroit du front de flamme, le taux de réaction reste proche de celui observé dans la flamme gazeuse. Pour la flamme $LD50$ en revanche, le taux d’évaporation occupe presque entièrement l’épaisseur du taux de réaction ce qui indique un couplage fort entre l’évaporation et la combustion. Dans ce cas, le profil du taux de réaction de $LD50$ s’éloigne nettement de ceux de $LD25$ et LG . Son intensité maximale est plus faible et tend vers la valeur atteinte par le taux d’évaporation. On en conclut que le caractère diphasique de la flamme saturée est d’autant plus marqué que le diamètre initial de gouttelette est élevé. Il se manifeste par une réduction du taux de réaction responsable de la diminution de la vitesse de flamme.

7.3.8 Analyse du modèle de flamme épaissie TP-TF

Le cas test de la flamme plane saturée permet d’évaluer le modèle de flamme épaissie adapté à la combustion diphasique (modèle TP-TF) décrit dans la section 4.6. Ce modèle est conçu pour épaissir le

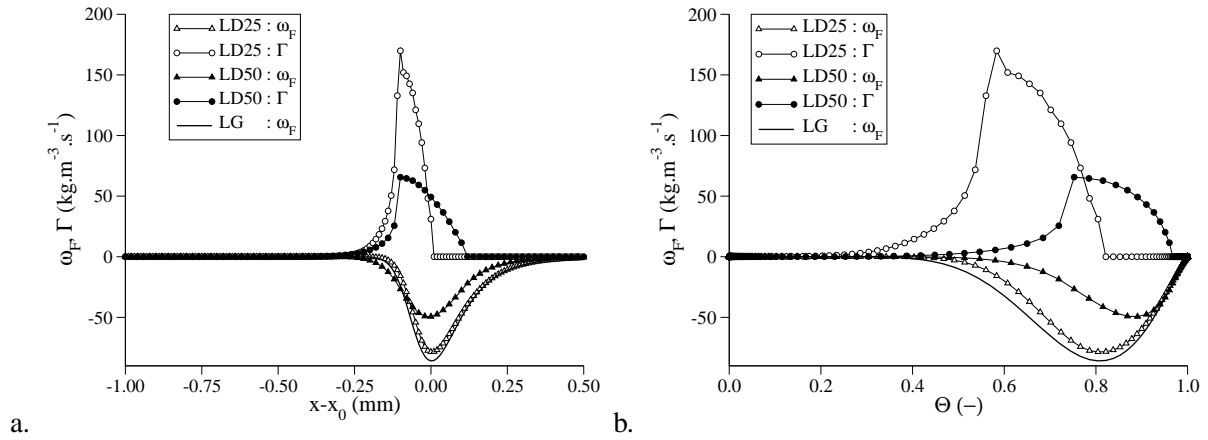


FIG. 7.29 - Profils de fraction massique de carburant gazeux en fonction de l'abscisse $x - x_0$ (zoom) (a.) et en fonction de la température réduite Θ (b.)

front de flamme d'un facteur F tout en conservant sa structure et sa vitesse de propagation. La structure de flamme étant liée à la dynamique de la phase liquide, le modèle TP-TF prend en compte une correction des termes de couplage entre phases. À partir de la flamme $SD25$, on étudie l'effet du modèle sur les caractéristiques de la flamme en faisant varier le facteur F . Quatre valeurs d'épaissement sont choisies $F = 1, 2, 5$ et 10 produisant les quatre flammes $F1, F2, F5$ et $F10$ correspondantes. Les calculs sont réalisés sur des maillages à nombre de nœuds identiques avec une taille de maille $\Delta x = F \Delta x_0$ où Δx_0 est la dimension de la maille du calcul de flamme $F1$. Afin de comparer les profils des flammes $F1$ à $F10$, on définit l'abscisse modifiée : $x^* = (x - x_0)/F$ avec $x_0 = x(|\dot{\omega}_F|_{max})$. Dans la section 4.6.5, on justifie le choix de ne pas modifier le terme de traînée de goutte dans le modèle TP-TF. L'impact de cette absence de correction est analysé ici en comparant les résultats du modèle TP-TF à ceux du calcul prenant en compte cette correction (« TP-TF drag corr. ») qui consiste simplement à diviser le terme F_d par F dans les Eq. 7.7 et 7.11.

Les Fig. 7.30a et 7.30b montrent que la similitude entre les profils de température est bonne pour les faibles facteurs d'épaissement ($F = 2$). En revanche, on note un écart pour les flammes $F5$ et $F10$ bien que la forme des courbes soit respectée et que l'abscisse x^* où les gouttes sont à ébullition soit conservée (cf. Fig. 7.30b). L'accord parfait entre la flamme non épaissie et la courbe du modèle à traînée corrigée ($F10$ drag corr.) montre que ces écarts sont dus uniquement à l'absence de correction du terme de traînée.

Cette erreur s'observe également sur les profils de vitesse (cf. Fig. 7.31a) où l'on constate que l'écart entre les vitesses gazeuse et liquide diminue avec F . En effet, dans le modèle TP-TF, le terme de traînée est surestimé d'un facteur F dans le front de flamme et le nombre de Stokes de flamme St_c n'est pas conservé. La courbe (o) de la Fig. 7.31a montre que cette erreur s'annule parfaitement lorsque la correction du terme de traînée est appliquée. Comme on l'a noté dans la section 7.3.5, les effets d'inertie augmentent le temps de résidence des gouttelettes qui subissent en retard l'accélération de l'écoulement gazeux dans le front de flamme. En surestimant la traînée, ce temps de retard est sous-estimé et la dis-

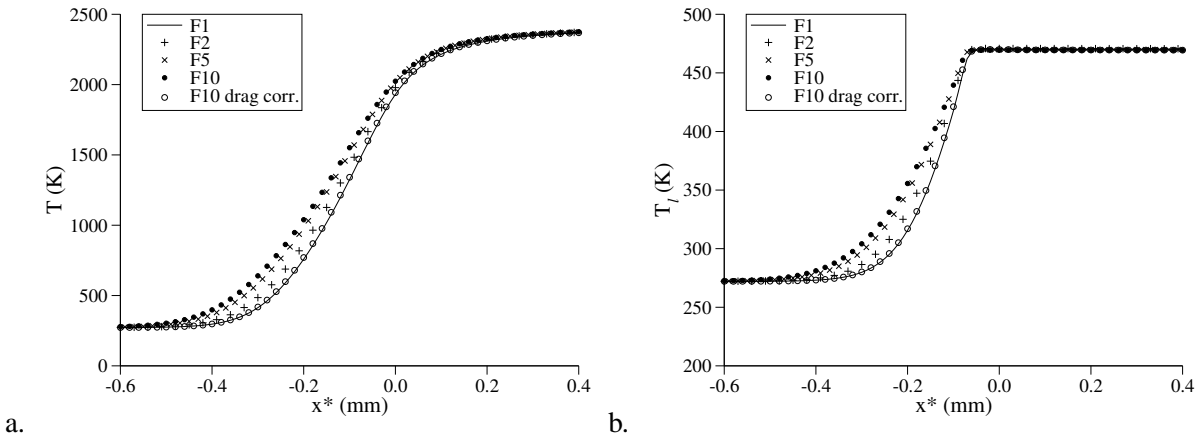


FIG. 7.30 - Profils de température gazeuse (a.) et liquide (b.) (zoom) pour quatre valeurs du facteur d'épaississement

tance d'évaporation se trouve augmentée. Il en résulte une diminution du taux de réaction illustrée par la Fig 7.31b. L'effet sur les taux d'évaporation et de réaction est semblable à celui d'une augmentation du diamètre de goutte (cf. Fig. 7.29b).

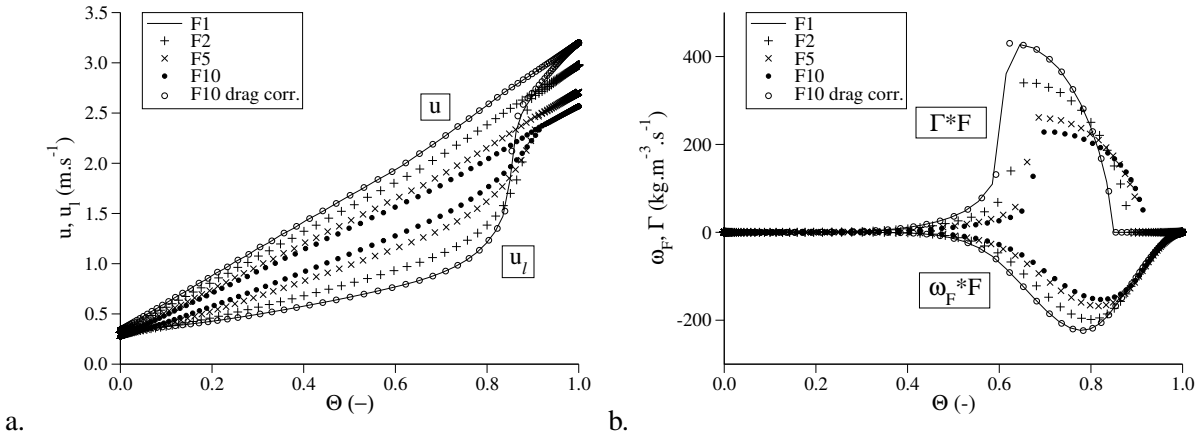


FIG. 7.31 - Profils en température réduite de la vitesse gazeuse (u) et liquide (u_l) (a.) et du taux de réaction et d'évaporation (b.) pour quatre valeurs du facteur d'épaississement

Sur la Fig. 7.32a, on retrouve l'erreur due au terme de traînée sur l'épaisseur de flamme : le modèle TP-TF prédit une flamme sur-épaissie d'environ 20%. Avec la correction de traînée, on retrouve un épaississement rigoureusement égal à F . Le modèle TP-TF surestime également l'épaisseur caractéristique de la traînée mais cette erreur reste bornée à partir de $F = 5$. Pour le modèle sans correction des termes diphasiques (TF no corr.), l'erreur est de signe opposé et vaut près de 40% pour l'épaisseur de flamme et pour l'épaisseur de traînée à $F = 5$.

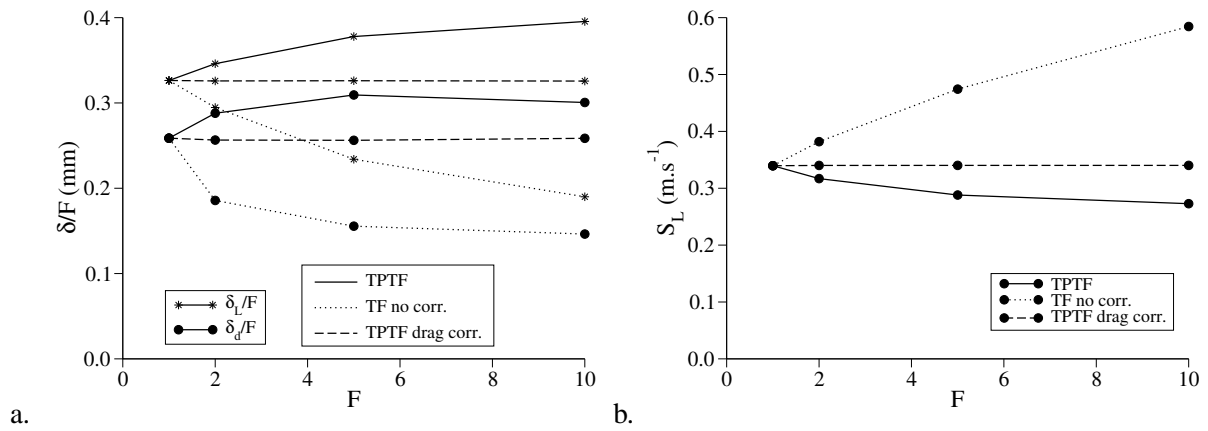


FIG. 7.32 - Épaisseurs de flamme δ_L et de traînée δ_d (a.) et vitesse de flamme (b.) de la flamme saturée en fonction du facteur d'épaississement pour le modèle de flamme diphasique épaissie (TP-TF), le modèle de flamme épaissie sans correction due au spray (TF no corr.) et le modèle de flamme diphasique épaissie avec correction sur le terme de traînée (TP-TF drag corr.)

La Fig. 7.32b montre que le modèle TP-TF sous-estime la vitesse de flamme d'environ 20% à $F = 10$, en conformité avec l'écart sur l'épaisseur de flamme. En appliquant la correction de traînée, on conserve parfaitement la vitesse de flamme laminaire de la flamme non épaissie quel que soit F . Le modèle sans correction, en revanche, surestime de plus de 70% la vitesse de flamme pour $F = 10$ et cette erreur croît de façon importante avec F .

Cette étude met en évidence l'importance de la correction des termes d'évaporation prise en compte par le modèle TP-TF. Sans ce traitement, la vitesse de flamme est surestimée d'autant plus que le facteur d'épaississement est grand. Toutefois, cette correction n'est pas suffisante si l'on souhaite conserver parfaitement S_L . En effet, pour les valeurs usuelles du facteur d'épaississement (entre 5 et 10), on sous-estime la vitesse de flamme d'environ 20%. Au regard des autres sources d'erreurs (en particulier la cinétique chimique en régime riche), cette valeur reste tolérable dans le cadre d'une première approche de la LES diphasique réactive.

Pour les calculs futurs, une amélioration du modèle TP-TF devra être considérée. Les calculs ont montré que l'erreur commise s'annule parfaitement si le terme de traînée est modifié de façon appropriée en fonction du facteur d'épaississement. Le modèle TP-TF amélioré devra inclure cette correction tout en évitant de perturber la dynamique du spray. En effet, lorsque la structure de flamme ne correspond pas au modèle idéal de la flamme plane diphasique prémélangée, modifier la traînée de goutte n'est pas justifié et introduirait des erreurs sur les taux d'évaporation et de réaction. Pour l'éviter, on peut songer à corriger la composante de la force de traînée normale au front de flamme (normale repérée par le gradient de température, par exemple) en conservant la composante tangentielle inchangée. Ainsi, on respecterait l'épaississement géométrique de la structure du front sans altérer la dynamique des gouttes dans la direction tangentielle. Avec ou sans cette modification, une étude en configuration turbulente devra être envisagée pour valider le modèle TP-TF. Un calcul DNS de flamme diphasique saturée dans une turbulence homogène isotrope semble un bon candidat pour une telle analyse.

7.3.9 Conclusion

La flamme plane saturée est une configuration simple qui fait apparaître l'essentiel des caractéristiques de la combustion diphasique laminaire. Elle présente un comportement propagatif proche de celui d'une flamme gazeuse de prémélange avec un couplage supplémentaire entre l'écoulement et le spray via des transferts de masse, de quantité de mouvement et d'énergie. Ces transferts ont pour effet de diminuer légèrement la température adiabatique de flamme. Ils introduisent également un retard qui réduit la vitesse de propagation et épaissit le front de flamme. Ces effets sont d'autant plus grands que le diamètre d'injection des gouttelettes de carburant est élevé.

Grâce aux bilans de masse et d'énergie, on valide la conservativité du code pour ces deux grandeurs, propriété essentielle lorsqu'on étudie la combustion.

Malgré la simplicité des modèles d'évaporation et de combustion utilisés, les calculs AVBP permettent de reproduire les caractéristiques principales de la structure d'une flamme diphasique. L'étude de cette structure a mis en évidence des zones où agissent de façon couplée les effets de glissement entre phases, de préchauffage de goutte, d'évaporation et de réaction chimique qui sont à l'origine du mécanisme de propagation du front de flamme. L'attribution d'échelles caractéristiques pour ces différents phénomènes permet de comparer leur influence respective en définissant des nombres de Damköhler et de Stokes caractéristiques du spray.

L'étude paramétrique permet de retrouver des comportements relevés dans l'étude bibliographique. La formule théorique de la vitesse de flamme proposée par Ballal et Lefebvre [17] est ainsi vérifiée pour le diamètre de gouttes le plus élevé. En utilisant une chimie réaliste en régime riche (cf. section 4.7.2), il serait intéressant de chercher à reproduire les résultats obtenus par Versaevel [259] et Ben Dakhliia [20] dans ce régime.

Enfin, le modèle TPTF, extension du modèle de flamme épaissie à la combustion diphasique, donne des résultats acceptables en prévision des objectifs de la LES : propager une flamme sur un maillage grossier en conservant sa structure et sa vitesse de propagation. En pratique, le modèle sous-estime la vitesse de flamme en raison de l'absence de correction du terme de traînée. Toutefois, cette erreur ne dépasse pas 20% et reste tolérable dans le cadre de cette étude. Pour les calculs futurs, il faudra envisager une amélioration de ce modèle et sa validation dans une configuration turbulente. La réalisation de cette étude est prévue dans la thèse en cours de M. Sanjosé au Cerfacs (2006-2009).

Troisième partie

Combustion diphasique dans un secteur de foyer aéronautique

Table des Matières

8	Écoulement réactif en régime stationnaire	203
8.1	Introduction	203
8.2	Configuration	203
8.2.1	Géométrie	203
8.2.2	Maillage	204
8.2.3	Conditions aux limites	206
8.2.4	Condition initiale	209
8.2.5	Modèles physiques, paramètres numériques et ressources informatiques	209
8.3	Aérodynamique de l'écoulement non réactif	209
8.4	Topologie de l'écoulement et mécanisme de stabilisation	211
8.4.1	Analyse du champ gazeux	211
8.4.2	Influence du spray	213
8.5	Structure de flamme	214
8.5.1	Indice de Takeno	214
8.5.2	Structure locale 1D	216
8.5.3	Modèle de flamme diphasique épaissie TP-TFLES	217
8.5.4	Diagramme de fraction de mélange	218
8.6	Conclusion	220
9	Allumage d'un secteur de chambre	223
9.1	Introduction	223
9.2	Configuration	224
9.2.1	Condition initiale	224
9.2.2	Modélisation de l'allumeur	225
9.2.3	Scénario d'allumage	226
9.3	Diagnostics temporels	226
9.4	Analyse des champs instantanés	229
9.5	Analyse locale 1D	232
9.5.1	Structure de flamme	232
9.5.2	Modèle d'épaississement TP-TFLES	233
9.6	Conclusion	234

TABLE DES MATIÈRES

Chapitre 8

Écoulement réactif en régime stationnaire

8.1 Introduction

Les études présentées dans les chapitres 6 et 7 constituent une première étape dans la validation du code AVBP pour la combustion diphasique. Comme le montrent les conclusions de ces chapitres, des investigations supplémentaires sont requises pour une validation complète. En plus des études académiques, la confrontation avec les données expérimentales existantes en combustion diphasique turbulente [109, 163, 164, 165, 190, 268] est un passage nécessaire. Toutefois, dans l'objectif de construire un code de calcul adapté aux configurations industrielles, il est intéressant d'évaluer les potentialités de l'outil actuel dans une application réaliste : une chambre de combustion de turbine d'hélicoptère. Bien que les modèles présentés dans la partie I soient relativement simples, la tâche consistant à les faire travailler de manière couplée au sein d'un calcul turbulent diphasique réactif en géométrie réelle représente un vrai défi. Chaque niveau de couplage introduit une source possible d'instabilités numériques, appelant donc des traitements numériques spécifiques.

Ce chapitre présente une étude LES de la combustion en régime stationnaire dans la chambre *Vesta* de Turbomeca. Dans un premier temps, on décrit la géométrie, les simplifications du calcul et la mise en place des conditions aux limites qui en découlent. Dans un second temps, on présente les résultats à travers plusieurs analyses. On s'intéresse tout d'abord à l'aérodynamique de l'écoulement non réactif. On étudie ensuite la topologie de la flamme et les mécanismes permettant sa stabilisation. Enfin, on analyse la structure de flamme par différentes approches.

8.2 Configuration

8.2.1 Géométrie

La chambre *Vesta* a été conçue par Turbomeca comme un démonstrateur pour le foyer du moteur d'hélicoptère Ardiden, le dernier né de ce constructeur de turbines. Il s'agit d'une chambre annulaire à

flux inversé (cf. introduction générale) composée de 18 secteurs identiques (cf. Fig. 8.1a). Dans chaque secteur, le spray de kérosène est fourni par des injecteurs principaux de type *airblast* à préfilm (cf. section 1.1.3) créant un jet d'air vrillé. La Fig. 8.2b est un zoom sur deux secteurs qui montre les limites du domaine de calcul, restreint ici à un secteur supposé périodique.

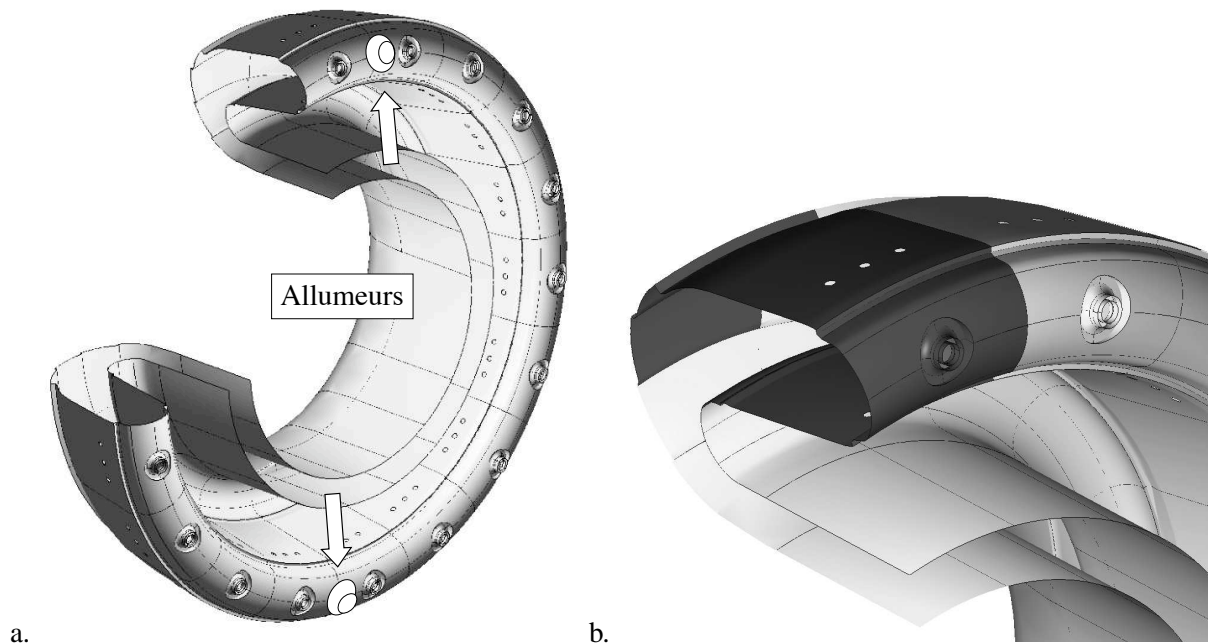


FIG. 8.1 - Vue d'ensemble de la chambre annulaire Vesta représentant 14 des 18 secteurs et la position des allumeurs (en blanc) (a.). Zoom sur deux secteurs (b.) : limite du domaine de calcul en noir

La chambre réelle comporte plusieurs entrées d'air via des parois multi-perforées et des films de refroidissement qui n'ont pas été pris en compte dans le calcul. Seules les entrées principales via l'injecteur et les trous d'air primaires ont été conservées (cf. Fig. 8.2) car elles jouent un rôle essentiel sur l'aérodynamique de la zone primaire. La chambre complète possède deux injecteurs de démarrage (ou allumeurs), situés entre deux injecteurs principaux à des positions diamétralement opposées dans l'anneau (cf. Fig. 8.1a). Le secteur représenté dans le calcul prend en compte un allumeur afin de simuler la séquence d'allumage calculée dans le chapitre 9. Les orifices des allumeurs laissent passer un débit de fuite qui sert au refroidissement de la tête d'injecteur, de la bougie d'allumage et prévient le dépôt de coke. Ce débit est représenté par une entrée d'air dans le calcul LES (cf. section 8.2.3).

8.2.2 Maillage

Vu la complexité de la géométrie, le domaine de calcul a été maillé au moyen du logiciel CentaurSoft en non structuré (cf. section 5.4). La grille obtenue contient 173 000 nœuds soit 1.03 millions de cellules tétraédriques. La Fig. 8.3 montre la répartition des points dans le domaine : les cellules les plus petites

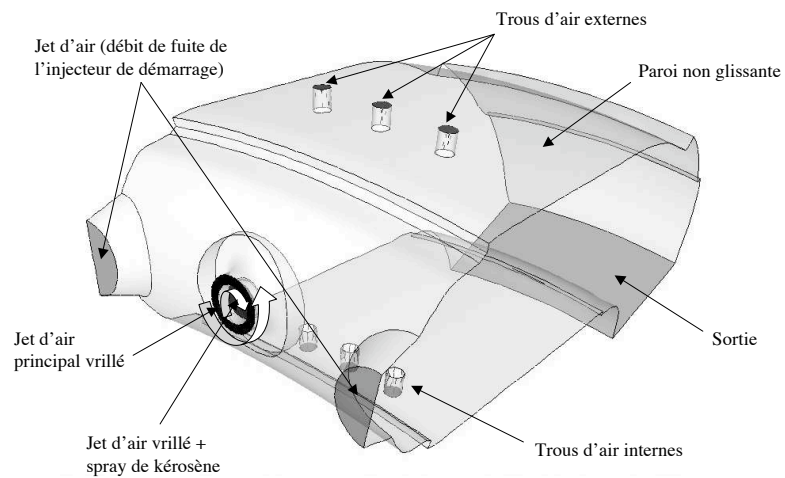


FIG. 8.2 - *Domaine de calcul et conditions aux limites (les surfaces sombres sont débitantes)*

ont été réservées à la zone principale de combustion située dans l'axe de l'injecteur. La taille de la plus petite maille conditionne le pas de temps explicite qui vaut 10^{-8} s dans le calcul réactif.

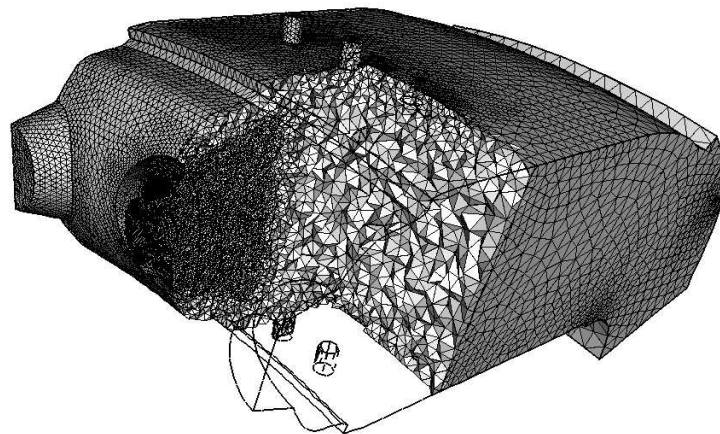


FIG. 8.3 - *Vue écorchée du maillage*

8.2.3 Conditions aux limites

La Fig. 8.2 décrit les conditions aux limites du domaine de calcul. Le type de conditions et les paramètres physiques correspondants sont résumés dans le Tab. 8.1. Les conditions de température, de pression et de richesse ont été fournies par Turboméca et correspondent au point d'opération d'un régime de démarrage. On note que la richesse globale de la chambre est proche de la stoechiométrie avec un rapport carburant/air de 6.6% alors que le régime de fonctionnement nominal se situe plutôt autour de 2%. La condition de périodicité impose de représenter un injecteur de démarrage complet alors que le secteur réel n'en comporte qu'une moitié. Par conséquent, le débit d'air fourni par cet injecteur est surestimé d'un facteur 2, ce qui compense exactement le déficit dû aux entrées d'air primaire qui ne sont pas prises en compte (cf. section 8.2.1).

Nom (Fig. 8.1)	Type de frontière	Paramètres physiques	
<i>Trous primaires internes</i>	Entrée d'air	Température :	$T_{air} = 273 K$
		Vitesse débitante :	$U_{bulk} = 27.7 m.s^{-1}$
		Débit massique :	$\dot{m}_{air} = 1.15 g.s^{-1}$
<i>Trous primaires externes</i>	Entrée d'air	Idem trous internes	
<i>Injecteur principal</i>			
Vrille externe	Entrée d'air	Température gazeuse :	$T_{air} = 273 K$
		Vitesse débitante :	$U_{bulk} = 31.1 m.s^{-1}$
		Débit d'air :	$\dot{m}_{air} = 2.08 g.s^{-1}$
Vrille interne	Entrée d'air	Température gazeuse :	$T_{air} = 273 K$
		Vitesse débitante :	$U_{bulk} = 18.1 m.s^{-1}$
		Débit d'air :	$\dot{m}_{air} = 0.48 g.s^{-1}$
	Spray de kérosène	Température liquide :	$T_l = 273 K$
		Diamètre de gouttes :	$d_0 = 25 \mu m$
		Débit de carburant :	$\dot{m}_F = 0.410 g.s^{-1}$
		Richesse globale :	$\phi_g = 0.93$
(basée sur les débits)			
<i>Fuite injecteur de démarrage</i>	Entrée d'air	Température :	$T_{air} = 273 K$
		Vitesse débitante :	$U_{bulk} = 5.7 m.s^{-1}$
		Débit massique :	$\dot{m}_{air} = 1.4 g.s^{-1}$
<i>Paroi de la chambre</i>	Paroi	non glissante, adiabatique	
<i>Sortie</i>	Pression imposée	Pression :	$P = 1.18 bar$

TAB. 8.1 - Conditions aux limites et paramètres physiques du point d'opération

Le carburant est représenté par une espèce unique possédant les propriétés moyennes du kérosène (cf. Tab. 8.2). Les données de cette espèce de substitution ont été fournies par Snecma Moteurs qui les utilise couramment dans les calculs RANS avec le code N3S-Natur. Le schéma simplifié décrivant la cinétique de réaction est le schéma mono-étape du JP10 détaillé dans la section 4.7.

Carburant : substitut de *kérosène*

Masse molaire :	W_F	=	$130.2815 \text{ g.mol}^{-1}$
Masse volumique :	ρ_l	=	782.03 kg.m^{-3}
Température de Clausius-Clapeyron :	T_{cc}	=	489.0 K
Pression de Clausius-Clapeyron :	P_{cc}	=	1.10^5 Pa
Enthalpie latente d'évaporation :	L_v	=	$323.19 \text{ kJ.mol}^{-1}$
Capacité calorifique à pression constante :	$C_{p,l}$	=	$3.0077 \text{ kJ.mol}^{-1}.K^{-1}$

TAB. 8.2 - Propriétés physiques du carburant (source Snecma Moteurs)

Pour être cohérent avec le modèle de sous-maille de type WALE utilisé dans cette étude (cf. section 4.3), les parois de la chambre sont représentées par une condition d'adhérence. La pression est imposée sur la section de sortie. Les jets issus des trous d'air primaires sont des jets transverses. Dans le calcul, ils sont amenés par un court canal fictif permettant d'éloigner l'effet de la condition limite. L'injecteur réel comporte une double vrille (non représentée) créant deux jets coaxiaux animés d'une forte composante de rotation. Pour le jet interne, cette composante est orientée dans le sens horaire alors que celle du jet externe est en sens opposé. L'aérodynamique de la chambre étant en grande partie pilotée par la dynamique de ces jets vrillés, il est essentiel que leurs caractéristiques soient correctement reproduites par la condition aux limites. Les moyens expérimentaux actuels ne permettent pas d'accéder aux mesures de vitesses en raison des faibles sections de passage de l'injecteur qui empêchent l'accès des instruments optiques ou intrusifs. Afin de caractériser l'aérodynamique de cet injecteur, une simulation LES non réactive incluant la géométrie entière de l'injecteur a été réalisée par L. Gicquel au Cerfacs [87]. Le champ de vitesse moyenne calculé dans la section de l'injecteur correspondant à l'entrée de la présente configuration (cf. Fig. 8.2) fournit les profils de conditions aux limites utilisés dans le calcul réactif (cf. Fig. 8.4). En l'absence de données expérimentales sur le spray, le diamètre des gouttes a été fixé à $25 \mu\text{m}$ et un profil de flux massique $F_{liq} = \rho_l \check{\alpha}_l \check{\mathbf{u}}_l$ a été supposé dans le jet de vrille interne où le film liquide est injecté. La valeur de F_{liq} a été fixée nulle sur l'axe et maximum sur le rayon d'injection du film.

On définit différents temps caractéristiques de la configuration de la façon suivante :

- le temps convectif global τ_{cv} :

$$\tau_{cv} = \frac{m_{tot}}{\dot{m}_{tot}} \quad (8.1)$$

où m_{tot} et \dot{m}_{tot} sont respectivement la masse totale contenue dans le volume de calcul et le débit massique total traversant la chambre. En supposant que les trajectoires du gaz et des gouttes sont proches, τ_{cv} donne aussi un ordre de grandeur du temps de résidence des gouttes dans la chambre.

- le temps de *swirl* τ_{sw} :

$$\tau_{sw} = \frac{2\pi R_{inj}}{U_\theta} \quad (8.2)$$

où R_{inj} et U_θ sont respectivement le rayon moyen et la vitesse azimutale moyenne du jet de vrille externe (cf. Fig. 8.4).

- le temps convectif d'injection liquide τ_{inj} :

$$\tau_{inj} = \frac{R_{inj}}{U_{l,bulk}} \quad (8.3)$$

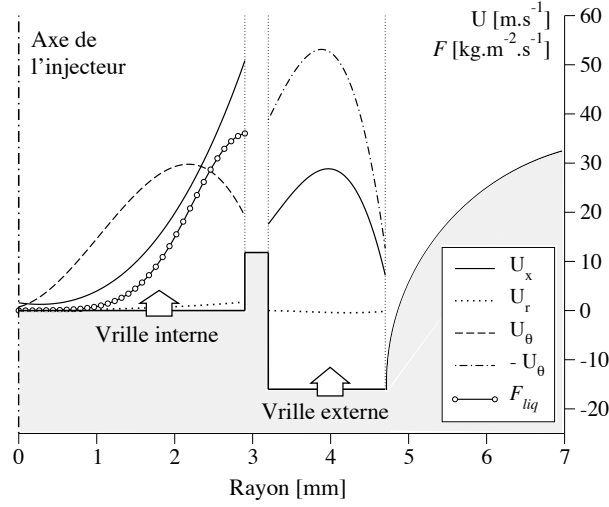


FIG. 8.4 - Profils de vitesse gazeuse axiale (U_x), radiale (U_r) et tangentielle (U_θ) et profil de flux massique de liquide F_{liq} imposés comme condition aux limites de l'injecteur principal

– le temps de relaxation des gouttes de carburant τ_p :

$$\tau_p = \frac{\rho_l d_0^2}{18\mu} \quad (8.4)$$

τ_{sw} et τ_p permettent de définir le nombre de Stokes des gouttes vis à vis du swirl (ou nombre de Stokes azimutal) :

$$St_\theta = \frac{\tau_p}{\tau_{sw}} \quad (8.5)$$

De la même façon, on construit un nombre de Stokes de l'injection axiale à partir de τ_{inj} et τ_p :

$$St_x = \frac{\tau_p}{\tau_{inj}} \quad (8.6)$$

Enfin, le nombre de Reynolds Re est défini à partir de la vitesse débitante et le rayon moyen du jet de vrille externe :

$$Re = \frac{U_{bulk} R_{inj}}{\nu} \quad (8.7)$$

Les valeurs des Eq. 8.2 à 8.7 sont données par le Tab. 8.3. Les nombres de Stokes azimutal et axial suggèrent que les effets inertiels des gouttes sont importants par rapport au jet d'air. La valeur élevée du nombre de Reynolds confirme le caractère turbulent de l'écoulement.

Le temps d'évaporation du spray est aussi un paramètre clé car il conditionne le régime de combustion. Dans les conditions thermodynamiques du point d'opération étudié, le carburant liquide se trouve dans un état de saturation où l'évaporation est impossible sans apport supplémentaire de chaleur (cf section 7.3.1).

Temps convectif :	τ_{cv}	=	8.3 ms
Temps de <i>swirl</i> :	τ_{sw}	=	0.503 ms
Temps convectif d'injection liquide :	τ_{inj}	=	0.267 ms
Temps de relaxation des gouttes :	τ_p	=	1.54 ms
Nombre de Stokes azimutal :	St_θ	=	3.06
Nombre de Stokes axial :	St_x	=	5.77
Nombre de Reynolds :	Re	=	10 500

TAB. 8.3 - Temps et nombres caractéristiques de l'aérodynamique du calcul LES

8.2.4 Condition initiale

Le régime stationnaire réactif présenté dans cette section est issu du calcul de la séquence d'allumage décrit dans le chapitre 9. Afin d'obtenir le régime permanent, les conditions aux limites de la section 8.2.3 ont été appliquées pendant 19 ms de temps physique soit $2.3\tau_{cv}$.

8.2.5 Modèles physiques, paramètres numériques et ressources informatiques

Le Tab. 8.4 résume les choix de modèles et de paramètres numériques ainsi que les ressources informatiques utilisées pour le calcul LES. Les 50 ms de temps physique calculé correspondent au temps nécessaire pour atteindre le régime stationnaire, c.-à-d le temps qu'il faut pour évacuer les effets transitoires liés à la séquence d'allumage. Ce temps simulé représente six fois le temps convectif global τ_{cv} . On note le recours à un opérateur de viscosité artificielle pour stabiliser le calcul des phases gazeuse et liquide. Afin de préserver la précision du calcul, cet opérateur est appliqué très localement, là où il est nécessaire, grâce à l'utilisation du senseur de Colin.

8.3 Aérodynamique de l'écoulement non réactif

Avant de s'intéresser au régime réactif, on cherche à comprendre l'impact des caractéristiques aérodynamiques de la chambre sur le processus de combustion en étudiant le régime non réactif carburé. Pour ce calcul préliminaire, on notera que le débit de fuite de l'injecteur de démarrage n'a pas été pris en compte. Les Fig. 8.5a et 8.5b fournissent les éléments géométriques utilisés pour présenter les résultats.

La Fig. 8.6a montre que le jet vrillé issu de l'injecteur principal éclate rapidement et génère une zone de recirculation très volumineuse. Ce phénomène, décrit par Lucca-Negro [139] et connu sous le nom anglais de *vortex break-down*, apparaît lorsque le nombre de *swirl* S (Eq. 8.8) est supérieur à une valeur critique proche de 0.6.

$$S = \frac{1}{R} \frac{\int_0^R u_x u_\theta r^2 dr}{\int_0^R u_x^2 r dr} \quad (8.8)$$

où R représente le rayon du jet, u_x la vitesse axiale et u_θ la vitesse azimuthale. En appliquant l'Eq. 8.8

Modèles physiques

Modèle de sous-maille :	modèle WALE (cf. section 4.3)
Modèle de combustion :	modèle TFLES (cf. section 4.6) (épaississement fonction du maillage)
Modèle de spray :	modèle Euler-Euler statistique (cf. chapitre 3) sans modèle pour le mouvement décorrélé avec modèle de sous-maille

Paramètres numériques

Schéma numérique :	Runge-Kutta 3 étapes (RK3) (cf. section 5.2)
Viscosité artificielle :	senseur de Colin, opérateur du 2 ^e et 4 ^e ordre (gaz et liquide)
Pas de temps :	$\Delta t = 10 \mu s$
Temps physique simulé :	$t = 50 ms$
Nombre d'itérations :	$N_{ite} = 500\,000$

Ressources informatiques (cf. section 5.5)

Calculateur :	SGI O3800 (CINES, Montpellier)
Nombre de processeurs :	128
Temps de calcul :	30 000 h CPU
Temps d'exécution :	240 h

TAB. 8.4 - Modèles physiques, paramètres numériques et ressources informatiques du calcul LES

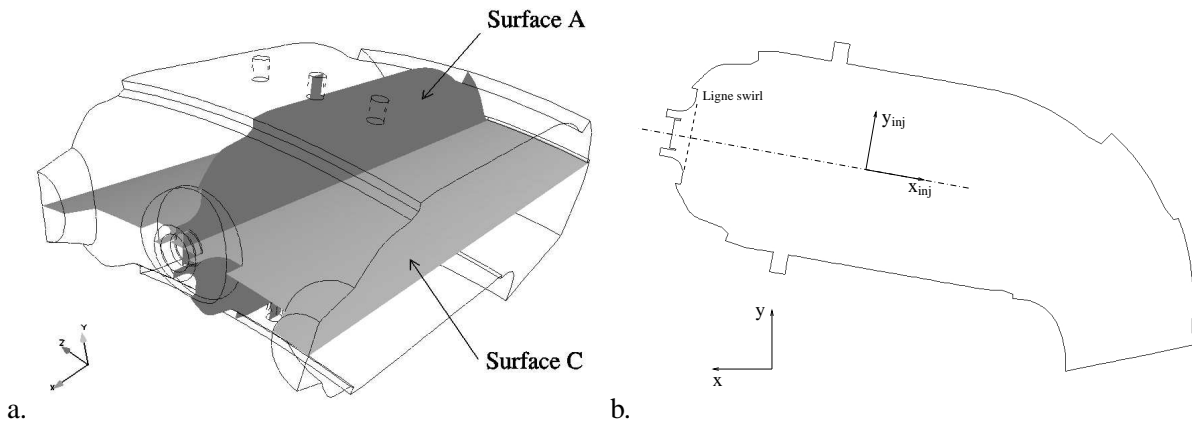


FIG. 8.5 - Surfaces de coupes utilisées pour présenter les résultats (a.). Surface A (b.) : changement de coordonnées et position de la ligne de calcul du nombre de swirl

à la section de sortie du jet (cf. Fig. 8.5b), on obtient $S = 0.91$. Cette valeur est un minimum car le nombre de *swirl* a tendance à augmenter dans la direction axiale lorsque l'écoulement rencontre un élargissement [227]. Cette valeur supérieure au nombre de *swirl* critique est conforme à l'observation d'un *vortex-breakdown* relativement intense. Ce type d'écoulement favorise la stabilisation de la

flamme [131] : en recirculant les gaz brûlés vers la zone amont, il permet le mélange entre les gaz chauds et les réactifs.

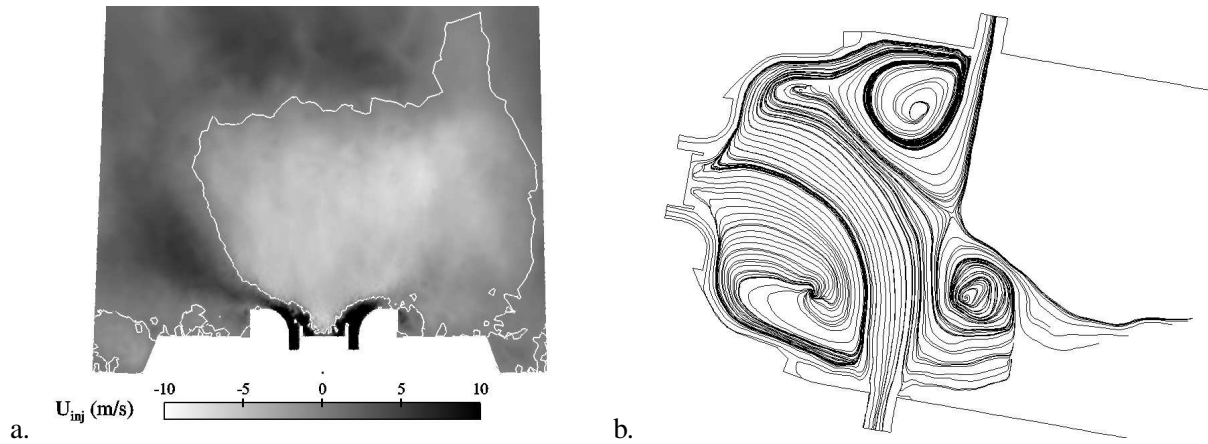


FIG. 8.6 - Champ moyen de vitesse axiale dans la surface C (a.). La ligne blanche délimite la zone de recirculation. Lignes de courant du champ moyen de vitesse dans la surface A (b.)

La zone de recirculation illustrée par la coupe dans la surface C (Fig. 8.6a) présente une asymétrie prononcée. Sur cette même coupe, la Fig. 8.7a illustre la position du tourbillon de forme annulaire responsable de la recirculation centrale. Au lieu d'être aligné sur l'axe de l'injecteur, l'axe de cet anneau est décalé nettement vers les z négatifs (à droite sur la Fig. 8.7a). Cette asymétrie est certainement la conséquence d'une interaction entre le mouvement de *swirl* du jet d'injecteur et les jets de trous internes et externes (cf. Fig. 8.2). Comme le montre la Fig. 8.6b, le jet de trou interne (inférieur) influence largement la zone de recirculation alors que le jet de trou externe (supérieur) pénètre moins profondément. Cette différence n'est pas liée à un écart de débit (conditions identiques) mais plutôt au décalage dans la position des trous en x_{inj} . En raison de cet écart géométrique, l'effet des jets internes sur la composante azimutale du jet d'injecteur est plus grand et provoque l'asymétrie observée sur les Fig. 8.6a et 8.7a.

La Fig. 8.7 compare le champ de vitesse moyenne du gaz et du spray dans la surface C. La principale différence se situe au niveau du point d'arrêt de la zone de recirculation (cercle en pointillés) qui remonte très près de l'entrée, dans le cas du gaz, à environ une fois R_{inj} dans le cas du spray. Cet écart de trajectoires joue un rôle dans l'écoulement réactif comme on le verra dans les sections 8.4 et 8.5.

8.4 Topologie de l'écoulement et mécanisme de stabilisation

8.4.1 Analyse du champ gazeux

La Fig. 8.8 montre que la zone de recirculation intense observée dans l'écoulement non réactif (cf. section 8.3) est toujours présente dans l'écoulement réactif et reste très proche de la sortie de l'injecteur principal. Elle est toutefois moins étendue dans la direction z , probablement en raison de la présence du

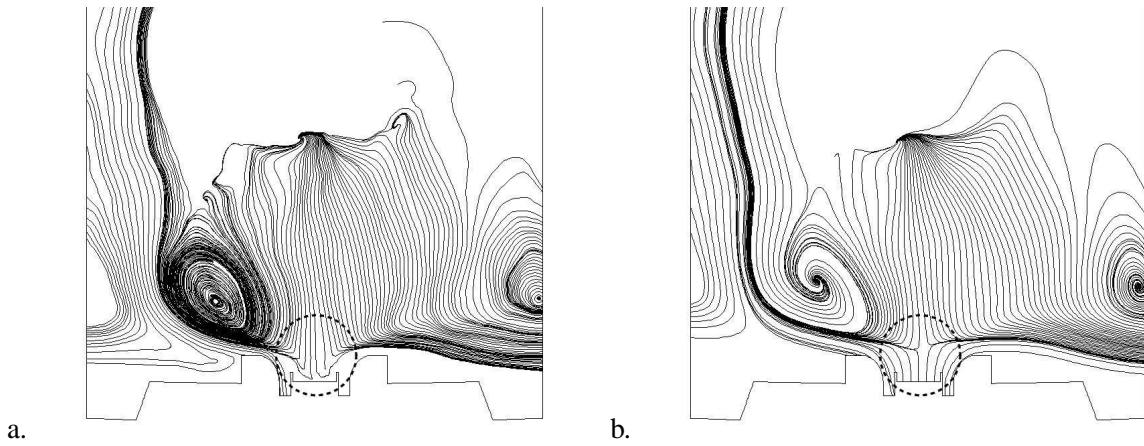


FIG. 8.7 - Lignes de courant du champ moyen de vitesse gazeuse (a.) et liquide (b.) dans la surface C

jet d'air issu de l'injecteur de démarrage. De plus, l'asymétrie de l'écoulement dans la surface C observée à froid semble moins marquée dans l'écoulement réactif.

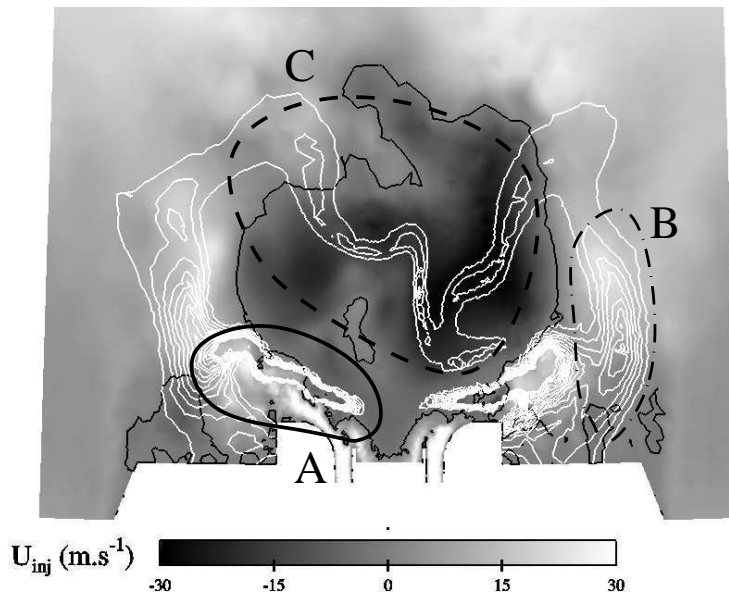


FIG. 8.8 - Champ instantané de vitesse axiale dans la surface C. Ligne noire fine : limite de la zone de recirculation. Iso-lignes blanc : taux de réaction

Sur la Fig. 8.8, on distingue plusieurs zones réactives :

- Zone A : commençant à l'aval immédiat de la sortie de l'injecteur principal et suivant la limite de la zone de recirculation (cf. Fig. 8.8) ;
- Zone B : située entre le jet de l'injecteur de démarrage et le jet éclaté issu de l'injecteur principal ;

– Zone C : localisée à l'intérieur de la zone de recirculation.

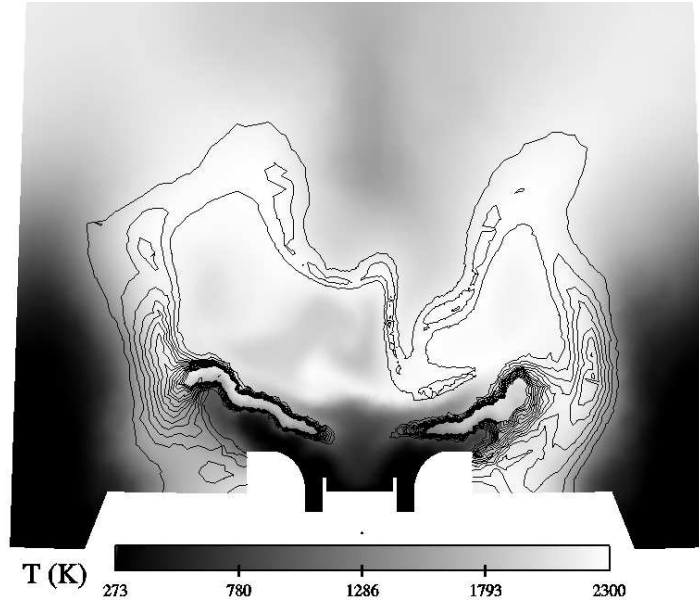


FIG. 8.9 - Champ instantané de température dans la surface C. Iso-lignes noires : taux de réaction.

La Fig. 8.9 met en évidence le rôle de la zone de recirculation dans la stabilisation de la flamme. En ramenant des gaz chauds vers l'amont, elle provoque l'évaporation rapide du spray. Dans le même temps, ces gaz chauds permettent d'initier la réaction entre le carburant évaporé et l'air issu de l'injecteur principal. On obtient alors la flamme de diffusion stable et de forte intensité correspondant à la zone A. Enfin, comme le montre la Fig. 8.10a, elle permet d'augmenter le temps de résidence de la vapeur de carburant en l'emprisonnant dans le volume recirculé. La chambre étant globalement proche de la stoechiométrie ($\phi_g = 0.93$), les apports d'oxygène conditionnent également la topologie de la flamme. La Fig. 8.10b montre que la région limitée par les flammes A, B et C ne contient que de la vapeur de carburant et des gaz brûlés. Le carburant non consommé dans la zone A brûle alors en diffusion avec l'air du jet de l'injecteur de démarrage (Zone B) et des jets issus des trous primaires (Zone C).

8.4.2 Influence du spray

La Fig. 8.11a montre que le spray, en raison de l'inertie des gouttes, pénètre dans la zone de recirculation du gaz, conformément à l'observation faite dans le calcul non réactif (cf. section 8.3). En subissant la traînée due à l'écoulement recirculé, les gouttes s'accumulent en amont et s'évaporent sous l'effet du transfert de chaleur par les gaz chauds (cf. Fig. 8.11b). Ce phénomène explique la présence de vapeur de carburant au sein de la zone de recirculation et sa concentration particulièrement élevée dans la région D (cf. Fig. 8.10a). Dans cette région, une quantité importante de chaleur est absorbée par évaporation du fait de la forte concentration de gouttes (cf. Fig. 8.11a et b). Le spray génère donc une zone très riche et relativement froide dans l'axe de l'injecteur, ce qui explique l'absence de réaction observée à cet endroit. Ce phénomène a également été remarqué par S. Pascaud dans une étude LES de foyer diphasique [181]. La

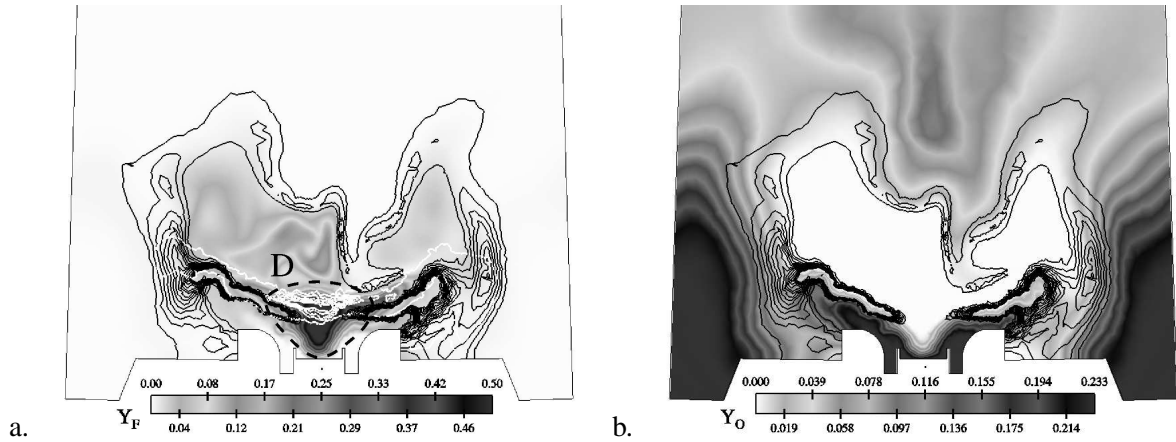


FIG. 8.10 - Champs instantanés de fraction massique de carburant (a.) et d'oxydant (b.) dans la surface de coupe C. Iso-lignes noires (a. et b.) : taux de réaction. Iso-lignes blanches (a.) : taux d'évaporation

Fig. 8.11a indique également que la phase liquide est totalement évaporée avant d'atteindre les régions B et C. Les flammes correspondantes sont donc des flammes purement gazeuses. Dans le cas d'une injection de carburant purement gazeux, on aurait certainement observé une topologie de flamme différente : le carburant ne serait pas pénétré dans la zone de recirculation mais aurait suivi la trajectoire du jet éclaté en créant un prémélange partiel. La fraction de carburant présente à l'intérieur du volume recirculé aurait été plus faible et le régime diffusif probablement moins marqué. Dans un tel écoulement où la trajectoire de la phase dispersée est localement très différente de celle du gaz, la question de la validité du modèle Euler-Euler peut être posée. L'étude de Riber *et al.* [207] sur la dispersion de particules solides dans un écoulement turbulent fortement recirculé montre que l'approche Euler-Euler en LES reproduit correctement les mesures expérimentales. La méthode peut donc être appliquée avec confiance dans le cas présent. En pratique, la plus grande incertitude provient du manque d'information sur les caractéristiques initiales du spray, la vitesse, la concentration et la taille initiale des gouttes influençant fortement leur dispersion et leur évaporation.

8.5 Structure de flamme

8.5.1 Indice de Takeno

Comme le proposent Réveillon et Vervisch [205], on utilise le critère de Takeno pour analyser le mode de combustion. Ce critère est basé sur un indice de flamme défini comme le produit scalaire des gradients des fractions massiques des réactifs : $\mathcal{T} = \nabla Y_F \cdot \nabla Y_O$. En normalisant \mathcal{T} , on construit un taux de réaction indexé qui permet de séparer le régime de diffusion du régime de prémélange :

$$\dot{\omega}_F^* = \frac{\mathcal{T}}{|\nabla Y_F \cdot \nabla Y_O|} \dot{\omega}_F \quad (8.9)$$

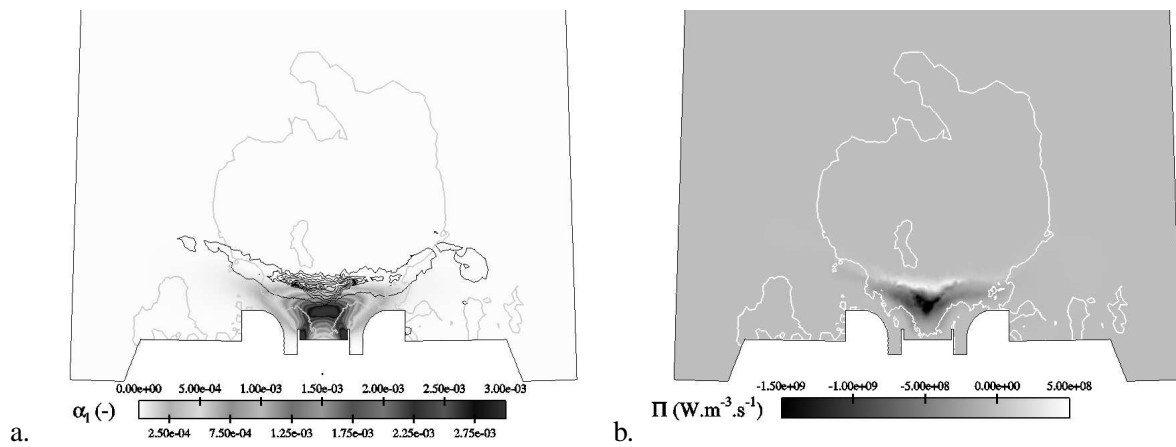


FIG. 8.11 - Champs instantanés de fraction volumique liquide (a.) et de taux de transfert de chaleur par évaporation (b.) dans la surface de coupe C. Lignes grises (a.) et lignes blanches (b.) : limite de la zone de recirculation. Iso-lignes noires (a.) : taux d'évaporation

Dans l'Eq. 8.9, $\dot{\omega}_F^* = \dot{\omega}_F$ pour une flamme de prémélange et $\dot{\omega}_F^* = -\dot{\omega}_F$ pour une flamme de diffusion. La Fig. 8.12 indique que l'essentiel de la combustion se fait en régime de diffusion pour lequel la flamme coïncide avec la ligne stoechiométrique. On note toutefois la présence d'une flamme de prémélange sur le rayon extérieur du jet de l'injecteur principal.

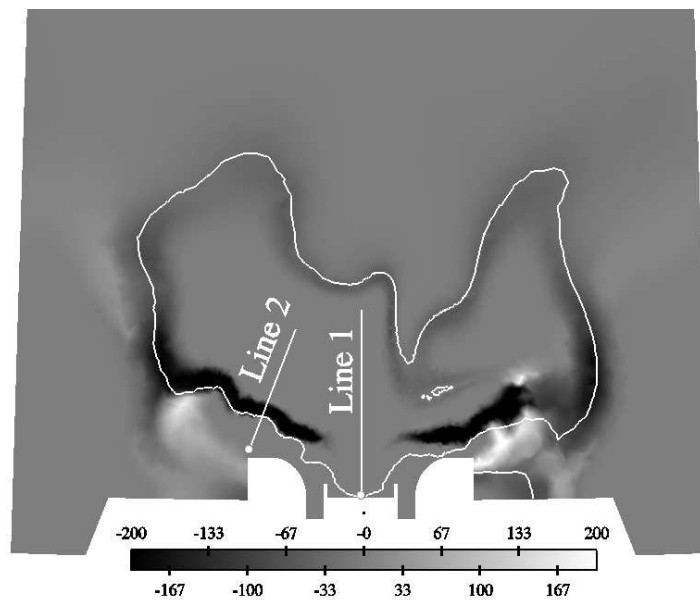


FIG. 8.12 - Champ instantané de taux de réaction indexé par le critère de Takeno ($-\dot{\omega}_F^*$) dans la surface de coupe C. Noir : régime de diffusion. Blanc : régime de prémélange. Ligne blanche : stoechiométrie. Les segments blancs correspondent aux lignes de coupe 1 et 2

8.5.2 Structure locale 1D

Afin de comprendre plus précisément la structure de la flamme située dans la zone A, on propose une analyse 1D du spray et de la flamme. La coupe 1 (cf. Fig. 8.12) correspond à l'axe de l'injecteur principal donc du spray. La coupe 2 est choisie normale au front de la flamme A.

L'accumulation de gouttes déjà notée sur la Fig. 8.11a s'observe clairement sur la Fig. 8.13a : la décroissance de la vitesse du spray en entrant dans la zone de recirculation ($U_{inj} < 0$) induit une augmentation de la fraction volumique par effet de « compression » de la phase dispersée. En aval, le taux d'évaporation important génère de la vapeur de carburant qui est convectée vers l'amont par le gaz recirculant. Cette vapeur est ensuite entraînée par le jet de la vrille externe et brûle dans la flamme de prémélange observée sur la Fig. 8.12. La Fig. 8.13b permet d'expliquer la localisation du maximum de taux d'évaporation Γ . En recirculant vers l'amont, les gaz brûlés rencontrent le spray et lui transfère de la chaleur de sorte que la température des gouttes augmente jusqu'à atteindre l'ébullition. Le taux d'évaporation élevé résultant conduit à la vaporisation totale du spray ($d \rightarrow 0$). Pour des raisons numériques, le diamètre ne vaut pas exactement 0 mais une valeur seuil (correspondant à 99.9% de masse évaporée) en-dessous de laquelle le taux d'évaporation est annulé (cf. section 7.2.5). Cette coupure permet d'éviter l'apparition de fractions volumiques négatives et de températures liquides aberrantes. Par ailleurs, comme le montre la Fig. 8.13b, le traitement numérique de l'ébullition permet d'éviter de dépasser la température locale d'ébullition lorsque les gouttes reçoivent un flux de chaleur très élevé en raison des gaz chauds (cf. section 3.3.2). La structure observée sur la Fig. 8.13 rappelle la dynamique d'évaporation rencontrée dans les flammes planes saturées étudiées dans la section 7.3. Dans ces flammes laminaires, le gradient de température qui déclenche l'évaporation est provoqué par le dégagement de chaleur. Dans la région de la coupe 1, ce gradient de température n'est pas la conséquence directe de la réaction mais de la recirculation des gaz brûlés.

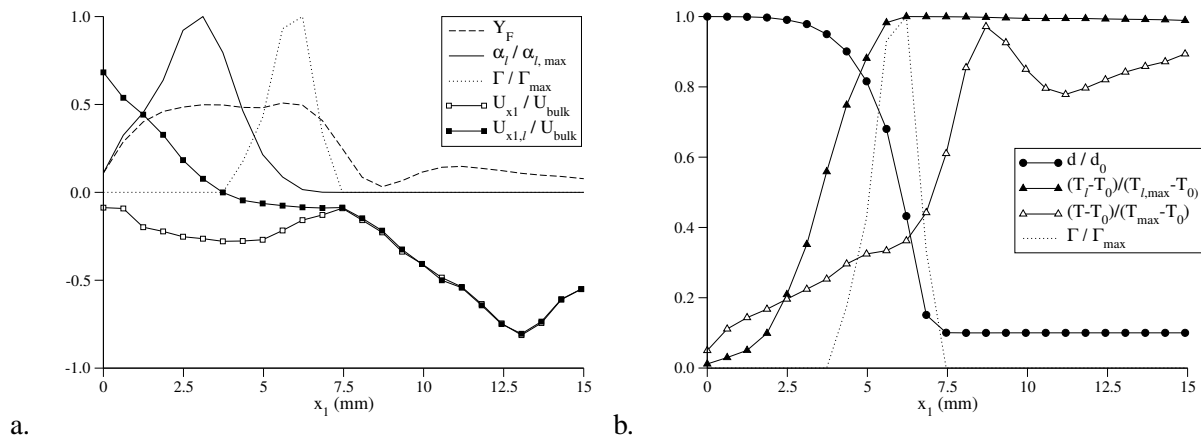


FIG. 8.13 - Coupe 1D dans le spray suivant la ligne 1 (cf. Fig. 8.12). Températures limites : $T_0 = 273\text{ K}$, $T_{l,max} = 502\text{ K}$ et $T_{max} = 2263\text{ K}$.

Dans la coupe 2 (cf. Fig. 8.12), les courbes de taux d'évaporation et de combustion montrent que le front de flamme et le front d'évaporation sont voisins (cf. Fig. 8.14) et que le taux de réaction est du

même ordre que le taux d'évaporation, preuve du couplage fort réaction et évaporation. À gauche du front de flamme (donc dans le jet de vrille externe), on a un mélange froid (cf. Fig. 8.14b) constitué d'air et de gouttelettes non évaporées correspondant au spray dans les conditions saturées. La courbe d/d_0 (Fig. 8.14a) montre que le spray est faiblement évaporé dans l'écoulement d'air. La vapeur de carburant présente n'est donc pas tant le produit de l'évaporation locale du spray que le résultat du mélange entre le jet d'air de vrille externe et le carburant gazeux produit initialement dans la région D (cf. Fig. 8.10a). À droite du taux de réaction, on trouve un mélange chaud de gaz brûlés et de vapeur de carburant. L'évaporation intense du spray dans ce mélange produit la vapeur de carburant qui alimente la flamme de diffusion située naturellement à proximité de la zone stoechiométrique c.-à-d. pour $sY_F = Y_O$. Plus précisément, le fait que le maximum du taux de réaction se trouve plutôt du côté riche révèle le défaut du schéma cinétique simplifié qui surestime le taux de réaction en régime riche (cf. section 4.7). Enfin, le léger minimum local de la courbe de température (Fig. 8.10b) à l'endroit du maximum de taux d'évaporation est dû à l'absorption de chaleur par le changement de phase. L'effet est notable car le flux de chaleur latente est important dans cette région fortement chargée en liquide (environ 11% de charge massique) (cf. Fig. 8.11). Ce phénomène de sous-adiabacité a certainement une influence sur la production de polluants.

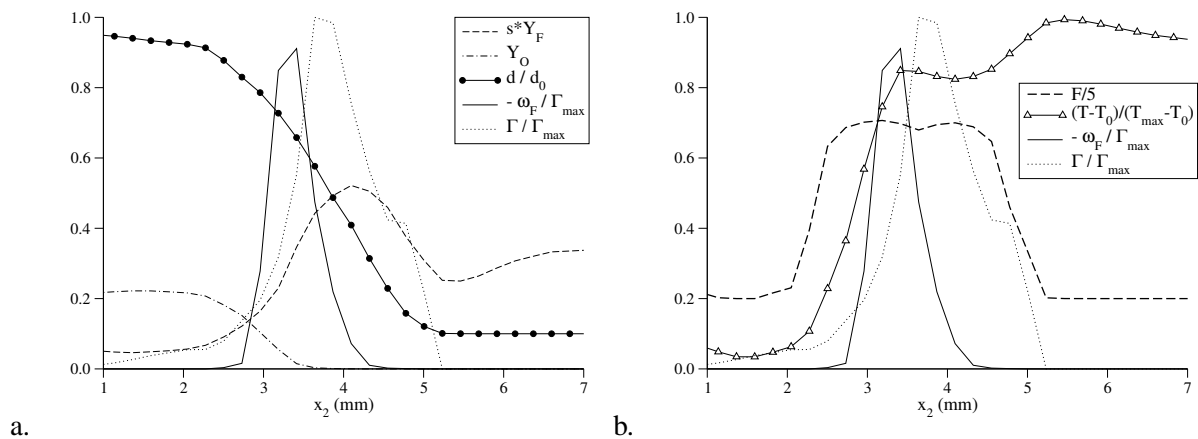


FIG. 8.14 - Coupe 1D dans la flamme suivant la ligne 2 (cf. Fig. 8.12). Températures limites : $T_0 = 273 \text{ K}$ et $T_{max} = 2078 \text{ K}$.

8.5.3 Modèle de flamme diphasique épaissie TP-TFLES

Sur la Fig. 8.14b, la courbe représentant le facteur d'épaississement F montre que le sensor d'épaississement S du modèle de flamme diphasique épaissie (TP-TFLES, cf. section 4.6.4) fonctionne comme attendu : F vaut 1 dans les zones non réactives et environ 3.5 autour du front de flamme, de sorte que le taux de réaction est résolu sur un nombre suffisant de points de maillage. Le taux d'évaporation est également bien résolu grâce à la tolérance du sensor S autour de l'épaisseur de réaction. Numériquement, le problème de l'évaporation-combustion sur le maillage LES est donc correctement traité. Il est néanmoins difficile d'évaluer l'impact réel du modèle TP-TFLES sur le

résultat dans la mesure où le calcul sans épaissement n'est possible qu'au prix d'une diminution par 3 de la taille des mailles. Un tel maillage est envisageable mais demande d'importantes ressources en calcul parallèle et n'a pas été abordé dans cette thèse. Par la suite, la mise au point d'un modèle d'épaississement amélioré (cf. section 7.3.8) nécessitera ce type de calculs sur maillage fin. L'étude devra valider le comportement du modèle en fonction du facteur d'épaississement pour les régimes de diffusion, d'une part, et pour l'interaction avec le spray, d'autre part.

8.5.4 Diagramme de fraction de mélange

Réveillon et Vervisch [205] proposent d'analyser la structure des flammes diphasiques en traçant les variables en fonction de la fraction de mélange z . Ils observent en particulier que le diagramme z - T de la flamme diphasique est différent du diagramme théorique d'une flamme de diffusion purement gazeuse (cf. Fig. 8.15b). Le nuage des points z - T du calcul LES est représenté sur la Fig. 8.15a. En régime riche ($z > z_{st}$), on note que la limite inférieure du nuage se situe au-dessus de la ligne de mélange et que la limite supérieure est en-dessous de la ligne d'équilibre. Réveillon et Vervisch [205] interprètent ces effets en raisonnant sur l'évolution lagrangienne du spray dans l'espace de la fraction de mélange. Le mélange diphasique initial se trouve dans le coin inférieur gauche du diagramme z - T . Dans le cas présent, ce mélange est saturé et ne peut pas produire de la vapeur de carburant à température constante. En effet, comme on l'a montré dans la section 7.3.1, la fraction maximale de vapeur de carburant dans un mélange diphasique dépend de la température (et de la pression) suivant la courbe de saturation $Y_F^{sat} = Y_F^{sat}(P, T^{sat})$ imposée par la loi de Clausius-Clapeyron :

$$Y_F^{sat} = \frac{W_F P_{cc}}{\bar{W}_\zeta P} \exp\left(\frac{W_F L_v}{\mathcal{R}} \left(\frac{1}{T_{cc}} - \frac{1}{T^{sat}}\right)\right) \quad (8.10)$$

Quand le spray pénètre dans la zone de préchauffage de la flamme, l'augmentation de Y_F^{sat} permet l'évaporation et la croissance de la fraction de mélange. Près de la stoechiométrie, la limite inférieure du nuage est proche de la courbe de saturation donc de l'équilibre thermodynamique du point de vue de l'évaporation. Le fait que la température se situe au-dessus de cette limite lorsque la richesse augmente indique que le mélange est hors équilibre : la dynamique de la combustion est plus rapide que celle de l'évaporation.

Dans un calcul LES de la chambre *Vesta* correspondant à d'autres conditions d'opération, un diagramme limité par la courbe de saturation a été obtenu (cf. Fig. 8.16).

L'inflammation du mélange l'amène à une température inférieure à la température d'équilibre d'une flamme gazeuse. En effet, comme on l'a noté dans l'analyse locale 1D, les mélanges riches sont associés à une forte charge liquide qui absorbe une partie de la chaleur dégagée par combustion en s'évaporant. La Fig. 8.17 montre qu'à partir de deux fois z_{st} , le transfert d'énergie par évaporation (Π) n'est plus négligeable devant le taux de dégagement de chaleur ($\dot{\omega}_T$), ce qui explique l'écart observé entre la température atteinte dans le calcul diphasique et la courbe théorique d'équilibre. Cet effet apparaît également sur le diagramme de Réveillon et Vervisch (cf. Fig. 8.15b).

La Fig. 8.18a met en évidence la défaillance du schéma cinétique mono-étape pour la prédiction du taux de réaction en régime riche. En effet, le maximum de taux de réaction du calcul LES correspond

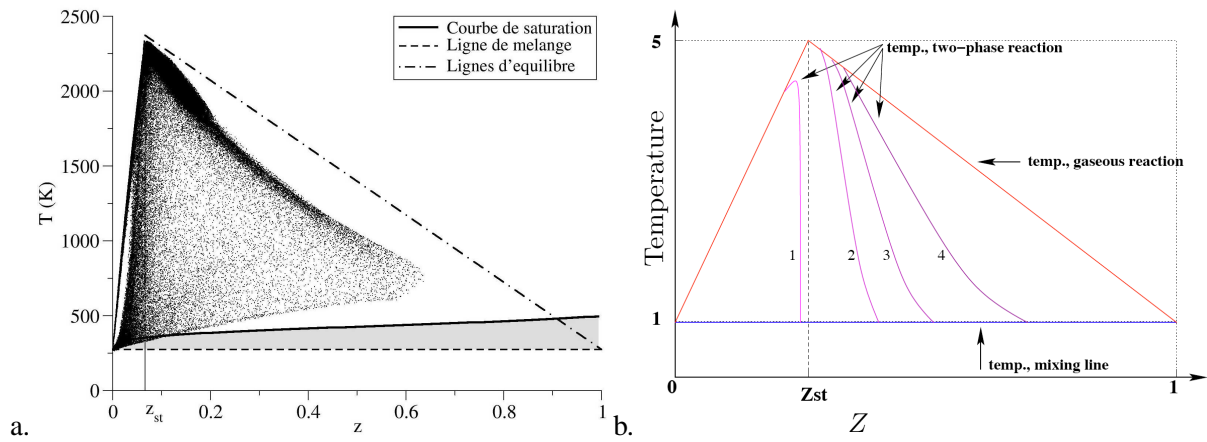


FIG. 8.15 - Température en fonction de la fraction de mélange (a.). Résultats DNS de Réveillon et Vervisch [205] (b.)

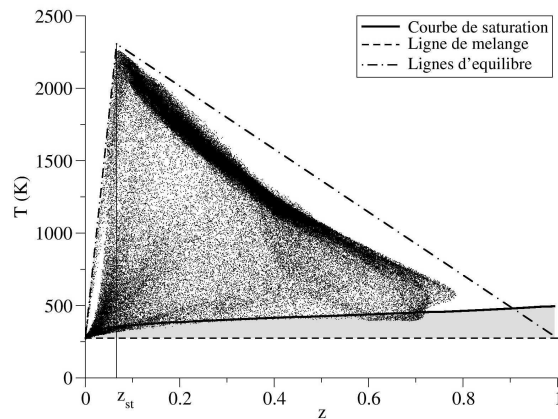


FIG. 8.16 - Température en fonction de la fraction de mélange pour un calcul LES Vesta dans d'autres conditions d'opération

à une fraction de mélange d'environ 0.15 soit une richesse de 2.5 alors que le maximum théorique se situe près de la stoechiométrie. Pour les calculs futurs, ce problème devra être corrigé en utilisant une des approches citées dans la section 4.7.2. Néanmoins, la Fig. 8.18b montre que l'essentiel des points se situent à $z < 0.1$ soit $\phi = 1.5$, ce qui permet de penser que l'erreur due au schéma cinétique n'affecte pas les propriétés essentielles de la flamme.

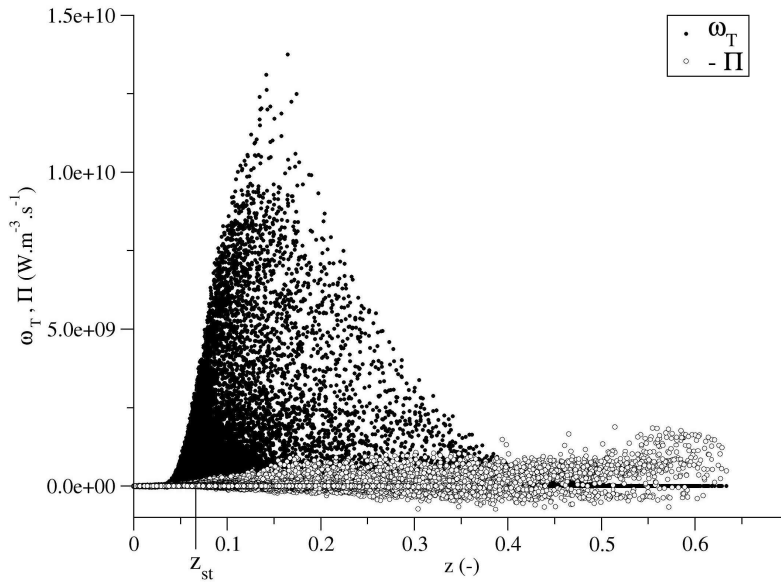


FIG. 8.17 - Taux de dégagement de chaleur ($\dot{\omega}_T$) et taux de transfert de chaleur par évaporation (Π) en fonction de la fraction de mélange.

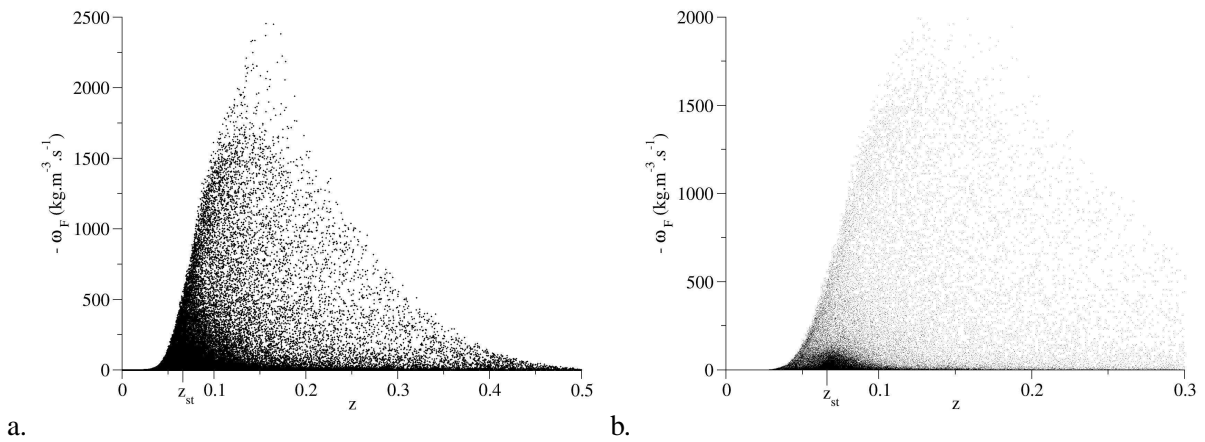


FIG. 8.18 - Taux de réaction du carburant ($\dot{\omega}_F$) en fonction de la fraction de mélange (a.). Zoom dans le coin inférieur gauche (b.)

8.6 Conclusion

La combustion en régime stationnaire dans un foyer d'hélicoptère a été étudiée par une approche LES diphasique eulérienne incluant l'ensemble des modèles décrits dans la partie I. Cette approche s'est montrée numériquement viable et raisonnable en temps de calcul. La simulation a permis d'observer un régime de flamme stabilisée dans lequel l'aérodynamique de l'écoulement est aussi importante que son

caractère diphasique. En pénétrant dans les gaz chauds recirculés, le spray génère une source continue de vapeur de carburant qui brûle essentiellement en diffusion avec les différents jets d'air qui alimentent la zone primaire. Dans la zone proche de l'injection, la flamme possède une structure diphasique avec une interaction forte entre l'évaporation du spray et la combustion. L'analyse locale 1D confirme le régime de flamme de diffusion mis en évidence par l'indice de Takeno. Que ce soit dans les régions diphasiques ou monophasiques, la zone réactive se situe en périphérie de la zone de recirculation, entre l'air frais apporté par les jets et le mélange chaud carburant-gaz brûlés prisonnier de cette recirculation. Enfin, les diagrammes de fraction de mélange mettent en évidence les effets de saturation du spray et de chaleur latente d'évaporation qui distinguent les flammes diphasiques des flammes de diffusion gazeuses.

L'approche développée ici est donc prometteuse dans le contexte de la simulation aux grandes échelles de la combustion diphasique turbulente. Les grandes structures turbulentes impliquées dans la stabilisation de la flamme sont résolues explicitement par la méthode LES. La méthode Euler-Euler permet de prendre en compte les effets de premier ordre du spray sur la combustion moyennant un coût de calcul raisonnable (moins de la moitié du temps de calcul est consacré à la phase dispersée). Pour améliorer les capacités prédictives du code, des développements sont toutefois nécessaires. Tout d'abord, la variété des richesses rencontrées dans l'écoulement requiert l'utilisation d'une chimie prédisant un taux de réaction réaliste pour les régimes pauvres et riches. Ensuite, les structures de flammes observées dans la LES sont différentes des structures de flammes académiques monodimensionnelles sur lesquelles le modèle de flamme diphasique épaissie a été validé : des régimes de prémélange et de diffusion coexistent et les effets tri-dimensionnels sont très présents. Il est donc difficile d'évaluer l'impact du modèle TP-TFLES sur la simulation. Dans la perspective de futurs développements, la validation de ce modèle est nécessaire sur des cas intermédiaires en terme de complexité comme un cas académique turbulent ou un cas expérimental bien documenté [190, 268]. Cependant, en raison de la présence d'un régime de combustion partiellement prémélangée, un modèle de type *PCM* pourrait se relever mieux adapté (cf. section 4.6.1). L'utilisation de ce modèle nécessiterait certainement une adaptation permettant de prendre en compte, en plus de la fraction de mélange et de la variable d'avancement, une variable caractérisant l'effet du spray sur le taux de réaction filtré.

La compréhension des mécanismes stabilisant la combustion dans un foyer aéronautique est une première étape vers l'analyse des régimes où la combustion n'est pas encore stabilisée (allumage) ou en phase de déstabilisation (extinction). L'étude de l'allumage de la chambre *Vesta* fait l'objet du chapitre 9 puis de la partie IV.

Chapitre 9

Allumage d'un secteur de chambre

9.1 Introduction

Comme le montre la section 1.1.4, les régimes de combustion instationnaires intéressent particulièrement les industriels car ils imposent des limites de fonctionnement pour leurs moteurs. La LES, méthode instationnaire par définition, a déjà fait ses preuves dans la prédiction des instabilités de combustion [86, 146, 213, 225, 228, 258]. Une première simulation de l'allumage dans un secteur de foyer aéronautique a été réalisée par S. Pascaud au cours de sa thèse [181]. Cette étude a été présentée dans des conférences internationales [182, 183] et se trouve résumée dans l'article de Boileau *et al.* [28] soumis à *Flow, Turbulence and Combustion* (cf. annexe B). L'allumage du brûleur principal est provoqué par une bougie dont l'effet est modélisé par un terme source dans l'équation d'énergie. Le calcul montre l'importance du rôle de la phase liquide dont l'évaporation introduit un retard dans le déclenchement de la réaction et, en combinaison avec la dispersion turbulente des gouttes, influence la distribution de vapeur de carburant donc la propagation du front de flamme.

La séquence d'allumage simulée dans ce chapitre a lieu dans un secteur de la chambre *Vesta* dont le régime stationnaire a été étudié dans le chapitre 8. Par rapport à l'allumage par bougie évoqué ci-dessus, l'allumage de la chambre *Vesta* se distingue par l'utilisation d'un allumeur-torche (cf. section 1.1.3). Par ailleurs, la version d'AVBP utilisée pour cette simulation inclut le modèle LES pour la phase dispersée récemment développé par E. Riber [206] et détaillé dans la section 4.4. L'objectif est de tester les capacités du code à simuler un tel allumage par flamme-torche et d'identifier les mécanismes physiques mis en jeu.

La section 9.2 détaille les conditions initiales et présente une méthode permettant de modéliser de manière simple la flamme stationnaire générée par le dispositif d'allumage. Cette méthode conduit à mettre en place un scénario décrivant les conditions imposées pour chaque phase de la séquence d'allumage. Les sections suivantes présentent les résultats de simulation. Dans un premier temps, on cherche à retracer les phases de l'allumage au moyen de diagnostic temporels sur certaines grandeurs intégrales (section 9.3). Dans un second temps, on étudie l'évolution locale du front de flamme à partir d'images de l'écoulement à différents instants (section 9.4). Enfin, on complète cette étude par une analyse monodimensionnelle de la structure du front de flamme (section 9.5).

9.2 Configuration

La configuration générale du calcul d'allumage est identique à celle du calcul stationnaire décrit dans le chapitre 8 en terme de géométrie, maillage, point d'opération et pour les conditions aux limites autres que l'injecteur de démarrage. Dans cette section, on détaille les conditions particulières du calcul d'allumage : la condition initiale et la modélisation de l'allumeur.

9.2.1 Condition initiale

Lors d'une séquence d'allumage ordinaire, l'injection de carburant liquide a généralement lieu avant le déclenchement de l'étincelle ou la mise en route de l'allumeur. Il est donc naturel de démarrer le calcul d'allumage par une condition où la chambre est totalement carburée.

Comme on l'a montré dans la section 7.3.1, les conditions de pression et de température du régime de démarrage entraînent la saturation de l'air en vapeur de carburant pour une très faible fraction de carburant liquide évaporé. Pour un carburant donné, l'état saturé ne dépend pas du diamètre initial des gouttes mais de la température, de la pression et de la charge liquide. Dans le cas du kérosène utilisé dans le calcul, le processus d'évaporation est figé dès l'injection du spray dans la chambre et la quantité de vapeur de carburant initialement évaporée est négligeable. On se contente donc de regarder la répartition du carburant liquide dans le calcul non-réactif. La Fig. 9.1 indique une zone de forte richesse liquide (cf. définition en section 7.2.2) à l'aval immédiat de l'injecteur principal correspondant à l'effet d'accumulation des gouttes décrit dans la section 8.4. On note que la richesse est comprise entre 1 et 1.5 dans une bonne partie de la chambre. Seule la région centrale correspondant à la zone de recirculation est pauvre en raison du soufflage par les jets primaires (cf. Fig. 8.6b). Par ailleurs, la richesse globale initiale basée sur les débits de réactifs vaut $\phi_g = 1.48$. Ces conditions initiales suggèrent que la teneur en carburant ne sera pas un élément limitant dans le processus d'allumage.

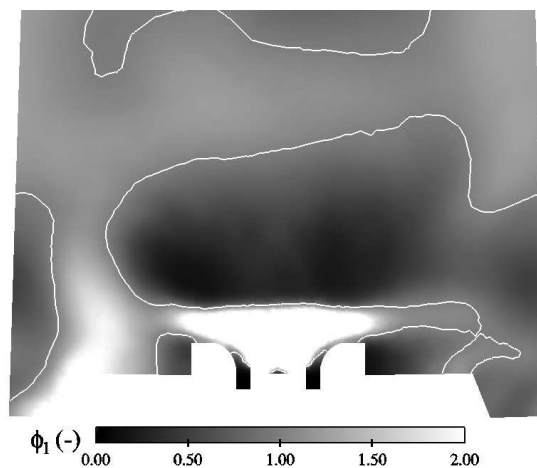


FIG. 9.1 - Champ moyen de richesse liquide dans la surface C. Ligne blanche : stœchiométrie.

9.2.2 Modélisation de l'allumeur

Dans la chambre *Vesta*, la source d'énergie initiale nécessaire à l'allumage est une flamme produite par des injecteurs de démarrage. Ces allumeurs sont eux-même allumés par bougie et peuvent être modélisés par des jets chauds. La Fig. 9.2a est une coupe schématique dans la surface C (cf. Fig. 9.6) qui montre la position d'un injecteur de démarrage entre deux injecteurs principaux. Cet injecteur de type pressurisé génère un spray de kérosène qui brûle sous la forme d'une flamme torche. L'étape d'allumage de l'injecteur de démarrage n'est généralement pas limitante car il est conçu pour s'allumer quelles que soient les conditions dans la chambre.

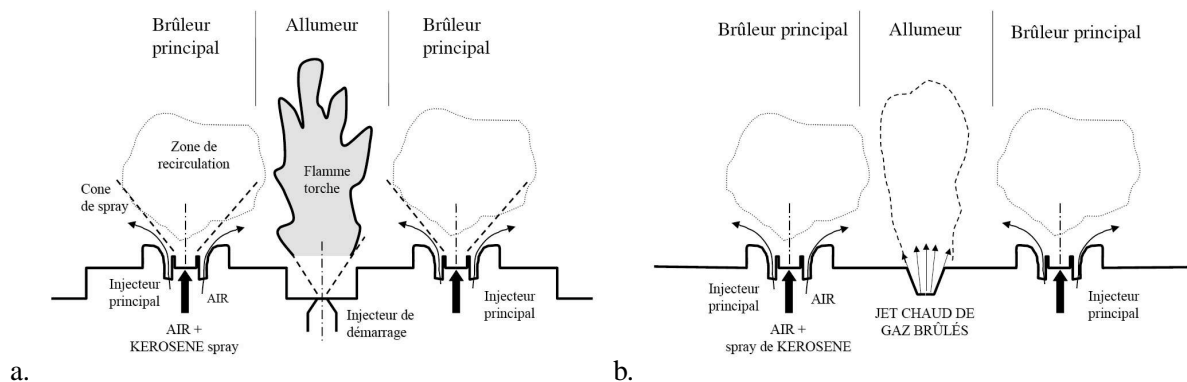


FIG. 9.2 - Schéma de la configuration réelle (a.) et de la configuration calculée (b.)

La Fig. 9.2b montre comment la flamme torche a été remplacée par un simple jet de gaz chauds. La composition et la température de ce gaz sont fixées en supposant la combustion stœchiométrique du kérosène dans l'air (cf. Tab. 9.1). L'injection d'un gaz inerte à température élevée permet de fournir une partie de la puissance de l'allumeur sous la forme d'un flux d'enthalpie, en évitant de traiter le problème complexe de l'allumage par bougie d'un spray de carburant. La position de l'axe de l'allumeur a été conservée et les paramètres du jet ont été calibrés de manière à fournir une puissance thermique et une longueur de pénétration raisonnable. L'effet dynamique de ce jet chaud sur l'écoulement environnant froid est plutôt faible du fait du rapport élevé des masses volumiques. Par conséquent, une composante azimutale a été rajoutée dans le but de reproduire l'expansion de la flamme originale issu du spray conique creux. Le nombre de *swirl* du jet correspondant vaut $S = 0.6$. Une telle simplification ne peut certainement pas produire des résultats quantitatifs. Néanmoins, d'intéressantes analyses peuvent être réalisées concernant le processus d'allumage et de propagation de flamme dans cette configuration industrielle typique.

Y_{KERO}	Y_{O_2}	Y_{CO_2}	Y_{H_2O}	Y_{N_2}	$T (K)$	S	$\dot{m}_{jet} (g \cdot s^{-1})$
0	0	0.170	0.121	0.709	2370	0.6	0.62

TAB. 9.1 - Caractéristiques du jet chaud modélisant l'allumeur

9.2.3 Scénario d'allumage

Le déroulement de la séquence d'allumage est décrit par la Fig. 9.3. Au temps initial, on crée le jet chaud via une condition de débit relaxante afin de limiter les perturbations acoustiques. Ce transitoire d'injection dure environ 3 ms. Une fois l'allumage réalisé, on « éteint » l'allumeur ($t = 31 \text{ ms}$) afin de s'assurer que la stabilisation de la flamme n'est pas liée à l'énergie du jet chaud. Pour ce faire, le jet chaud vrillé est remplacé par un jet d'air non vrillé à 273 K. Ce flux correspond au débit de fuite de l'injecteur de démarrage (cf. section 8.2.1). Le calcul est poursuivi afin d'atteindre la convergence vers un écoulement stationnaire ($t = 50 \text{ ms}$).

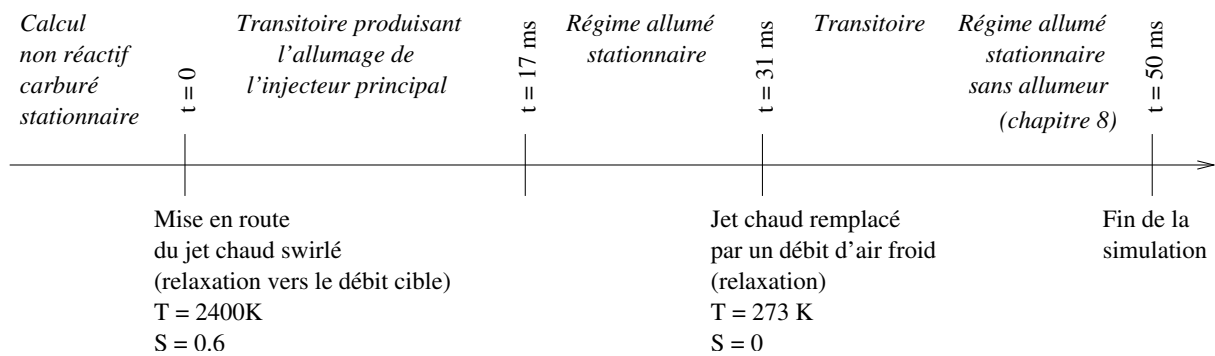


FIG. 9.3 - Déroulement du scénario d'allumage simulé

9.3 Diagnostics temporels

Dans cette section, on s'intéresse à l'évolution temporelle de certaines grandeurs intégrales caractéristiques de la combustion. Ces grandeurs sont définies à partir de la moyenne volumique sur le domaine de calcul de volume V : $\langle \cdot \rangle = \frac{1}{V} \iiint_V \cdot dV$ et sont détaillées dans le Tab. 9.2. La puissance thermique introduite par le jet chaud est évaluée à partir du débit massique du jet \dot{m}_{jet} et de la différence d'enthalpie Δh_{jet} entre les gaz chauds à 2370 K et l'air à 273 K.

La Fig. 9.4a montre l'évolution de la masse de carburant au cours du temps. Dans les premiers instants du calcul, le taux d'évaporation est négligeable puis augmente sous l'effet du jet chaud. À environ 4 ms, cette augmentation s'accélère et la réaction chimique intervient. On note alors une brusque augmentation des taux d'évaporation et de réaction jusqu'à $t = 17 \text{ ms}$. Cette phase correspond à l'évaporation et la combustion de la masse de carburant initialement présente dans la chambre. On observe ensuite un régime stabilisé où le carburant évaporé correspond au débit injecté. La richesse globale étant supérieure à 1 initialement et pendant la durée d'injection du jet chaud (cf. section 9.2.1), la masse de carburant brûlée reste inférieure à la masse évaporée, jusqu'au temps 31 ms où le débit d'air supplémentaire est injecté. Dans ces conditions, la chambre est légèrement pauvre (cf. section 8.2.3) et tout le carburant liquide évaporé est consommé par combustion. À 50 ms, l'écoulement est bien stationnaire du point de vue des taux d'évaporation et de combustion. Par rapport à la valeur initiale de l'écoulement non

Masse totale d'oxydant :	$m_O = V \langle \rho Y_O \rangle$
Masse totale de carburant gazeux :	$m_F = V \langle \rho Y_F \rangle$
Masse totale de carburant liquide :	$m_l = V \langle \rho_l \alpha_l \rangle$
Taux de réaction du carburant :	$\dot{\Omega}_F = V \langle -\dot{\omega}_F \rangle$
Taux d'évaporation :	$\dot{\Omega}_{ev} = V \langle \Gamma \rangle$
Dégagement de chaleur intégral :	$\dot{Q}_c = V \langle \dot{\omega}_T \rangle$
Transfert de chaleur par évaporation :	$\dot{Q}_{ev} = V \langle \Pi \rangle$
Puissance thermique du jet chaud :	$\dot{Q}_{jet} = \dot{m}_{jet} \Delta h_{jet}$
Température moyenne :	$T_m = \langle T \rangle$

TAB. 9.2 - Définition des grandeurs intégrales

réactif, la masse totale de carburant gazeux m_F et liquide m_l est faible ce qui suggère que les réactifs occupent un volume restreint dans la chambre. Autrement dit, la zone de combustion est proche de la zone d'injection.

On définit les différentes richesses moyennes de la manière suivante :

$$\text{richesse gazeuse : } \phi_g = s \frac{m_F}{m_O} \quad (9.1)$$

$$\text{richesse liquide : } \phi_l = s \frac{m_l}{m_O} \quad (9.2)$$

$$\text{richesse totale : } \phi_t = \phi_g + \phi_l \quad (9.3)$$

La Fig. 9.4b montre que la richesse gazeuse augmente sous l'effet de l'évaporation. Le maximum atteint à 17 ms correspond à un état transitoire où la totalité de la masse de carburant liquide a été évaporée mais ne peut pas brûler intégralement faute d'oxydant. Une fois le jet chaud converti en jet d'air, la richesse totale diminue et tend vers la richesse globale de 0.93 imposée par le rapport des débits (cf. section 8.2.3). Contrairement aux taux d'évaporation et de réaction, la convergence des richesses est à peine atteinte car elle est liée au temps convectif qui est largement supérieur au temps de combustion.

La Fig. 9.5 montre l'augmentation du dégagement de chaleur liée à l'emballement de la réaction. À partir de 4 ms, son niveau est supérieur à la puissance thermique du jet chaud et le reste jusqu'à la fin de la simulation. De façon analogue au taux de réaction, le maximum de \dot{Q}_c est atteint lorsque la combustion se propage à l'ensemble du volume d'écoulement contenu dans la chambre. Une fois stabilisé, sa puissance nominale vaut environ 14 kW. Multipliée par les 18 injecteurs de la chambre, cette valeur est cohérente avec la puissance d'un moteur réel dans les conditions de démarrage. Après le transitoire d'injection, on note que \dot{Q}_{jet} est sujette à des variations importantes en raison des perturbations acoustiques dues à l'allumage. Dans la phase allumée-stabilisée, son niveau vaut environ le tiers de la chaleur dégagée par combustion. On note que le transfert de chaleur par évaporation \dot{Q}_{ev} atteint un niveau non négligeable durant la phase d'emballement, valant jusqu'au tiers du dégagement de chaleur, alors qu'elle représente moins de 5% dans le régime stabilisé. L'évolution de la température moyenne T_m est liée aux trois transferts d'énergie décrits ci-dessus et peut se décomposer en quatre temps. Tout d'abord, elle augmente en pente douce sous l'effet du jet chaud. Lors de l'emballement, T_m suit une croissance linéaire jusqu'à $t = 16$ ms. Au-delà, elle reste quasiment constante durant le régime stabilisé. Une fois le jet chaud

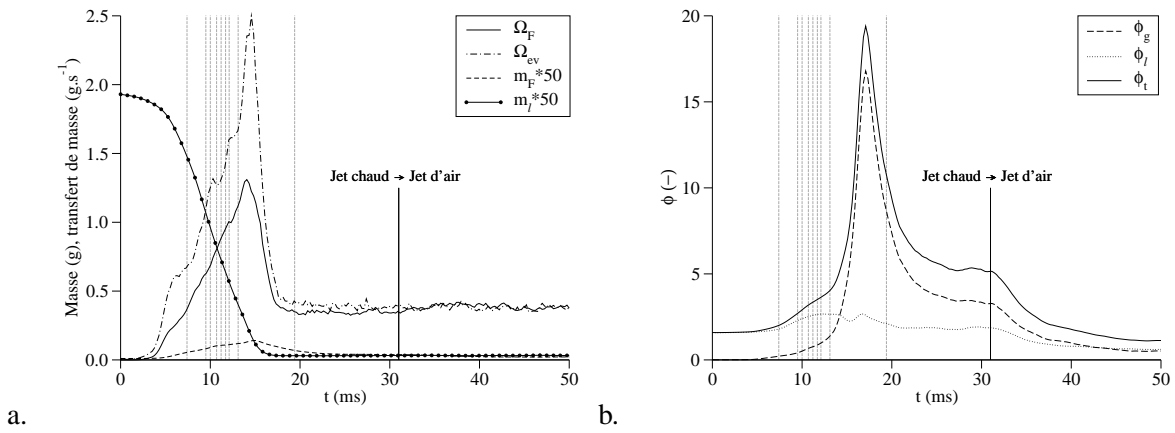


FIG. 9.4 - Taux intégral de réaction ($\dot{\Omega}_F$) et d'évaporation ($\dot{\Omega}_{ev}$) du carburant, masse totale de carburant gazeux (m_F) et liquide (m_l) dans le domaine en fonction du temps (a.). Richesse moyenne gazeuse (ϕ_g), liquide (ϕ_l) et totale (ϕ_t) en fonction du temps (b.). Les pointillés verticaux symbolisent les différents instants des Fig. 9.7 et 9.8.

converti en jet d'air ($t = 31 \text{ ms}$), T_m diminue légèrement pour tendre vers une valeur liée à la richesse globale.

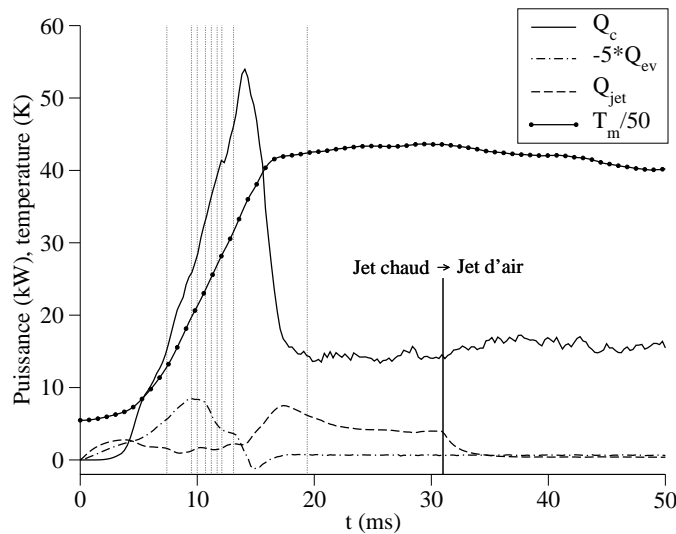


FIG. 9.5 - Taux intégral de dégagement de chaleur (\dot{Q}_c) et de transfert de chaleur par évaporation (\dot{Q}_{ev}), puissance thermique du jet chaud (\dot{Q}_{jet}) et température moyenne (T_m) dans le domaine en fonction du temps. Les pointillés verticaux symbolisent les différents instants des Fig. 9.7 et 9.8.

Finalement, l'évolution temporelle des grandeurs intégrales permet de décrire la séquence d'allumage de la façon suivante :

- Phase 1** ($0 \rightarrow 4 \text{ ms}$) : le jet chaud produit une source de chaleur constante qui permet d'évaporer localement du carburant liquide et d'initier une réaction ;
- Phase 2** ($4 \rightarrow 17 \text{ ms}$) : la réaction s'emballe et se propage à l'ensemble du volume de la chambre ;
- Phase 3** ($17 \rightarrow 31 \text{ ms}$) : après épuisement des réactifs le taux de réaction est stationnaire et imposé par les conditions d'injection ;
- Phase 4** ($31 \rightarrow 50 \text{ ms}$) : la conversion du jet chaud en un jet d'air frais diminue la richesse de la chambre et la combustion tend vers un régime stationnaire.

9.4 Analyse des champs instantanés

L'analyse des grandeurs intégrales permet de distinguer les phases principales de la simulation mais ne fournit pas d'information sur le mécanisme précis responsable de la propagation de la flamme de l'allumeur vers l'injecteur principal. Dans cette section, on s'intéresse à l'évolution locale du front de flamme afin de comprendre plus en détail ce mécanisme.

Le caractère fortement tridimensionnel et instationnaire de l'écoulement rend difficile sa représentation graphique en deux dimensions. Les surfaces de coupe B et C définies sur la Fig. 9.6 tentent de présenter l'essentiel des propriétés locales de l'écoulement à différents instants (Fig. 9.7 et 9.8). Les différentes coupes sont référencées selon l'exemple suivant : coupe C de la Fig. X au temps $t = 7.4 \text{ ms} \rightarrow \text{Fig. X-(7.4C)}$.

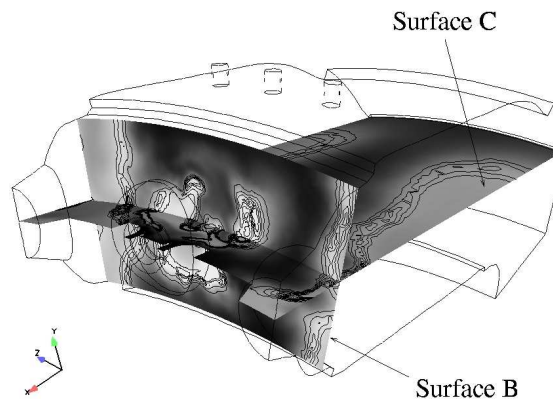


FIG. 9.6 - Surfaces de coupes B et C utilisées pour présenter les résultats

La Fig. 9.7-(7.4) correspond à un instant de la *phase 2* (cf. section 9.3) où le jet chaud génère une flamme de diffusion entre l'air et le carburant entraîné et vaporisé dans le jet par les gaz chauds. On note que la zone de recirculation intense observée dans l'écoulement non réactif (cf. section 8.3) est toujours présente et capture une partie des gaz chauds issus du jet d'allumeur. Les limites de ce jet subissent un plissement dû au cisaillement entre le jet chaud et le jet principal. Ce plissement permet la présence transitoire de la flamme du jet chaud aux abords de la zone de recirculation. Au temps $t = 9.5 \text{ ms}$

(Fig. 9.7-(9.5)), cette interaction est si forte que la zone réactive pénètre à l'intérieur de la zone de recirculation, subit un fort étirement et prend la forme d'un « appendice » orienté vers l'amont (cf. Fig. 9.9). Aux instants suivants (Fig. 9.7-(10.0) et 9.7-(10.7)), cet étirement est tel que l'appendice est rompu, isolant une petite cellule de gaz chauds limitée par un front réactif. Ce volume est convecté vers l'amont jusqu'à l'aval immédiat de l'injecteur principal (cf. Fig. 9.7-(11.2)). Il se stabilise près du point d'arrêt de la zone de recirculation où la vitesse de l'écoulement est plus modérée (cf. section 8.3). Tout près de ce point d'arrêt la recirculation maintient une température élevée mais la réaction ne peut subsister du fait de la richesse excessive (cf. Fig. 9.1). Le front réactif prend naissance à partir d'un rayon du jet où la richesse est plus faible et à tendance à se déployer dans la direction radiale (Fig. 9.7-(11.7) et 9.8-(12.1)). Dans le même temps, la recirculation capture une deuxième série de cellules réactives (Fig. 9.7-(10.7) à 9.7-(11.7)) qui viennent à la rencontre de la cellule initiale (Fig. 9.7-(11.7) et 9.8-(12.1)). Ce phénomène a pour effet d'élever la température à l'intérieur de la zone de recirculation (Fig. 9.8-(12.1)) ce qui permet de maintenir une combustion plus stable (Fig. 9.8-(13.1)). Sur la coupe 9.8-(13.1C), on distingue deux fronts de flamme très rapprochés. Le front amont correspond à une flamme de diffusion entre le carburant évaporé et l'air du jet de vrille externe (cf. section 8.4). Le front de flamme aval, également en diffusion, fait intervenir ce même carburant et l'air encore présent dans la zone de recirculation. Toutefois, cette topologie particulière n'est que transitoire et seul le front amont subsiste dans le régime stationnaire (Fig. 9.8-(19.4)). La zone réactive entourant le jet d'allumeur finit également par s'éteindre, l'oxydant faisant défaut. Dans le régime stationnaire, les jets de trous d'air primaire alimentent des fronts de diffusion localisés dans la région aval de la zone de recirculation (cf. coupe 9.8-(19.4B)).

L'observation du déplacement de la zone réactive du jet d'allumeur vers la zone d'injection (Fig. 9.7-(9.5) à 9.7-(11.2)) laisse penser que le mécanisme conduisant à l'allumage est de type convectif plus que propagatif. La Fig. 9.10 donne une information supplémentaire à ce sujet. À l'instant $t = 9.0 \text{ ms}$ (Fig. 9.10a), l'extrémité de la cellule de gaz chauds ($T > 1800 \text{ K}$) pénétrant dans la zone de recirculation est caractérisée par un taux de réaction élevé. 0.5 ms plus tard, alors que cette cellule s'est déplacée vers l'intérieur de la zone de recirculation, sur la même iso-surface de température, la réaction est moins intense. De plus, on n'observe pas de croissance significative de la taille de la cellule entre les Fig. 9.7-(9.5) et 9.7-(10.2), ce qui suggère que la vitesse de déplacement du front est lente devant la vitesse de convection. Cette différence de vitesse est quantifiée dans la section 9.5. La progression de cette cellule ne semble donc pas pilotée par un mécanisme de propagation du front de flamme mais plutôt par convection dans l'écoulement recirculant. Toutefois, comme le montre la Fig. 9.7-(9.0), le simple transport de gaz chauds vers l'amont ne suffit pas à initier la flamme stationnaire observée à $t = 13.1 \text{ ms}$ (Fig. 9.8-(13.1)) car ces points chauds sont rapidement diffusés au contact des jets d'air froid. Le rôle du front réactif entourant la cellule de gaz brûlés est alors de compenser ces pertes thermiques par le dégagement de chaleur et de faire « survivre » ce volume chaud jusqu'à ce qu'il atteigne la région où la flamme est susceptible de se stabiliser, c'est-à-dire à proximité du point d'arrêt de la zone de recirculation.

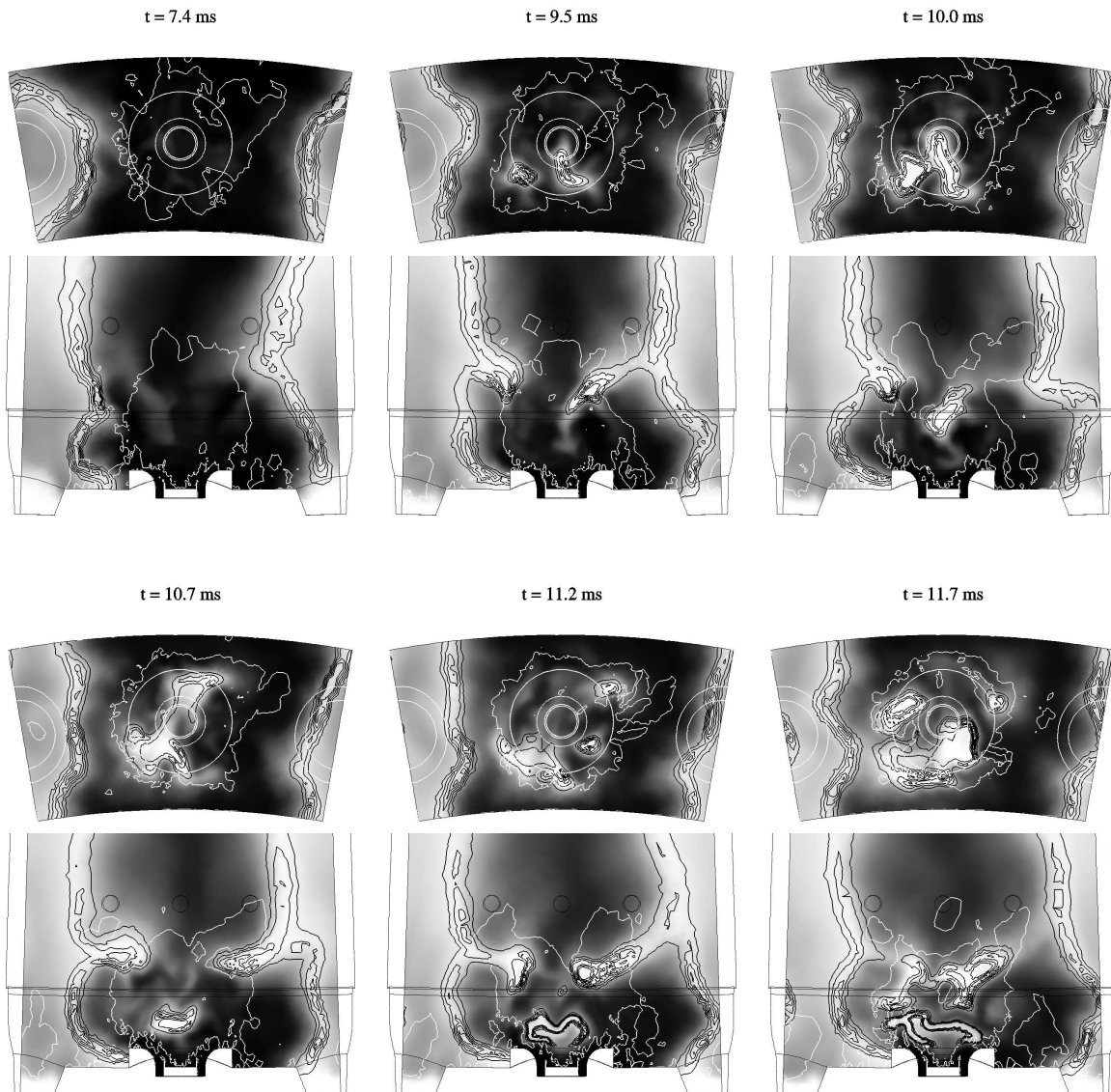


FIG. 9.7 - Propagation de la zone réactive du jet chaud vers l'injecteur principal dans les surfaces de coupe B et C (cf. Fig. 9.6). Échelle de gris : température du gaz (noir : 273 K \rightarrow blanc : 2200 K). Lignes noires : iso-lignes de taux de réaction. Lignes blanches : limite de la zone de recirculation.

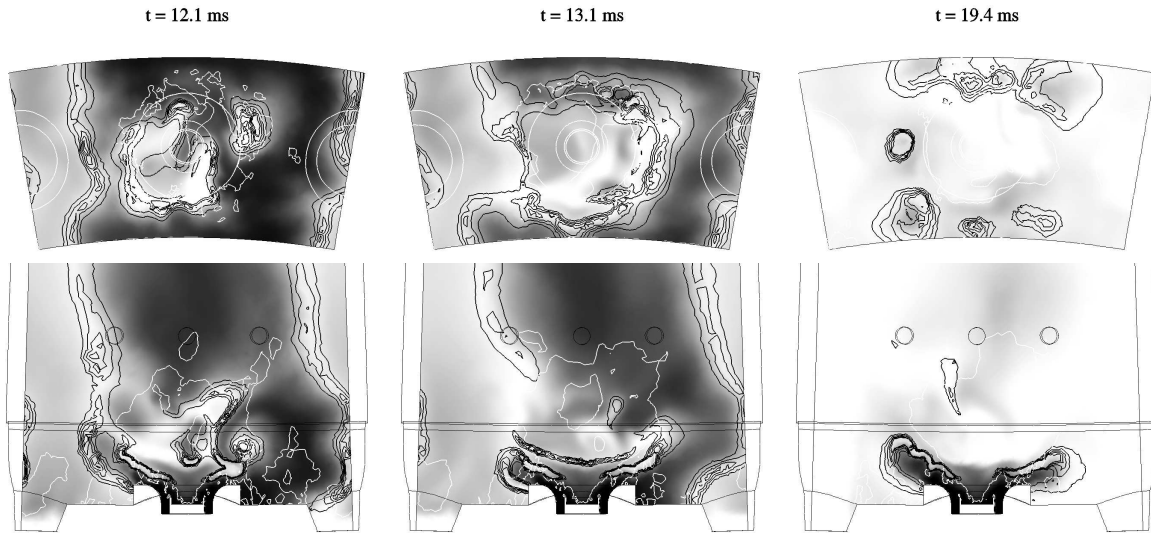


FIG. 9.8 - Stabilisation de la flamme au niveau de l'injecteur principal dans les surfaces de coupe B et C (cf. Fig. 9.6). Échelle de gris : température du gaz (noir : 273 K → blanc : 2200 K). Lignes noires : iso-lignes de taux de réaction. Lignes blanches : limite de la zone de recirculation.

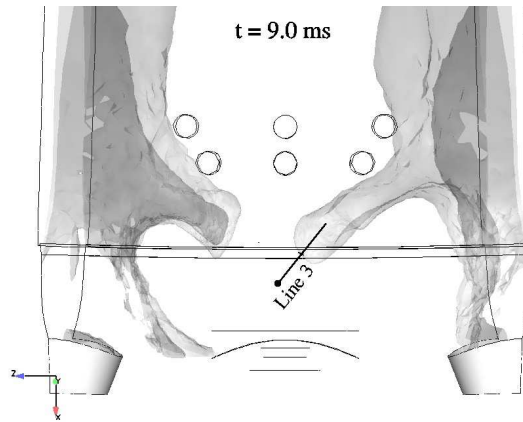


FIG. 9.9 - Iso-surface de température $T = 1800\text{ K}$ (en transparence) et localisation de la coupe 1D (3) utilisée dans la section 9.5

9.5 Analyse locale 1D

9.5.1 Structure de flamme

Afin de confirmer les observations faites sur les champs 2D concernant le mode de progression de la zone réactive, on analyse la structure locale de la flamme responsable de l'allumage en réalisant une

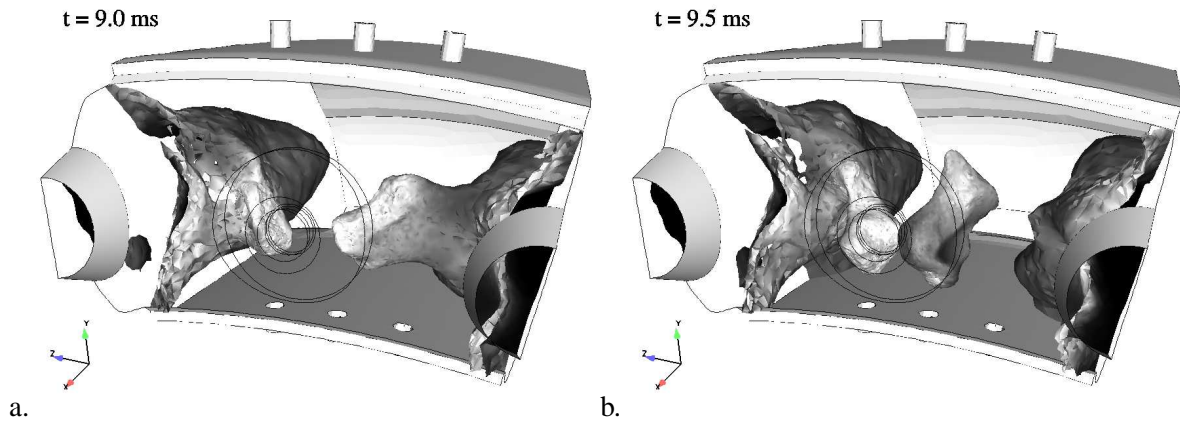


FIG. 9.10 - Iso-surface de température $T = 1800\text{ K}$ coloriée par le taux d'avancement (noir : 0 \rightarrow blanc : $300\text{ mol.m}^{-3}.\text{s}^{-1}$) à deux instants successifs de l'allumage : $t = 9.0\text{ ms}$ (a.) et $t = 9.5\text{ ms}$ (b.)

coupe 1D instantanée du front, là où il pénètre dans la zone de recirculation (cf. coupe 3, Fig. 9.9).

La structure observée sur la Fig. 9.11a est proche de celle de la flamme de diffusion A observée dans le régime stationnaire (cf. section 8.5). Pour $x_3 < 4\text{ mm}$, le mélange est plutôt froid ($T \approx 480\text{ K}$), partiellement évaporé et pauvre (la richesse totale vaut $\phi_t = 0.44$). De l'autre côté du front de flamme ($x_3 > 8\text{ mm}$), le gaz est un mélange de carburant évaporé et de gaz brûlés à température élevée. Entre les deux, on observe une zone réactive où le maximum du taux de réaction correspond à la stoechiométrie ($sY_F = Y_0$). Cette structure correspond à celle du front de la flamme de diffusion du jet d'allumeur qui a été étirée par le tourbillon de recirculation (cf. section 9.4). En considérant que cette flamme conserve un caractère propagatif du fait de la présence de carburant du côté oxydant, on calcule une vitesse de consommation de l'oxydant :

$$S_c = -\frac{1}{[\rho Y_O]_{0\text{ mm}}} \int_{0\text{ mm}}^{10\text{ mm}} \dot{\omega}_O dx_3 = 1.1\text{ m.s}^{-1} \quad (9.4)$$

S_c représente la vitesse à laquelle l'oxydant est consommé à travers le front de flamme. Par comparaison, la vitesse de l'écoulement mesurée du côté oxydant est supérieure à 5 m.s^{-1} (dirigée vers les x_3 négatifs). La progression du front de flamme est donc essentiellement due à un phénomène convectif et non à la propagation du front dans les gaz frais. Toutefois, comme évoqué dans la section 9.4, la réaction chimique est nécessaire pour compenser les pertes de la cellule chaude vers les gaz frais. Le fait que l'intérieur de cette cellule soit initialement riche en carburant (cf. courbe sY_F sur la Fig. 9.11a) joue certainement un rôle dans la mesure où les gaz frais sont initialement pauvres à l'intérieur de la zone de recirculation (cf. Fig. 9.1).

9.5.2 Modèle d'épaississement TP-TFLES

Dans le front instationnaire de la coupe 3, le comportement du modèle d'épaississement TP-TFLES est semblable à celui observé dans la flamme de diffusion du régime stationnaire (cf. chapitre 8). Là où

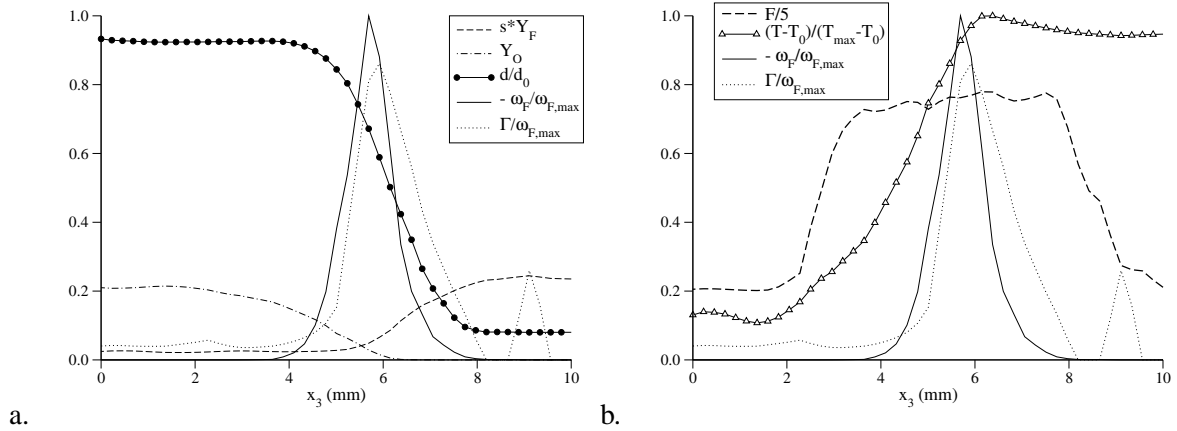


FIG. 9.11 - Coupe 1D dans la flamme (cf. Fig. 9.9)

il n'y a pas de réaction chimique, l'utilisation du senseur évite de perturber l'évaporation du carburant liquide et la diffusion de sa vapeur, deux phénomènes qui influencent fortement le champ de carburant gazeux comme l'a montré l'étude du chapitre 6. La mise en évidence du caractère convectif du mécanisme d'allumage suggère que l'incertitude sur la précision du modèle TP-TFLES n'a pas un effet de premier ordre sur la dynamique principale de ce mécanisme. Dans ce cas, le degré d'imprécision est lié :

1. au facteur d'épaissement : plus F est grand, plus le modèle est sollicité ;
2. à l'importance des effets diphasiques. Comme on l'a montré dans le chapitre 6, plus le diamètre de goutte est grand, plus l'évaporation influence la dynamique de la flamme. Donc, pour les diamètres de goutte importants, la probabilité de maintenir une réaction suffisamment intense dans la cellule de gaz chauds qui initie l'allumage peut être altérée par les erreurs du modèle. La probabilité ou le temps d'allumage s'en trouveraient alors modifiés.

9.6 Conclusion

Une séquence complète d'allumage d'un secteur de foyer aéronautique a été simulée en LES avec une prise en compte des effets diphasiques par l'approche eulérienne. L'analyse temporelle de grandeurs intégrales met en évidence des phases clés comme l'augmentation brutale de la réaction jusqu'aux maxima de taux de consommation et de dégagement de chaleur suivi d'une stabilisation vers le régime stationnaire. Les analyses locales plus détaillées ont révélé le processus permettant l'allumage de l'injecteur principal par l'allumeur-torche. Ce processus peut se résumer de la façon suivante :

1. L'allumeur crée une flamme-jet de diffusion ;
2. La macro-structure tourbillonnaire induisant la recirculation centrale du jet d'injecteur principal plisse le front de cette flamme et l'étire en le ramenant vers l'amont ;
3. Une cellule constituée de gaz chauds et de carburant entourés par une flamme de diffusion se retrouve capturée et isolée dans la zone de recirculation ;

4. Cette cellule chaude est convectée vers l'injection principale et brûle essentiellement en diffusion avec l'air frais ;
5. Elle se stabilise près du point d'arrêt amont de la zone de recirculation et le front s'étend dans la direction radiale ;
6. D'autres cellules réactives pénètrent la zone de recirculation qui se remplit progressivement de gaz chauds ;
7. Une flamme de diffusion s'établit de manière permanente entre le jet d'air de vrille externe et le carburant produit par évaporation du spray dans l'écoulement chaud recirculant.

Les conditions d'un allumage réussi sont donc réunies lorsque :

- la recirculation centrale est suffisamment intense pour amener des cellules de gaz chauds vers l'amont, dans une région où la combustion est stable ;
- le taux de réaction est suffisant pour compenser les pertes thermiques de ces cellules par diffusion et convection dans les gaz frais environnants.

Par rapport à un allumage gazeux, la deuxième condition dépend fortement des phénomènes diphasiques. Dans le cas présent, les variations locales de richesse totale (gaz + liquide) ne semblent pas influencer significativement l'allumage dans la mesure où cette richesse reste dans la limite de flammabilité pour les flammes monophasiques (cf. section 9.2.1). Toutefois, pour des flammes diphasiques, cette limite dépend aussi du diamètre initial des gouttes [16, 20, 259]. En effet, comme le montre la section 7.3.7, le temps caractéristique de la flamme τ_c croît avec le diamètre de goutte en raison de l'augmentation du temps d'évaporation. Ainsi, le phénomène d'évaporation a un impact sur le succès de l'allumage et sa durée. Si l'évaporation des gouttes est lente, le taux de réaction local se trouve diminué et la production des cellules chaudes responsables de l'allumage est ralentie voire impossible. Dans ce cas, la réalisation des phases 3 et 4 décrites ci-dessus est soit plus lente, soit impossible.

La LES représente actuellement l'outil idéal pour décrire ce type d'écoulement :

- le caractère transitoire de la méthode est précisément adapté aux aspects instationnaires de l'allumage ;
- le mécanisme de progression du front de flamme est piloté essentiellement par les grandes structures résolues par le calcul.

Cependant, des interrogations demeurent quant à l'influence du modèle de combustion turbulente. De plus, la description du spray initial reste approximative, en particulier concernant la taille des gouttes, paramètre important de l'allumage (cf. ci-dessus). Dans un injecteur aéronautique, le diamètre moyen des gouttes dépend généralement de la position radiale dans le spray. Cette variation pourrait être facilement prise en compte avec le modèle monodisperse actuel en appliquant un profil radial de diamètre comme condition d'injection du spray. Par la suite, les effets liés à une distribution locale de diamètre pourraient être modélisés grâce à l'extension polydisperse de la méthode eulérienne mésoscopique proposée par Mossa [173].

Quatrième partie

Allumage d'un foyer complet de chambre de combustion

Introduction

Le contenu de ce chapitre se présente sous la forme d'un article en préparation pour l'AIAA Journal. Cet article étant écrit en anglais, son introduction est en partie traduite en français ci-dessous. Des informations précisant le contexte de l'étude sont ajoutées en fin de section.

Le chapitre 9 a identifié les mécanismes responsables de l'allumage d'un secteur de chambre isolé par un allumeur-torche (*phase 2* de la Fig. 1.9). Comme le montre la section 1.1.5, pour un allumage complet de la chambre, le succès de cette étape est une condition nécessaire mais pas suffisante. En effet, suivant les conditions physiques et les caractéristiques technologiques du foyer et des allumeurs, le dispositif d'allumage peut réussir à allumer les premiers secteurs mais échouer dans la phase de propagation de secteur à secteur (*phase 3* de la Fig. 1.9). Le fabricant devra alors procéder à une coûteuse série d'essais/erreurs afin de concevoir un système d'allumage (position, puissance, nombre des allumeurs, etc.) permettant d'obtenir le succès de cette dernière étape. Comprendre et prédire l'ensemble des mécanismes à l'œuvre lors de l'allumage d'un foyer complet présente donc un intérêt manifeste pour l'industriel.

D'un point de vue scientifique, ce problème soulève de nombreuses et intéressantes questions. La phase initiale consécutive à l'apport extérieur d'énergie (*phase 1* de la Fig. 1.9) est un problème plutôt académique mais les deux autres phases ne le sont pas. Comment une flamme peut « sauter » d'un brûleur à l'autre (*phase 3*) est une question qui est rarement abordée dans les laboratoires car les installations expérimentales académiques sont limitées à un secteur pour d'évidentes raisons de coût. Ainsi, développer des outils prédictifs pour les trois phases de l'allumage s'avère intéressant mais limité par deux difficultés :

- La physique de l'allumage pendant la phase 1 est très complexe : même dans les écoulements gazeux laminaires prémélangés, de nombreux aspects de l'allumage ne sont pas encore compris. L'ajout de la turbulence et la présence de carburant liquide rend le problème encore plus difficile. Dans les écoulements laminaires, l'influence de l'énergie de la bougie [13, 19, 42, 126, 239], de l'écoulement moyen à l'endroit de la bougie [5, 18], de la cinétique détaillée [122, 240, 242], de la pression [241] sont toujours des questions ouvertes. La plupart des études ont été développées pour des configurations parfaitement prémélangées alors que les turbines à gaz aéronautiques (tout comme les moteurs à injection directe ou les moteurs-fusées) présentent des écoulements stratifiés, un mélange incomplet et instationnaire ainsi que l'évaporation de sprays. Malgré des expériences récentes d'allumage dans les écoulements stratifiés [2], très peu de modèles sont disponibles pour de telles configurations. De plus, bien que l'extension aux cas turbulents des modèles développés pour les écoulement laminaires soit une pratique courante dans la recherche en combustion (en particulier pour les moteurs à pistons [34, 124, 143, 193, 209]), aucun modèle actuel d'allumage

en écoulement turbulent n'est considéré comme réellement suffisant.

- Pendant les phases 1 et 2, les méthodes existantes peuvent s'appliquer. Ainsi, la simulation aux grandes échelles des écoulements réactifs a montré sa précision dans de multiples configurations [70, 80, 161, 194, 197, 229] y compris des cas d'allumage et de retour de flamme où d'importants mouvements de la flamme doivent être suivis [28, 244]. Toutefois, une difficulté majeure vient du fait que la LES doit être appliquée aux 360° de la chambre complète et non à un seul secteur comme dans la plupart des cas. Bien que d'autres groupes aient présenté des calculs LES dans un secteur couplé à l'écoulement dans le compresseur et la turbine [223], à la connaissance de l'auteur, aucune LES d'une chambre de combustion complète incluant tous les secteurs n'a été publiée à ce jour. La seule façon de réaliser une telle simulation est d'utiliser le calcul massivement parallèle.

L'objectif de ce chapitre est de présenter la LES d'une séquence d'allumage complète (phases 1 et 3) dans la chambre de combustion *Vesta*, décrite précédemment dans la partie III. Cette simulation a été réalisée sur 700 processeurs d'une machine Cray XT3. Les résultats montrent comment les premières flammes sont initiées près des deux allumeurs avant de se propager d'un brûleur à l'autre. La topologie de la flamme au cours de son mouvement est décrite et la notion de point de progression de la flamme (LP pour *leading point*) est introduite afin de suivre l'avancée du front dans le foyer. Les vitesses de propagation de ce LP sont mesurées et le rôle du swirl dans le contrôle de sa trajectoire est mis en évidence. L'étude illustre également les difficultés de post-traitement pour une telle flamme tridimensionnelle dans une géométrie complexe. Des compléments à cet article sont fournis en fin de partie. Ils décrivent d'une part, l'effet de la répartition de carburant liquide sur la propagation du front, d'autre part, la comparaison avec un calcul monophasique équivalent (cf. note ci-dessous).

Sur le plan pratique, la méthodologie de calcul et les étapes de pré-traitement ont été réalisées par l'auteur grâce aux moyens informatiques du Cerfacs. La réalisation du maillage complet et de la solution initiale a nécessité le recours à une machine dotée d'une grande capacité de mémoire (12 Go minimum) et la mise en place d'une procédure permettant de gérer cette mémoire de façon optimale. Le portage du code AVBP et l'exécution du calcul sur la machine Cray XT3 distante, mise à disposition par Cray, ont été réalisés par G. Staffelbach depuis le Cerfacs. Cette configuration a également donné lieu à de nombreux tests sur la machine Tera-10 du CEA et fait l'objet d'un article dans un numéro supplément de La Recherche [211].

Note : La réalisation de cette simulation fait suite à une première étude monophasique de l'allumage complet de la chambre *Vesta* (géométrie identique). Ce calcul LES a été réalisé (en partie) sur 2048 processeurs parallèles de l'IBM BlueGene/L de Rochester (US) et constitue une première dans le domaine du calcul haute-performance appliqué à la combustion dans les configurations industrielles. Il a été présenté dans les conférences INCA 2005 [26] et SIAM NC06 [27] et choisi par IBM pour figurer comme exemple en page d'accueil du portail internet consacré à BlueGene¹.

¹URL : <http://www-03.ibm.com/servers/deepcomputing/bluegenel.html>

LES of an ignition sequence in a full helicopter combustor

M. Boileau^{†,*}, G. Staffelbach[†], B. Cuenot[†], T. Poinso[‡] and C. Bérat[◊]

[†]CERFACS, Toulouse, France [‡]IMFT - CNRS, Toulouse, France [◊]Turbomeca (SAFRAN group), Bordes, France

Being able to ignite or reignite a gas turbine engine in a cold and rarified atmosphere is a critical issue for many manufacturers. In the VESTA combustor of Turbomeca, 18 main burners are ignited by two pilot flames. To simulate an extensive ignition sequence in this annular chamber, Large Eddy Simulation has been applied to the full 360 degrees geometry. Massively parallel computing (700 processors on a Cray XT3 machine) was essential to perform such a large calculation. Results show that liquid fuel injection has a strong influence on the ignition delays. Moreover, the rate of flame progress from burner to burner is much higher than the turbulent flame speed due to a major effect of the flow thermal expansion through the flame. This flame progress speed is also strongly modified by the main burners aerodynamics due to the swirled injection. Finally, a variability of the combustor sectors and quadrants ignition times has been highlighted.

Introduction

Ignition is a critical phase of all aero gas turbines. In aircraft engines, altitude reignition capability is an essential design constraint. In helicopter engines, where a fast and reliable lightup is needed for a wide range of altitudes, ignition can become a real difficulty because the combination of low pressure, low temperature and poor atomisation leads to expensive, complex and heavy ignition devices. A successful ignition sequence in a full engine requires typically three phases:

- I - Energy deposition: in a first step, a hot gas kernel must be initiated. This can be achieved by using a spark plug, a laser shot or a secondary igniter producing a source of hot gases.
- II - Flame ignition: the hot gases produced by the igniter must evaporate the liquid fuel (if it is present), heat the gas and initiate the first flame in the burners surrounding the igniter.
- III - Propagation: after this first ignition, the flame front must move from one burner to the next one until all burners are active. Aero gas turbine chambers can contain 14 to 20 burners so that the combustion process in an isolated sector for one burner must be strong enough to start combustion in the neighbouring sectors. In some cases, this cannot be achieved without additional igniters.

Designing igniters for aero gas turbines is a difficult task because the prediction of each of these three phases is still a significant challenge for most computational tools. A successful ignition requires a delicate adjustment between chamber and igniter devices in terms of igniter's power, position, number, etc. In most cases, trial and error processes must be used on full chamber experimental benches to determine adequate ignition systems. Some chambers/igniters combinations pass reasonably well Phase I but fail to ignite the neighbouring burners. Some others pass Phase II, ignite a few burners but then fail to ignite the whole chamber. In all cases, increasing the altitude makes all phases more difficult.

From a scientific point of view, ignition of a full chamber in a gas turbine raises many new and exciting questions. Phase I is a rather academic question but the two other phases are not. How a flame can 'jump' from one burner to another one (Phase III) is a question which is seldom addressed in laboratories because most academic set-ups are limited to one sector for obvious reasons of cost. Therefore, developing prediction tools for all three phases of ignition is interesting but it is limited by two difficulties:

- The physics of ignition during Phase I is very complex: even in laminar premixed gaseous flows, many aspects of ignition are not understood yet. Adding liquid fuel turbulence makes the problem much more difficult. In laminar flows, the influences of spark energy [1–5], of the mean flow at the spark location [6, 7], of detailed kinetics [8–10], of pressure [11] are still open questions. Most of these studies have been developed for perfectly premixed configurations while aero gas turbines (like Direct Injection piston or rocket engines) feature stratified flows, incomplete and unsteady mixing as well as evaporating sprays. Although experiments on ignition in stratified flows are now beginning [12], very few models are available for such configurations. Moreover, even though the extension of ignition models developed in laminar flows to turbulent cases is a classical investigation

*matthieu.boileau@cerfacs.fr

field in the combustion community, especially for piston engines [13–17], no present model for ignition in turbulent flows is really viewed as sufficient.

- During phases II and III, existing methods may be sufficient. For example Large Eddy Simulation for reacting flows have proved their accuracy in multiple configurations [18–23] including ignition or flashback cases where large flame movements must be tracked [24, 25]. The main difficulty however is that LES must be applied to a full 360 degrees chamber and not to one sector as done usually. Actually, to the authors knowledge, this has never been done and although groups have reported LES computations in one sector coupled to compressor and turbine flows [26], no LES of a full combustion chamber including all sectors has been published yet. The only method to achieve such a simulation is to use massively parallel computing and this paper demonstrates that this is possible today.

The objective of this work is to present a first LES of an ignition sequence in the full combustion chamber of an helicopter gas turbine using massively parallel computing. The combustion chamber is a demonstrator called VESTA built by Turbomeca. It contains 18 injectors and uses two ignition devices which can be viewed as jets injecting hot burnt gas: an advantage of this type of igniters for LES is that Phase I phenomena (spark or laser induced first ignition) do not need to be modelled: within the combustion chamber where the LES is performed, only jets of hot gases are added so that the present LES really focuses on Phases II and III of a full ignition sequence.

The present LES is based on a compressible explicit solver [27–29], an Euler-Euler model for the liquid fuel phase [25, 30, 31], the Thickened Flame model [32–34] and a one-step chemical scheme for JP10/air combustion. The computation is performed on 700 processors on a Cray XT3 machine. Results allow to understand how the fuel evaporates, and the first flames ignite near the two igniters before propagating from one burner to the other. The topology of the flame during this propagation is described and the notion of flame leading point (LP) is introduced to follow the propagation of the flame front through the chamber. Propagation speeds of the LP are measured and the role of swirl is highlighted in the control of the trajectory of the LP and of its speed. The study also shows how complex the postprocessing of such three-dimensional flames in complex geometries may become.

The next section describes the LES method used for the simulation, recalls the conservation equations and the specificities of the computer implementation on massively parallel machines to be able to utilise up to 5000 processors with a 90 percent efficiency. The following section describes the configuration of the VESTA combustor while the last section presents the results in terms of flame topology, leading point position and speeds, front curvature, consumption speeds and ignition delays of the various sectors.

LES of two-phase reacting flows

LES solver

The LES solver is a fully unstructured compressible code, including species transport and variable heat capacities [29]. It can work with both structured and unstructured grids which makes it easily applicable to complex geometries [35]. Centred spatial schemes and explicit time-advancement are used to control numerical dissipation and capture acoustics [28]. For the present case, a three-step Runge-Kutta method is employed with a time step controlled by the speed of sound. Sub-grid scale viscosity is defined by the WALE model, derived from the classic Smagorinsky model [36]. As requested by the WALE model, a no-slip condition is applied at the wall. Characteristic boundary conditions NSCBC [29, 37] are used for all inlets and for the outlet.

Spray modelling

The modelling of the liquid phase in a LES solver is an important issue for which two classes of methods are available:

- the Euler-Lagrange description (EL) where the gaseous flow is modelled with an Eulerian method while the particles are tracked in a Lagrangian way ;
- the Euler-Euler description in which both the gas and the dispersed phases are solved using an Eulerian formulation.

Several complex phenomena like polydisperse effects, droplet/wall interactions and crossing trajectories are easier to model with the EL approach. Thus, most of existing studies of two-phase reacting flows in LES are based on a EL description of the spray [38–41]. However, following the individual trajectory of millions of droplet is far beyond the capacities of today’s computers. To overcome this problem, physical particles are gathered into numerical parcels and modelling is required [42]. Another disadvantage of the EL method is the difficulty to optimize codes on massively parallel architectures (with several hundreds of processors). Figure 1 shows the number of particles per processor evaluated in the present calculation by integrating the Eulerian particle density on each partition of the computational

domain. At the initial instant $t = 0$, most of the 700 partitions contain less than 25 000 particles while some partitions have more than 2 million particles. Moreover, this distribution changes during the calculation of the ignition sequence: the combustor is filled with droplets when ignition starts while the spray is only present in the near injector regions when the steady ignited regime is reached ($t = 46 \text{ ms}$). If such a simulation had been performed with an EL algorithm, preserving a high parallel efficiency would have required a re-partitioning of the domain during the computation with a complex and time-consuming dynamic load-balancing method [38].

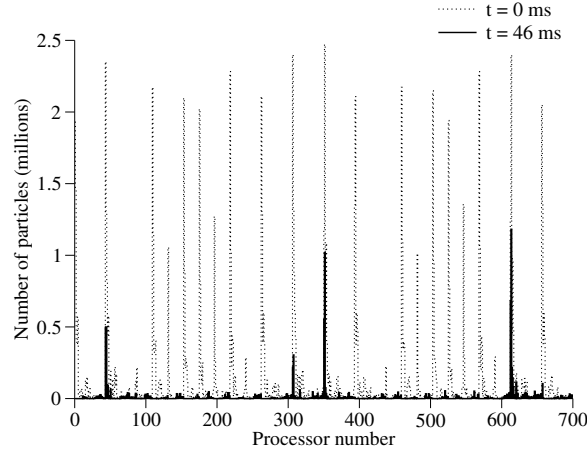


Fig. 1 Number of particles N_d as a function of the processor number.

The EE approach has the advantage to be straightforward to implement in a numerical tool and allows to use the same parallel algorithm for the dispersed and the gas phase [43]. However, compared to the EL method, the initial modelling effort is large and difficulties may be encountered for sprays with extended size distributions [44]. Finally, on the numerical point of view, special care is needed to handle the resulting set of equations [45]. Recent work has demonstrated that the EE approach can be applied to LES of particle laden turbulent gas flows [30,45–48]. Boileau *et al.* [25] have evaluated the potential of such a methodology to simulate reacting flows in complex geometries. They showed that this approach was capable to simulate an ignition sequence inside a single sector of an aeronautical gas turbine combustor. In the present work, two-phase flow effects have been handled with the same EE approach and the reader is referred to this article for the modelling details. An important assumption is that the spray is fully atomized and has a single drop size distribution (monodisperse spray). A summary of the LES equations solved by the code is given below.

$$\text{Gaseous phase} \quad \frac{\partial \bar{\mathbf{w}}}{\partial t} + \nabla \cdot \bar{\mathbf{F}} = \bar{\mathbf{s}} \quad (1)$$

$$\text{Dispersed phase} \quad \frac{\partial \bar{\mathbf{w}}_l}{\partial t} + \nabla \cdot \bar{\mathbf{F}}_l = \bar{\mathbf{s}}_l \quad (2)$$

where $\bar{\mathbf{w}}$ is the vector of gaseous conservative variables, $\bar{\mathbf{F}}$ is the flux tensor composed of viscous, inviscid and subgrid scale components and $\bar{\mathbf{s}}$ is the vector of source terms. $\bar{\mathbf{w}}$ and $\bar{\mathbf{s}}$ are given respectively by:

$$\bar{\mathbf{w}} = \left(\bar{\rho} \tilde{u}, \bar{\rho} \tilde{v}, \bar{\rho} \tilde{w}, \bar{\rho} \tilde{e}, \bar{\rho} \tilde{Y}_k \right) \quad (3)$$

$$\bar{\mathbf{s}} = \left(\bar{I}_x, \bar{I}_y, \bar{I}_z, \bar{\omega}_T + \bar{I}_i \tilde{u}_i + \bar{\Pi}, \bar{\omega}_k + \bar{\Gamma} \delta_{kF} \right) \quad (4)$$

In Eq. 3, ρ is the density, (u, v, w) are the velocity components, $e = e_s + 1/2 u_i u_i$ is the total non chemical energy (e_s is the sensible energy) and Y_k are the species mass fractions (the fuel species is noted F). In Eq. 4, combustion terms are the reaction rate $\bar{\omega}_k$ and the heat release $\bar{\omega}_T$ whose modelling is described in next section. Additional source terms representing exchanges between phases are the mass transfer $\bar{\Gamma}$, the momentum transfer \bar{I}_i and the heat transfer $\bar{\Pi}$. In Eq. 3, $\bar{\mathbf{w}}_l$ is the vector of conservative variables, $\bar{\mathbf{F}}_l$ is the flux tensor composed of convective and subgrid terms and $\bar{\mathbf{s}}_l$ is the vector of source terms. $\bar{\mathbf{w}}_l$ and $\bar{\mathbf{s}}_l$ are given respectively by:

$$\bar{\mathbf{w}}_l = \left(\rho_l \bar{\alpha}_l, \rho_l \bar{\alpha}_l \hat{u}_l, \rho_l \bar{\alpha}_l \hat{v}_l, \rho_l \bar{\alpha}_l \hat{w}_l, \rho_l \bar{\alpha}_l \hat{h}_l, \bar{n}_l \right) \quad (5)$$

$$\bar{s}_l = (-\bar{\Gamma}, -\bar{I}_x, -\bar{I}_y, -\bar{I}_z, -\bar{\Pi}, 0) \quad (6)$$

In Eq. 5, ρ_l is the liquid density, $\bar{\alpha}_l$ is the volume fraction, $(\hat{u}_l, \hat{v}_l, \hat{w}_l)$ are the spray velocity components, \hat{h}_l is the sensible enthalpy and \bar{n}_l is the droplet number density. This set of equations only describes the statistical average motion of the particles. The velocity deviation from this average, called random uncorrelated motion (RUM), describes the independent movement of each particle. The modelling of RUM as proposed for example in [48–50] is not yet satisfactory and Riber *et al.* [48, 50] has shown that it was not essential to capture the mean fields in a configuration representative of industrial flows. Therefore, it has been omitted in the present application.

Combustion modelling

The fuel used for the LES is JP10, a substitute for kerosene that has similar thermochemical properties. The reaction rate $\bar{\omega}_k$ is modeled by an Arrhenius law [19] with coefficients fitted from a detailed chemistry [51] to the present one-step irreversible chemistry: $JP10 + 14 O_2 \rightarrow 10 CO_2 + 8 H_2O$, using criteria based on laminar flame speed and thickness. Figure 2 shows the comparison between the detailed chemistry and the simplified scheme for the prediction of the laminar flame speed S_L and the adiabatic flame temperature T_2 . The simplified scheme properly predicts the laminar flame speed for equivalence ratio less than 1.2 but overpredicts S_L in the richer regime. This error could be corrected by using a variable pre-exponential constant in the Arrhenius law [52]. Concerning the adiabatic flame temperature, predictions are correct only for equivalence ratio below 0.8. For stoichiometric and rich regimes, the simplified chemistry overpredicts T_2 by about 200 K. To reduce this error, a second reaction involving a secondary species and an equilibrium could be considered. However, for simplicity reason none of these additional modelling features are used in the present study. As a consequence, special attention should be paid if rich regimes are encountered.

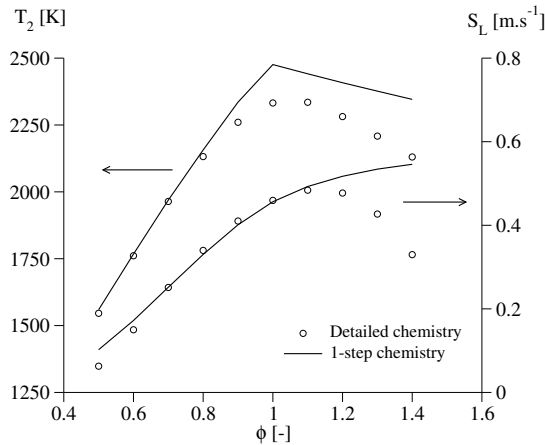


Fig. 2 Adiabatic flame temperature T_2 and laminar flame speed S_L as a function of equivalence ratio ϕ for the one-step chemistry compared with the reference detailed chemistry [51].

To handle flame/turbulence interaction, the dynamically thickened flame model (TFLES) is used [53]. This model introduces the thickening factor F which thickens the flame front so that it can be solved on the LES grid. The interaction between turbulence and chemistry at the subgrid level is modelled by the efficiency function E which compensates the effect of thickening and accounts for the influence of turbulence on the subgrid turbulent flame speed. The TFLES model has been applied successfully in multiple configurations (premixed and partially premixed) and more detailed descriptions can be found in [18, 53–55].

Parallelism

Thanks to the use of the MPI library, the LES code offers a very good efficiency on a high number of processors. Figure 3 from Staffebach *et al.* [56] shows a linear scaling of the speed-up up to 4000 processors. Taking advantage of this feature, LES simulations has been performed on today’s largest parallel computers [57–60]. The present calculation has been run on the Cray XT3 using 700 processors. This machine is equipped with 700 AMD bi-core Opteron 2.4 Ghz with a high-bandwidth low-latency network. The whole ignition sequence took 112 000 CPU hours corresponding to 160 hours of execution time. The Eulerian algorithm for the spray represents less than 50% of the total computational cost and it allows to preserve a full parallel efficiency.

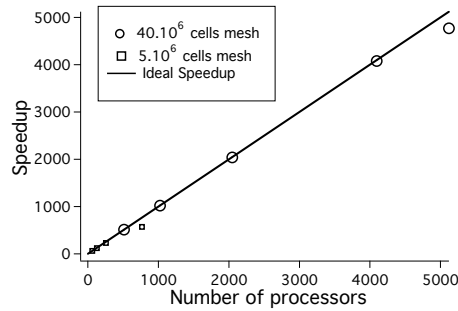


Fig. 3 Speed-up of the LES code on the Rochester (US) IBM BlueGene/L as a function of number of processors

Configuration

Geometry and boundary conditions

Figure 4 shows a view of the VESTA combustor. This annular chamber is divided in 18 identical sectors (see Fig. 5). For each sector, the kerosene spray is provided by an airblast main injector producing a swirled jet. The computing domain does not include the internal swirler geometry of these injectors: the imposed velocity profile at the injection outlet has been calibrated using a previous non reactive LES calculation in an extended domain of a single sector including the whole swirler geometry. The droplet diameter is set to $25 \mu m$ and the mass flux profile is zero on the axis and maximum at the internal swirler radius where the liquid film is injected. Figure 6 displays the air velocity and the spray mass flux profiles imposed at each burner outlet. This swirled flow leads to a classical vortex breakdown forming a strong central recirculation zone. As seen later, this back-flow is a key factor of the flame propagation and stabilisation during ignition.

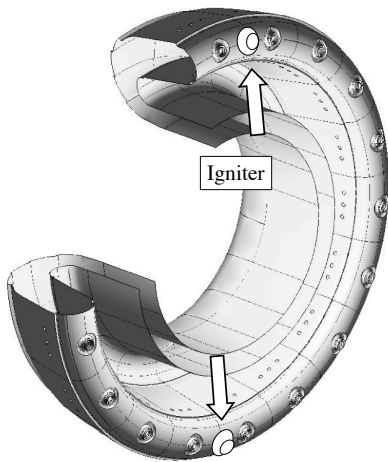


Fig. 4 Global view of the VESTA combustor featuring 14 of the 18 sectors.

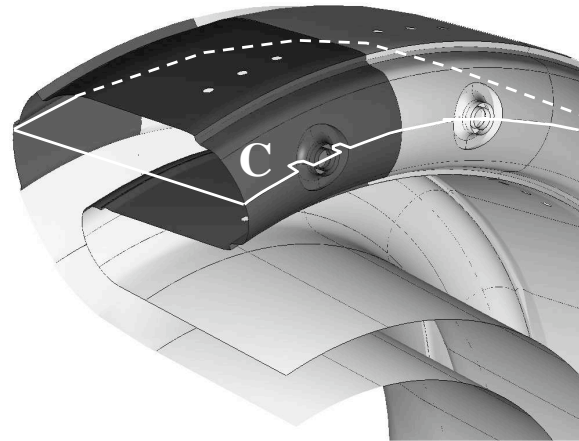


Fig. 5 Zoom on two sectors: limit of one isolated sector (in dark) and cutting surface C (white line, see Fig. 12 and 13).

Cooling films and multi-perforated walls (present in the real combustor) are not included here for the sake of simplicity. Focusing on one single sector, Fig. 7 describes the conditions applied to the boundaries of the computing domain. The corresponding parameters are listed in Table 1. These physical conditions are not favourable for ignition in terms of air and fuel jets temperature and pressure. However, they correspond to real starting conditions for a typical helicopter gas turbine (cold atmospheric air). The global equivalence ratio calculated from the reactants mass flows is: $\phi_g = 1.5$, so the combustor is operating in rich regime. Figure 8 shows the boundary conditions for the whole chamber.

Modelling of the igniters

The objective is to understand how combustion is initiated in the main burners thanks to the energy released by the igniters. These igniters themselves are ignited electrically and can be modelled by hot jets. Figure 9 is a sketch in the C

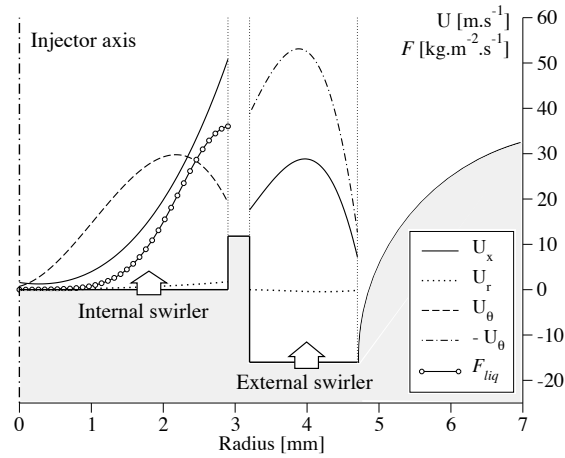


Fig. 6 Main injector boundary conditions: axial velocity (U_x), radial velocity (U_r), azimuthal velocity (U_θ) and axial fuel spray mass flux (F_{liq}).

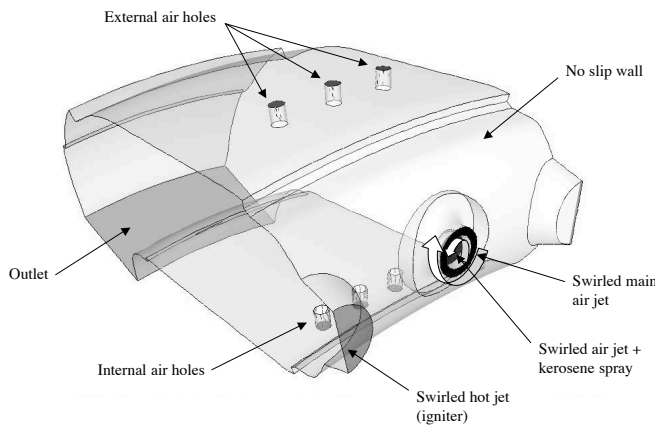


Fig. 7 Single sector representing $1/18^{th}$ of the full computing domain and featuring half an ignition jet.

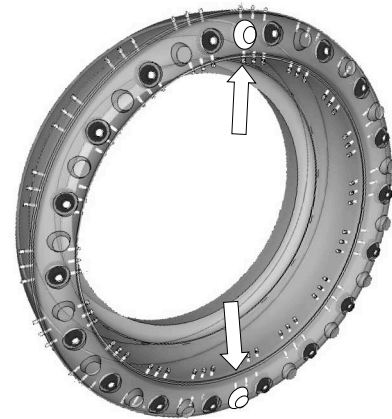


Fig. 8 Global view of the computing domain and boundary conditions of the combustor. White arrows point the igniters location.

surface (see Fig. 5) that shows the location of an ignition injector between two main injectors. This pressurized injector generates a kerosene spray whose ignition produces a torch flame. Figure 10 describes how the burning spray has been replaced by a simple jet of hot gas. This gas is the combustion product of a stoichiometric kerosene/air mixture in terms of species composition (CO_2 , H_2O and N_2) and temperature (adiabatic flame temperature). Injecting this inert gas at high temperature enables to provide some of the burner power, in the form of an enthalpy flux, without adding the complexity of the spark ignition of a fuel spray. The dynamic effect of this hot jet on the surrounding flow is rather low due to the high density ratio between the hot gases and the fresh air. Thus, in order to mimic the spreading rate of the original flame due to the hollow cone spray (see Fig. 9), a swirling component has been added.

Mesh

The entire domain has been meshed using tetrahedral cells with refined grids around the inlets and in the combustion zone. The final grid has been produced by replicating 18 times a single sector periodic grid (Fig. 11) leading to 19 million cells and 3.1 million nodes. Previous tests performed on a single burner domain have demonstrated that this mesh density was sufficient to capture the flame evolution.

Name (Fig. 7)	Physical parameters
Primary holes (108) (Air inlet)	Flat velocity profile $\dot{m}_{air} = 41.4 \text{ g.s}^{-1}$ $T_{air} = 273 \text{ K}$
Main injectors (18) (Air inlet)	Velocity profile (see Fig. 6) $\dot{m}_{air} = 46.08 \text{ g.s}^{-1}$ $T_{air} = 273 \text{ K}$
(Kerosene spray)	Mass flux profile (see Fig. 6) $\dot{m}_{fuel} = 9.30 \text{ g.s}^{-1}$ $T_{fuel} = 273 \text{ K}$ $d = 25 \mu\text{m}$ (monodisperse) $\phi_g = 1.5$
Hot igniter jets (2) (Burnt gas mixture)	See section "Modelling of the igniters" $\dot{m}_{jet} = 1.24 \text{ g.s}^{-1}$ $T_{jet} = 2369 \text{ K}$
Combustor walls	No slip, adiabatic
Outlet	$p = 1.18 \text{ bar}$

Table 1 Physical parameters values for the boundary conditions.

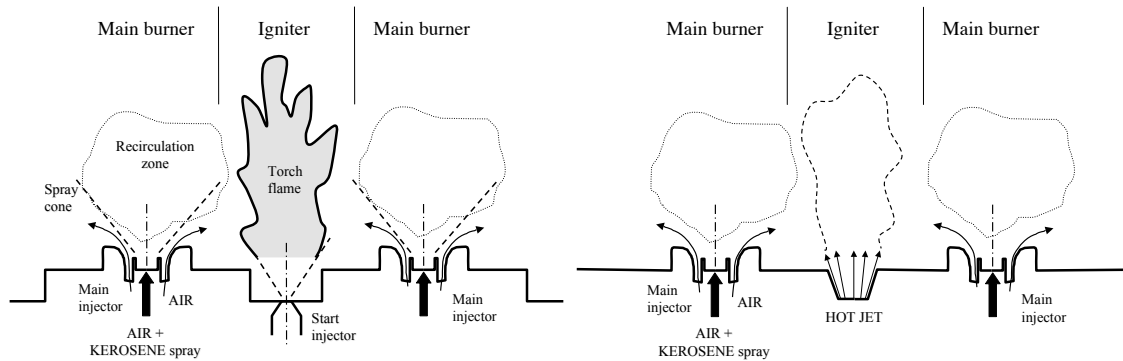


Fig. 9 Real configuration

Fig. 10 Calculated configuration

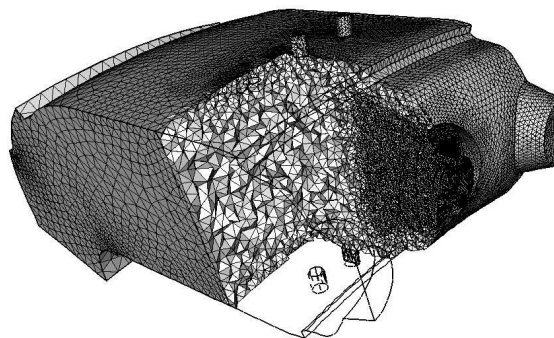


Fig. 11 One-sector view of the computational tetrahedral grid.

Initial conditions

In the true ignition sequence, the igniters are lighted once fuel injection has been switched on and ignition occurs in a cold air flow mixed with liquid fuel droplets. To mimic this process, the initial flow condition is provided by the steady

non-reacting air flow with liquid fuel injection. In this cold flow calculation, the physical conditions are the same as in Tab. 1 but the hot igniter jets are off. Due to the low temperature, the spray can hardly evaporate before the saturation conditions are reached. As a result the initial mean gaseous equivalence ratio is very low ($\phi_{gas}^0 = 0.0088$) and most of the fuel is liquid. At the initial instant $t = 0$, the hot jets are started and the ignition phase begins.

Results and discussion

Flame topology

Figure 12 labels the geometric entities of the annular combustor where analyses of the results are performed. The chamber geometry is perfectly symmetrical according to the z and y plane, so the annulus can be divided into four identical quadrants ($Q1$ to $Q4$). A corresponding azimuthal angle θ_i is defined for each of these quadrants. All eighteen sectors are identical except for $S1/S18$ and $S9/S10$ where the igniters $I1$ and $I2$ are placed. Actually, the swirling component of the main injectors condition (see previous section) removes a degree of symmetry of the flow. For instance, sector $S1$ is really equivalent to sector $S10$ but not to sectors $S9$ and $S18$. This effect has an impact on the azimuthal flame progress as will be seen later. Results will be plotted in the cutting surface C defined on Fig. 12 and 13. It corresponds to a 20 deg. angle cone.

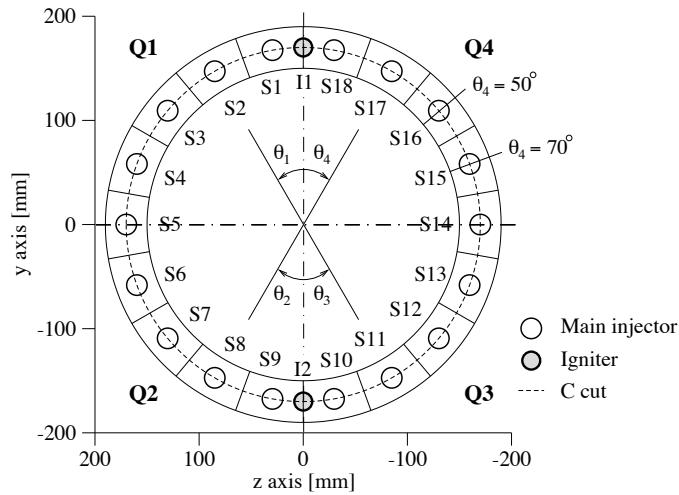


Fig. 12 Sketch of the annular combustor showing the positions of the two igniters ($I1$ and $I2$), the eighteen sectors ($S1$ to $S18$), the four quadrants ($Q1$ to $Q4$) and their four corresponding azimuthal angles (θ_1 to θ_4). $\theta_4 = 50$ and 70 deg. are the position of two analysis sections.

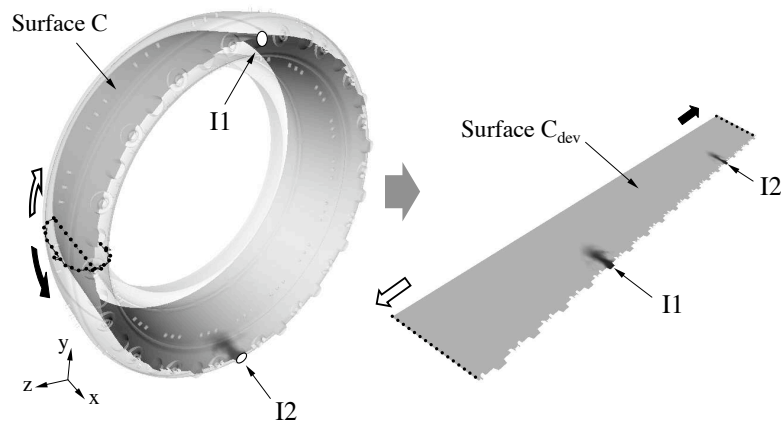


Fig. 13 3D view of the computational domain showing the two igniters $I1$ and $I2$, the cutting surface C and the surface C_{dev} obtained by developing C .

Figure 14 gives a 3D view of the ignition sequence at four successive instants. The different cold air inlets are represented by the turquoise blue surfaces while the red surfaces point the two hot igniter jets. On surface C , the light blue regions exhibit the back-flow zones generated by each main injector (see Fig. 9). This color map shows that the large LES grid allows to resolve a great number of small turbulent structures. $t = 14 \text{ ms}$ corresponds to the ignition of the burners surrounding each igniters (referred as Phase II in introduction). From $t = 19.2 \text{ ms}$ to $t = 46 \text{ ms}$, the flame front (shiny light blue surface) is progressing from the first ignited sectors into the four quadrants of the annulus (Phase III). Once this front has gone through one sector (for example, at $t = 29.2 \text{ ms}$), the back-flow zone of this sector enables to stabilise the flame close to the main injector and primary air holes (see Fig. 7). As seen on surface C , the thermal expansion of the burnt gases produces a strong acceleration of the flow towards the outlet.

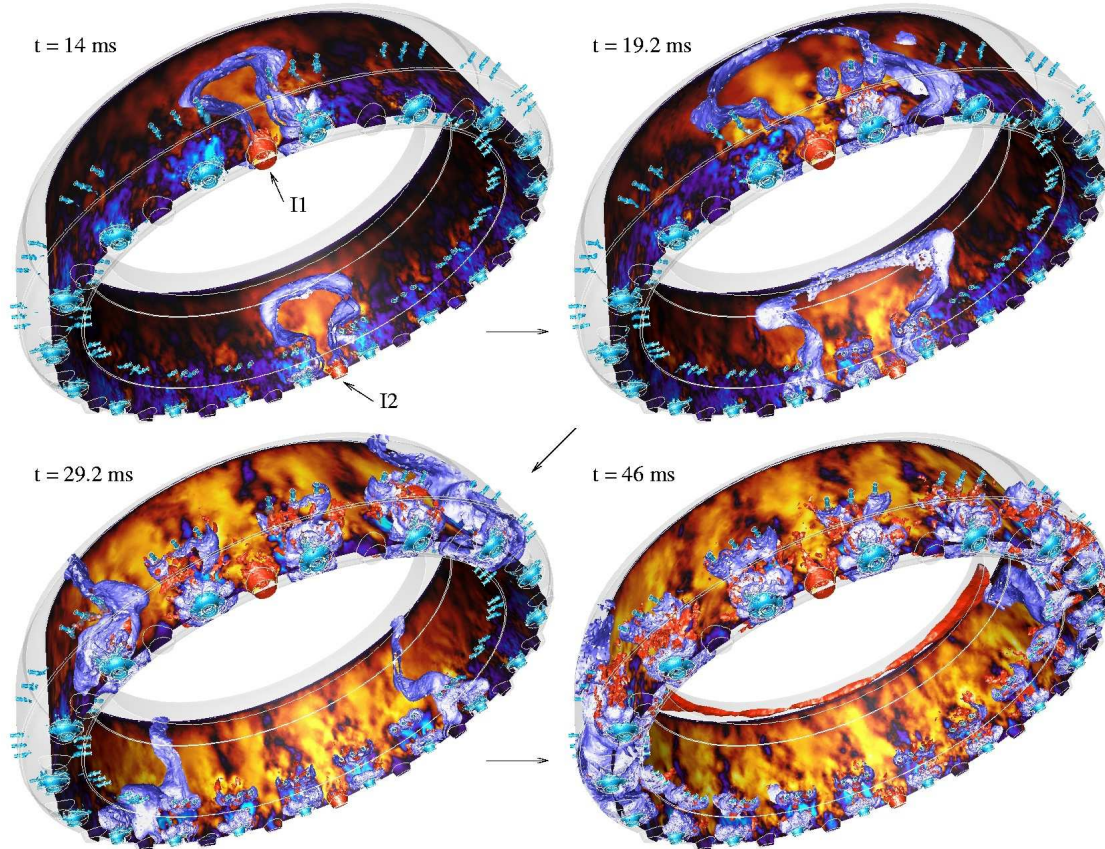


Fig. 14 Four successive instants of the ignition sequence: surface C coloured by axial velocity (light blue: -20 m.s^{-1} \rightarrow yellow: $+20 \text{ m.s}^{-1}$), iso-surface of velocity $U = 38 \text{ m.s}^{-1}$ coloured by temperature (turquoise blue: 273 K \rightarrow red: 2400 K) and iso-surface of progress rate $Q = 200 \text{ mol.s}^{-1}$ (shiny light blue) representing the flame front.

Figure 15 shows the temperature field and the flame front (iso-reaction rate) on the developed surface C_{dev} (Fig. 13) at various instants of the calculation. At $t = 10 \text{ ms}$, the hot gases created by the igniter $I2$ starts to interact with the main burner of sector $S9$ while the reaction zone initiated by the igniter $I2$ stays close to the hot jet axis. 6 ms later, two phenomena are observed. In the downstream region of sectors $S1$, $S9$, $S10$ and $S18$, the reacting front has propagated in the axial and azimuthal directions leading to a "mushroom-shaped" flame. At the same time, a flame has stabilised close to the $S9$ and $S18$ main injectors while the $S1$ and $S10$ ones are not ignited yet. From $t = 16$ to 40 ms , the reacting zone is progressing into the four quadrants filling the ignited sectors with hot gases. In quadrants $Q1$ and $Q3$, this front progresses faster in the downstream region of the chamber until $t = 28 \text{ ms}$. In quadrants $Q2$ and $Q4$, the flame propagating close to the main injectors is ahead of the downstream front since $t = 22 \text{ ms}$. Between $t = 34$ to 40 ms , the reaction progress is driven by the upstream front in all the quadrants. At $t = 46 \text{ ms}$, the flame fronts running from opposite directions and different igniters merge together, leading to the full ignition of all the main burners. Once ignited, each sector has two main reacting zones. The first one is a partially premixed flame located very close to the main injector outlet. It is stabilised by the recirculation zone created by the vortex breakdown of the

swirled air jet. The second one is a diffusion flame located in the downstream region of the recirculation zone where the primary holes air jets (see Fig. 7) provide oxygen to burn the fuel excess from the upstream flame. Figure 15 shows clearly that the progress velocity of the flame is not identical in each quadrant: $Q1$ and $Q3$ are behind $Q2$ and $Q4$. This time delay begins at the ignition of the first main injector ($t = 16 \text{ ms}$) and increases until the end of the ignition sequence: the front merging occurs in sectors $S4$ and $S13$ whereas the mean azimuthal sectors (i.e. $\theta_i = 90 \text{ deg.}$) are $S5$ and $S14$. This asymmetry is due to the swirling component of the main air jets (see above) and suggests that the velocity field plays a key role in the ignition process. This point is investigated further in the paper.

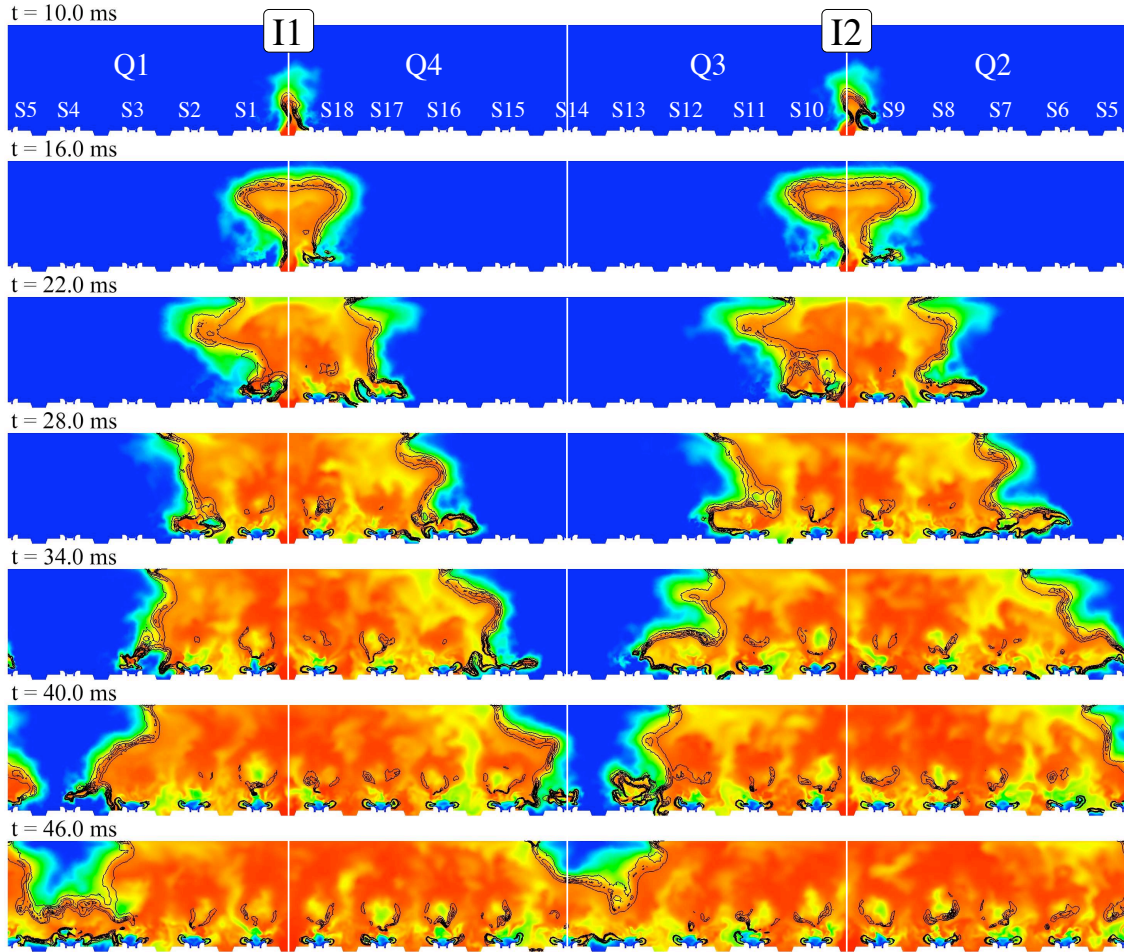


Fig. 15 Surface C_{dev} (see Fig. 13) colored by temperature (blue: $273 \text{ K} \rightarrow$ red: 2400 K) at successive instants of the ignition sequence. Black lines: reaction rate iso-lines.

Flame progress mechanism

In order to follow the azimuthal progress of the flame front into each quadrant of the combustor, a tracking method based on the temperature field is proposed. The idea is to define a point which characterises the azimuthal instantaneous position of the flame in the annulus. In quadrant Q_i , this point, referred as *leading point* (LP), is the maximum of the azimuthal angle θ_i (see Fig. 12) where the gas temperature is 1500 K . As seen later, this temperature level provides a convenient estimate of the flame front location. Although this LP does not represent a physical entity, it can describe a front trajectory from which a characteristic front azimuthal velocity can be deduced. If r_{LP} and θ_{LP} are the radial and azimuthal lagrangian coordinates of the leading point, the corresponding azimuthal speed is defined as: $V_{LP} = r_{LP} d\theta_{LP}/dt$.

A developed view of the LP in $Q4$ is shown on Fig. 16d where the different phases of the ignition process may be identified. Before $t = 12.8 \text{ ms}$, the flame initiated by $I1$ ignites the main injector of sector $S18$. This phase

corresponds to a slow and irregular progress of the LP with some backward movements. From $t = 12.8$ to 21.4 ms, the LP progresses faster through the downstream part of sectors S18 then S17. This phase is related to the initial "mushroom-shaped" flame identified in the previous section (see Fig. 15). From $t = 21.4$ to 36.4 ms, the LP is located in the upstream (primary) zone of the combustor. Into sectors S16 and S15, the x position of the LP is modified by the presence of the main injectors air jets and recirculation zone. However, these x oscillations are moderate and the LP progress is quite regular.

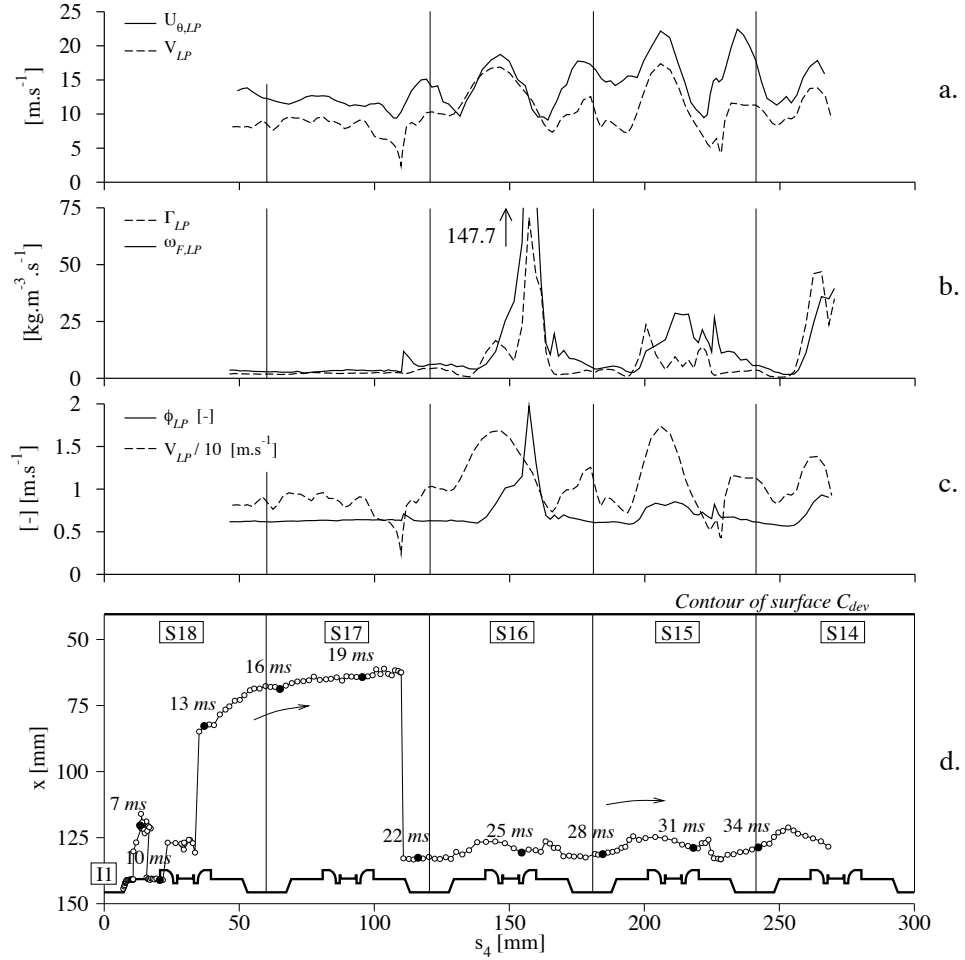


Fig. 16 View along the C_{dev} plane (bordered by the thick line) of the flame front leading point (LP) trajectory through sectors S18 to S14 (d.). s_4 is the azimuthal curvilinear abscissa defined as $s_4 = R\theta_4$ where R is the radial position of the main injectors axis. The three upper graphs show various properties of the LP as a function of s_4 : flow azimuthal velocity $U_{\theta,LP}$ (a.), azimuthal LP speed V_{LP} (a. and c.), fuel evaporation rate Γ (b.), fuel reaction rate $\dot{\omega}_F$ (b.) and gaseous equivalence ratio ϕ_{LP} (c.).

Figure 17 displays the same trajectory in a x view of quadrant $Q4$ and shows the three-phase process described above. From $t = 12.8$ to 21.4 ms, the downstream branch of the LP trajectory has a low radius due to the conical shape of the combustor. From $t = 21.4$ to 36.4 ms, the LP path stays close to the radial position of the main injectors axis. Only small deviations from this radius are observed. During this last phase, the LP has run more than 50 deg. of azimuthal angle while this evolution lasted only $1/3$ of the total time of the ignition sequence.

In order to investigate the parameters influencing the flame progress, the LP azimuthal absolute speed V_{LP} and some flow properties at the LP location are plotted against the azimuthal position (Fig. 16). Fig. 16a shows that V_{LP} varies between 2.4 and 17.4 ms with a mean value of 9.4 ms. These values are much higher than a typical turbulent flame speed (1 or 2 $m.s^{-1}$ in the present case, see later), revealing that the reacting front progress is not simply due to a

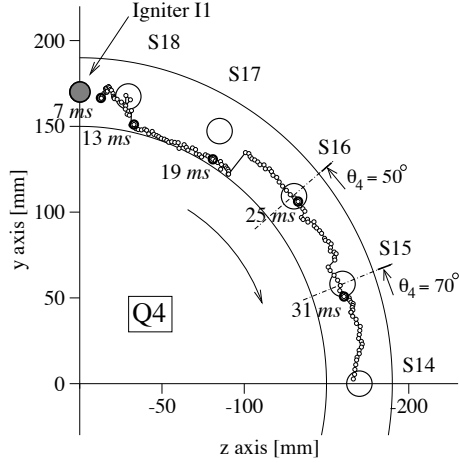


Fig. 17 Axial view of the flame leading point trajectory between 7 ms and 36.4 ms. $\theta_4 = 50$ and 70 deg. are the positions of the two control surfaces used in Fig. 18.

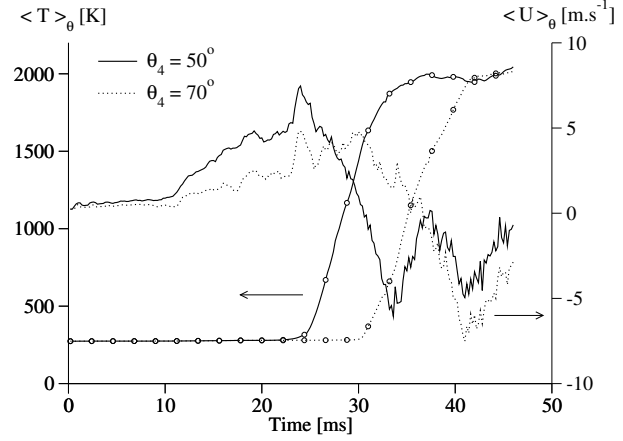


Fig. 18 Time evolution of the flow azimuthal velocity $\langle U \rangle_\theta$ (lines) and temperature $\langle T \rangle_\theta$ (lines with circles) averaged over an iso- θ_4 section for $\theta_4 = 50$ and 70 deg. (see Fig. 17).

turbulent flame propagation phenomena. According to Fig. 16a, the flow azimuthal velocity at LP $U_{\theta,LP}$ and the V_{LP} vary together and have the same sign. This indicates that the flame front is somehow carried by the flow. In addition to this Lagrangian view of the flame front, an Eulerian diagnostic is performed: flow temperature and azimuthal velocity are averaged over an azimuthal section leading to $\langle T \rangle_\theta$ and $\langle U \rangle_\theta$ respectively (see Fig. 18). Two control sections are chosen at $\theta_4 = 50$ and 70 deg., i.e. at the middle sections of sectors S16 and S15 respectively (see Fig. 12 and 17). On Fig. 18, the $\langle T \rangle_\theta$ rise corresponds to the flame front going through the section. For both θ_4 values, the $\langle U \rangle_\theta$ curves clearly show that a positive mean azimuthal flow (a blow effect) is generated upstream the flame front. When the flame crosses each section, $\langle U \rangle_\theta$ becomes negative because of the burnt gases flow due to the thermal expansion across the flame front. The significant velocities induced by the blow effect suggest that this thermal expansion phenomenon has a thrusting effect on the flame front. A way to quantify this effect is to perform a mass balance of the reaction products:

$$\dot{m}_p = \dot{m}_{comb} + \dot{m}_{HJ} - \dot{m}_{out} \quad (7)$$

where \dot{m}_p is the temporal variation of the total mass of products ($CO_2 + H_2O$), \dot{m}_{comb} is the total products reaction rate and \dot{m}_{HJ} and \dot{m}_{out} are the mass flux of products through the hot igniter jets inlets and through the outlet respectively. Equation 7 means that the variation of the mass of products during ignition is a balance between production by chemical reaction and variations due to boundary fluxes. The time evolution of each term of Eq. 7 is displayed on Fig. 19. During the first 9 ms, \dot{m}_p is low and only due to the hot jets contribution. From 9 to 13 ms, the reaction term \dot{m}_{comb} strongly increases while the outlet flux \dot{m}_{out} stays zero. This phase corresponds to the initial flame expansion from the two igniters before the burnt gases have reached the outlet (see Fig. 14, $t = 14$ ms). From 13 to 33 ms, burnt gases start to be ejected through the outlet and \dot{m}_{out} grows at a rate similar to \dot{m}_{comb} with a time delay of 5.2 ms. This delay stays fairly constant and leads to a positive \dot{m}_p oscillating between 6 and 10 $g.s^{-1}$. In the last phase (33 to 46 $m.s^{-1}$), the growing rate of \dot{m}_{comb} decreases meaning that ignition is achieved and that the flow tends to a steady regime ($\dot{m}_p \rightarrow 0$).

Considering that the increase of the burnt gases volume is related to the azimuthal front progress, a characteristic absolute speed of the flame V_F can be deduced from \dot{m}_p . If the flame front is seen as a thin and flat interface progressing in the azimuthal direction, V_F is defined by:

$$V_F = \frac{\dot{m}_p}{\rho_p A_\theta} \quad (8)$$

where ρ_p is the mean product density in the burnt gases ($\rho_p \approx 0.0677$) and A_θ is the area of the mean azimuthal section of the combustor. Another characteristic velocity of the flame is the consumption speed defined as:

$$\langle S_c \rangle = \frac{\dot{m}_{comb}}{\rho_1 Y_{p,2} A_F} \quad (9)$$

where ρ_1 is the mass density of the fresh gases ($\rho_1 = 1.522$), $Y_{p,2}$ is the mean product mass fraction in the burnt gases ($Y_{p,2} \approx 0.270$) and A_F is the resolved flame front surface estimated by measuring the total area of the iso-surface of temperature $T = 1500$ K. $\langle S_c \rangle$ provides an estimation of the sub-grid turbulent flame speed. Figure 20 compares these two global speeds V_F and $\langle S_c \rangle$ and the mean leading point speed over the four quadrants $\langle V_{LP} \rangle_Q = 1/4 \sum_{i=1}^4 V_{LP}(Qi)$. During the first 12 ms, $\langle S_c \rangle$ is not relevant since A_F in Eq. 9 represents the initial hot jets boundary rather than a real flame front. From $t = 12$ ms to the end of the ignition sequence, $\langle S_c \rangle$ slightly increases but stays below 1 m.s⁻¹, i.e. of the order of a typical turbulent flame speed for hydrocarbons. Compared to this consumption speed, the absolute flame speed V_F is one order of magnitude higher (around 7.5 m.s⁻¹) during the azimuthal flame spreading into the combustor ($12 < t < 46$ ms). This indicates that the thrusting effect due to the burnt gases expansion is a major mechanism of the ignition process. Figure 20 clearly shows the correlation between V_F and the mean LP speed $\langle V_{LP} \rangle_Q$, confirming that V_F is a relevant measure of the flame front progress speed. Finally, an azimuthal turbulent flame speed $\langle S_c \rangle_\theta$ has been estimated by integrating the products reaction rate along the propagating front and using the mean azimuthal section A_θ as a reference area. The ratio between $\langle S_c \rangle_\theta$ and the sub-grid turbulent flame speed $\langle S_c \rangle$ is the resolved flame wrinkling. Despite a typical measured value of 2 for this ratio, the turbulent consumption speed $\langle S_c \rangle_\theta$ stays much below the absolute flame speed V_F .

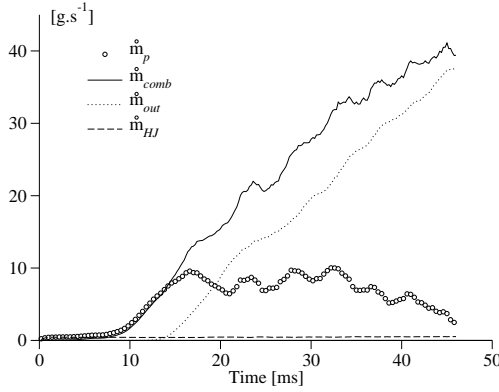


Fig. 19 Time evolution of the products mass balance: temporal variation of the total mass of products \dot{m}_p , total products reaction rate \dot{m}_{comb} , mass fluxes through the outlet \dot{m}_{out} and through the hot igniter jets inlets \dot{m}_{HJ} .

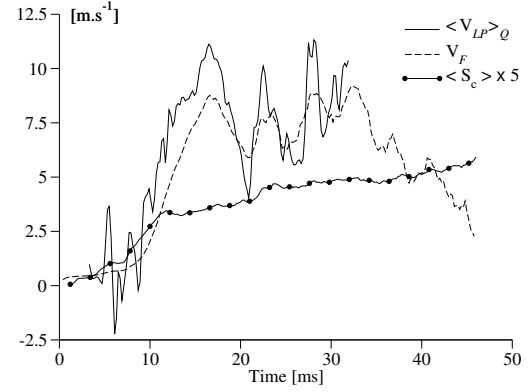


Fig. 20 Comparison between the mean absolute front speed V_F , the mean leading point azimuthal speed among the four quadrant $\langle V_{LP} \rangle_Q$ and the mean consumption speed $\langle S_c \rangle$ (multiplied by 5).

Fig. 20 also shows that V_F and $\langle V_{LP} \rangle_Q$ exhibit strong fluctuations: $\langle V_{LP} \rangle_Q$ may vary from 3 to 11 ms between $t = 12$ and 35 ms. To check if local equivalence ratio fluctuations may be responsible for that, Fig. 16c plots the equivalence ratio measured at LP (ϕ_{LP}) as a function of the azimuthal position. As may be expected, the variations of ϕ_{LP} influence the local fuel reaction rate $\dot{\omega}_{F,LP}$ (see Fig. 16b). Besides, the evolution of the evaporation rate Γ_{LP} is fairly close to $\dot{\omega}_{F,LP}$, suggesting a strong coupling between the fuel spray evaporation and the chemical reaction. Further analyses of the effect of the dispersed phase on the flame structure are given in the next section. In sector S16, Fig. 16b and 16c exhibit a peak of ϕ_{LP} , Γ_{LP} and $\dot{\omega}_{F,LP}$. This behaviour is local and isolated: it occurs when the LP approaches the injector outlet (see Fig. 16d) where the liquid fuel mass loading is high. The sudden evaporation of this liquid produces a high fuel vapour concentration which boosts the reaction for a short time. However, this reaction peak and other variations of ϕ_{LP} , Γ_{LP} and $\dot{\omega}_{F,LP}$ do not appear to be correlated with the LP speed. This suggests that the fluctuations of the local flame front properties related to chemical reaction do not have a straight effect on the flame progress speed.

Focusing on sectors S16 and S15 (where the LP evolves near the main injectors outlet, see Fig. 16d), a progress speed pattern comes out: the flame accelerates when approaching the injector axis then decelerates as it moves away (see Fig. 16a). This behaviour can be related to the convective effect of the recirculation zone. Figure 21 provides a view of the aerodynamic field obtained by a large eddy simulation of the cold flow in a single periodic sector (this flow is very similar to the initial condition used in the full-scale combustor calculation). The swirl injection leads to the strong and asymmetric vortex breakdown inducing a back-flow in the central region. The origin and the effects of these asymmetry are discussed later in the article. Though this view corresponds to a non reacting regime, a similar

flow pattern has been observed during ignition: the strong eddy located on the left-hand side of the injector axis is still present, even when it meets the mean azimuthal flow due to the blow effect previously mentioned. Figure 23a displays the reacting zone visualised by an iso-surface of temperature at $T = 1500 K^1$ at successive instants from sector $S16$ to $S15$. Using this figure and its corresponding schematic view (Fig. 22), the following scenario provides a description of the mechanism influencing the flame progress from one sector to the next one:

- A - The reacting front is captured by the left-hand side vortex of sector $S16$ (Fig. 22-A and 23a-A). On this side of the injector axis, the recirculating flow has the same direction than the flame progress and contributes to increase the LP speed (Fig. 23c). This acceleration is associated to an increase of the local flame front curvature γ_{LP} (Fig. 23a-A and c).
- B - The air-spray mixture produced by the $S16$ main injector is ignited (Fig. 22-B and 23a-B) but the flame progress is slowed down by the adverse recirculating flow on the right-hand side of the injector axis (Fig. 23c). As a result, the flame front takes a rounder shape (Fig. 23a-B) and γ_{LP} decreases (Fig. 23c).
- C - As shown by Fig. 23b, the ignition of burner $S16$ produces a continuous increase of the mean fuel reaction rate in this sector ($\langle \dot{\omega}_F \rangle_{S16}$). As mentioned above, the production of hot gases induces a blowing effect capable of thrusting the flame front. This effect contributes to the flame expansion illustrated by Fig. 22-C and 23a-C and by the local maximum of the LP speed observed at the boundary between sectors $S16$ and $S15$ (Fig. 23c).

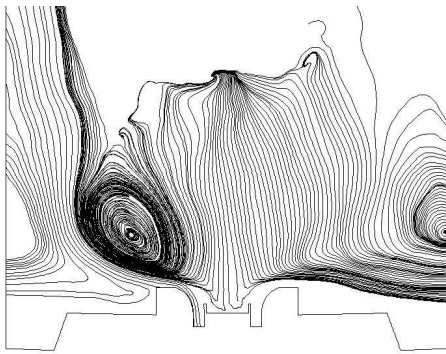


Fig. 21 Time-averaged stream lines in surface C obtained with a single-sector cold-flow calculation.

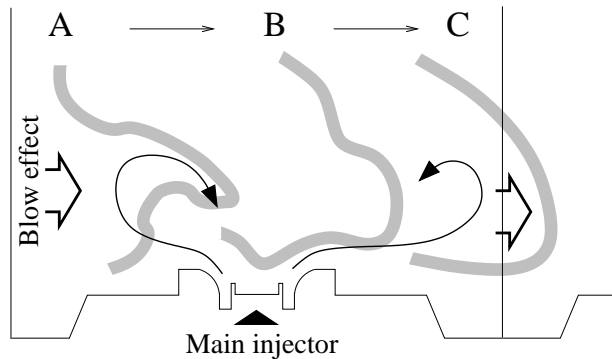


Fig. 22 Three-step evolution of the flame front (thick grey lines) when crossing the main swirled jet.

Snapshots A' and B' of Fig. 23a show that a similar scenario is occurring later in sector $S15$ and suggest that the above description represents a general process of the azimuthal flame front propagation in the combustor. Nevertheless, at later instants, Fig. 15 exhibits apparently a different behaviour: at $t = 40 ms$, two reacting zones (sectors $S13$ and $S14$) seem to be separated from the main flame front. Figure 24 shows that this isolated flame is the result of the following process:

- At $t = 34 ms$, the reacting zone coming from the injector of sector $S15$ (on the left) progresses toward sector $S14$.
- At $t = 36.8 ms$, a "reacting appendix" is captured by the recirculation zone of the sector $S15$.
- As it approaches the injector outlet, this flame surface grows and takes a closed (but wrinkled) shape ($t = 37.8$ to $39.6 ms$).
- Meanwhile, the main front azimuthal progress is stopped, probably by lack of reactants which have been previously burnt by the isolated flame.
- After $t = 40.4 ms$, the two fronts merge again and spread into the combustor volume toward the downstream and azimuthal directions.

Compared to the other sectors ignitions, this flame isolation phenomenon is quite uncommon: in general, the main flame front is actually stretched but stays continuous while it passes through the main injector region.

To summarize, the flame propagation process is driven by two key phenomena:

¹Tests have shown that visualising the flame front using iso-surfaces of reaction rate or of temperature leads to the same conclusions

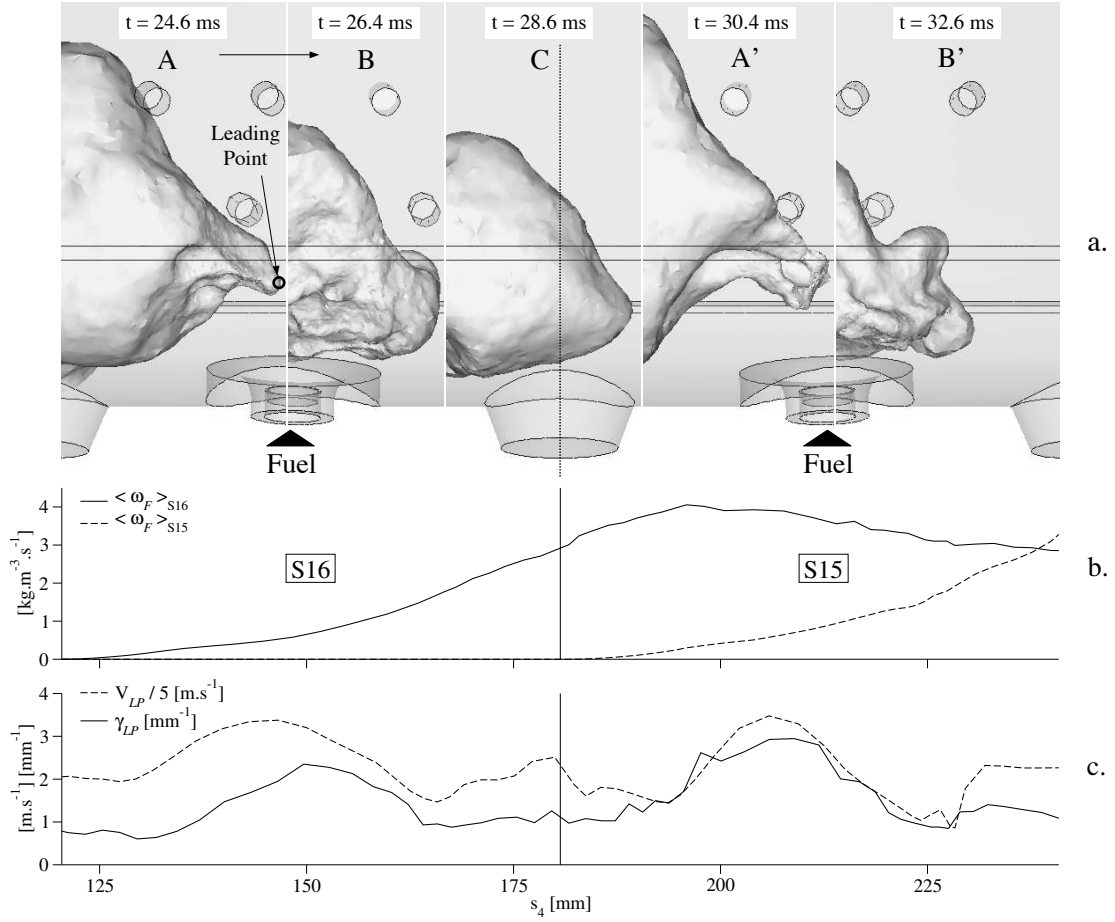


Fig. 23 Radial view of the flame front progress from sector S_{16} to S_{15} through 5 successive snapshots (A-C') of the iso-surface of temperature $T = 1500$ K (a). Mean fuel reaction rate $\langle \dot{\omega}_F \rangle_{S_i}$ in sectors S_{15} and S_{16} (b), leading point (LP) azimuthal speed V_{LP} and flame front curvature at LP γ_{LP} (c.) as a function of the azimuthal curvilinear abscissa of the LP s_4 .

- A thrust effect due to the thermal expansion of burnt gases. This effect depends rather on the mean reaction rate and the burnt gases outflux than on the flame leading point properties. It produces a continuous flame progress at a mean azimuthal speed of about $7.5 \text{ m}\cdot\text{s}^{-1}$.
- A flame speed modulation by the aerodynamics. When the flame front is going through one sector of the combustor, the LP azimuthal speed is modulated by the own aerodynamics of the burner, i.e. the vortex breakdown due to the swirled injection. These speed fluctuations are of the order of $\pm 4 \text{ m}\cdot\text{s}^{-1}$ and induce strong variations of the flame front curvature at the LP.

As the thermal expansion effect depends on the burnt gases outflux (see Eq. 7), the question of the outlet boundary condition influence may be asked. This has not been investigated here and needs further analysis. Although it is not believed that this boundary treatment could affect the qualitative description of the phenomenon.

In order to estimate the impact of the thickened flame (TF) model on the flame propagation (see section "Combustion modelling"), three key modelling parameters are plotted on Fig. 25: the thickening factor F , the efficiency function E and the mesh size at the leading point of the front are displayed versus azimuthal position of this point. The thickening factor F is adapted to the local cell size Δx_{cell} in order to keep a constant number of nodes in the flame zone. This explains why F variations along the LP path are strongly correlated to Δx_{cell} . As shown before, during the initial flame spreading, the LP is located in the downstream region of the combustor where the mesh is rather coarse. In this region, the thickening factor varies between 18 and 25. As the LP switches to the main injectors region, the mesh size

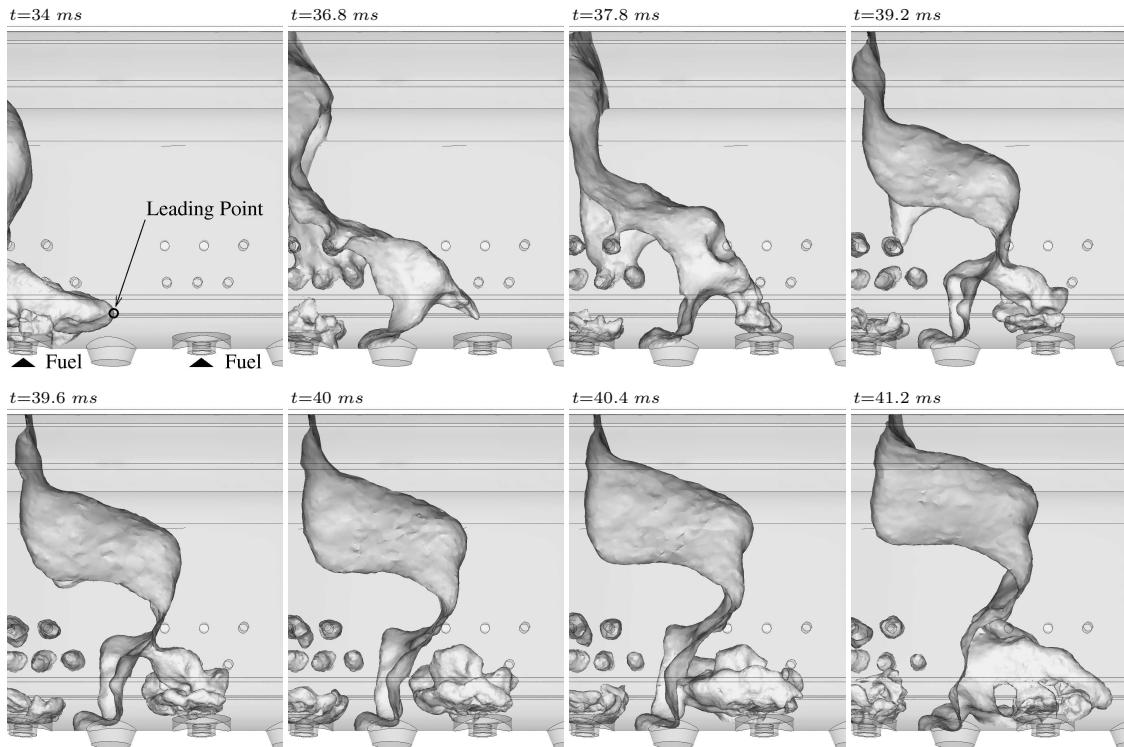


Fig. 24 Progress of the flame front (iso-surface of $T = 1500\text{ K}$) from sector $S15$ to sector $S14$.

falls down to $0.5 < \Delta x_{cell} < 1\text{ mm}$ leading to $5 < F < 10$. Focusing on the efficiency function E , values oscillate between 2 and 5 meaning that the turbulent reaction rate predicted by the TF model is twice to five times higher than the laminar value. Despite the very large size of the computational domain, thickening factors remain typically in the range 5 to 20 which are commonly used values for the TF model. From the previous analysis, the flame progress is not directly driven by the local reaction rate but by the flow velocity and hot gas expansion. As a consequence, the TF model has only a moderate effect on the burner ignition process.

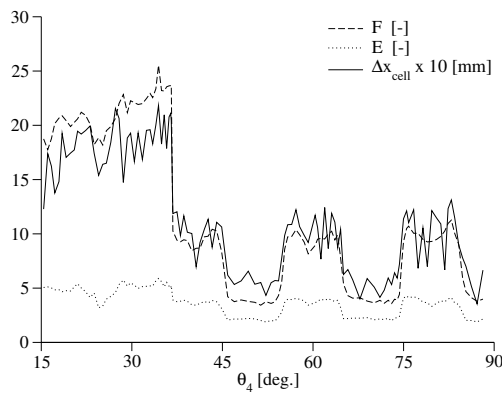


Fig. 25 Thickening factor F , efficiency function E and computational cell size Δx_{cell} as a function of the flame leading point azimuthal position in quadrant Q_4 (see Fig. 12).

Flame-spray interactions

The previous section described the ignition mechanism in terms of flame topology, flow aerodynamics and total reaction rate. These properties depend on chemical reaction as well as two-phase flow effects such as droplet evaporation. Indeed, the fact that liquid fuel must vaporise before burning has an impact on the dynamics and structure of the flame. Figure 26 displays the time evolution of mean quantities in the sector $S18$ (containing the igniter $I1$). Before reaction starts, a sufficient amount of fuel vapour in the flow is required. Due to the very low ambient temperature, the injected air-spray mixture is in saturated conditions so the initial gaseous equivalence ratio ϕ_{gas}^0 is very low (see section "Configuration"). As a result, flammable conditions are only obtained after an initial evaporation phase ($t < 9 \text{ ms}$) thanks to the energy input by the hot igniter jets. These conditions are fulfilled at $t = 9 \text{ ms}$ allowing the reaction rate to grow faster and increase the spray evaporation. After the steady combustion regime is reached ($t > 30 \text{ ms}$), the reaction rate stays below the evaporation rate because all the fuel vapour cannot burn due to the rich global equivalence ratio ($\phi_g = 1.5$). These rich conditions also explain why the reaction rate starts to decrease at $t = 17.4 \text{ ms}$ while the equivalence ratio is still growing. From this instant, the reaction is limited by the oxidant mass flux and produces unburnt gaseous fuel.

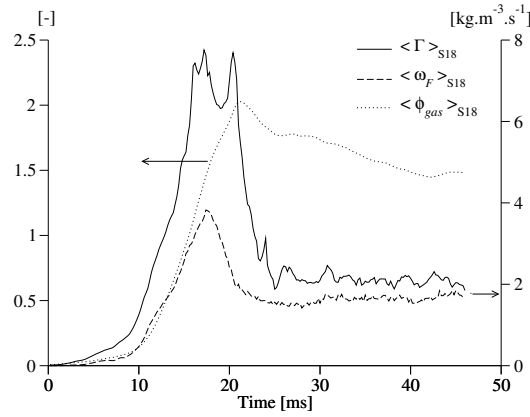


Fig. 26 Temporal evolution of mean quantities in sector $S18$: evaporation rate $\langle \Gamma \rangle_{S18}$, fuel reaction rate $\langle \dot{\omega}_F \rangle_{S18}$ and gaseous equivalence ratio $\langle \phi_{gas} \rangle_{S18}$.

The effect of the liquid phase can also be highlighted thanks to a fuel mass fraction-temperature diagram at a given instant of the ignition sequence (Fig. 27). Compared to a single-phase distribution, all the gaseous fuel must be produced by evaporation and a saturation effect is observed: strong concentrations of vapour fuel cannot be found at temperature close to the injection conditions ($T = 273 \text{ K}$). Actually, most of the physical domain has a low Y_F because vaporised fuel is immediately consumed by the chemical reaction, as shown by the strong correlation between evaporation and reaction rates at the leading point (see Fig. 16b). Some significant fuel mass fractions are however observed at elevated temperatures (mainly above 1300 K) corresponding to the unburnt gaseous fuel excess in hot gases. Figure 28 displays a scatter plot of heat release $\dot{\omega}_T$ and latent heat Π as a function of temperature. The upper limit of $\dot{\omega}_T$ presents a typical shape for an Arrhenius law with a maximum heat release at high temperature. Π corresponds to the heat lost by evaporation and is generally negligible compared to $\dot{\omega}_T$, except for dense-spray regions where high fuel vapour concentrations are produced (see Fig. 27). In these regions, the presence of liquid droplets may have a significant impact on the flame temperature. Elsewhere, the main effect of the spray is to introduce a time delay due to evaporation. According to Ballal and Lefebvre [61] and Myers and Lefebvre [62], this delay increases with the initial droplet size and has a slowing effect on the flame propagation speed. Indeed, tests in laminar configuration with similar unburnt conditions have shown that the spray induces a 20% decrease of the stoichiometric flame speed compared to the pure gaseous flame speed displayed on Fig. 2.

Finally, compared to gaseous mixtures, ignition of a saturated spray takes more time for two main reasons:

- an initial evaporation phase is required to produce a flammable mixture (in terms of equivalence ratio) from cold saturated conditions ;
- the flame progress is slower because of a lower propagation speed due to the evaporation delay.

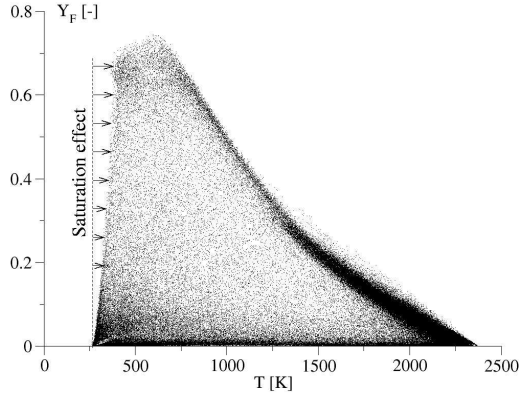


Fig. 27 Scatter plot of gaseous fuel mass fraction as a function of the temperature at $t = 28$ ms.

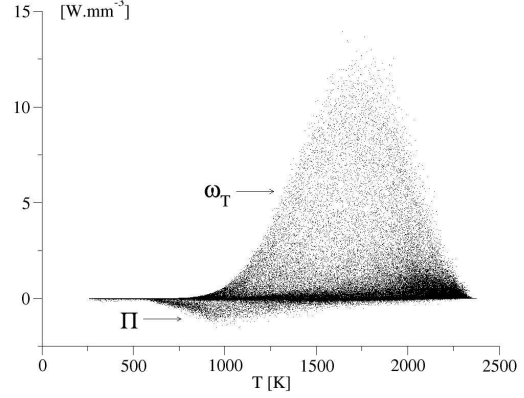


Fig. 28 Scatter plot of heat release and latent heat as a function of the temperature at $t = 28$ ms.

Ignition delays

Another way to quantify the flame progress speed into the combustor is to look at ignition times for each single sector. Figure 29 displays the time variation of the total reaction rate in the five sectors of quadrant $Q4$. All these sectors show a similar evolution: an initial growing phase up to a maximum reaction rate value, then a decreasing phase finally leading to a steady level (the same for all sectors). This steady regime corresponds to the flame stabilisation in the burner. For each sector after $S18$, the reaction rate rising phase starts shortly before the previous sector has reached its maximum. Until ignition of sector $S16$, the total reaction rate in quadrant $Q4$ presents a step-like evolution related to the successive ignition of sectors $S18$, $S17$ and $S16$. This evolution is less consistent for the two last sectors, $S15$ and $S14$. The ignition time of sector S_i , $t_{ign}(S_i)$, is defined as the instant where the total reaction rate in this sector is maximum (see Fig. 29). Figure 30 compares t_{ign} with the rise of the mean temperature in each sector. Again, the temperature evolution is similar for all sectors, except $S18$ that features an initial slow growing phase corresponding to the heat input by the hot igniter jet $I1$. On can notice that ignition occurs at a lower mean temperature when the flame is progressing from sector $S18$ ($\langle T \rangle_{S18} = 1675$ K) to $S14$ ($\langle T \rangle_{S14} = 1040$ K). Indeed, the flame progresses faster in the upstream region of the combustor than in the downstream one (see section "Flame topology"). As a result, the last burners are ignited upstream before the downstream flame has entered the sector. Lastly, Fig. 30 shows that the mean temperature over quadrant $Q4$ has an almost linear increase from $t = 12$ to 40 ms.

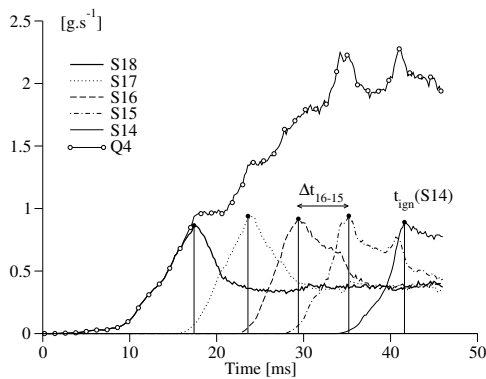


Fig. 29 Time evolution of the total fuel reaction rate into the $Q4$ quadrant and each single sector of $Q4$.

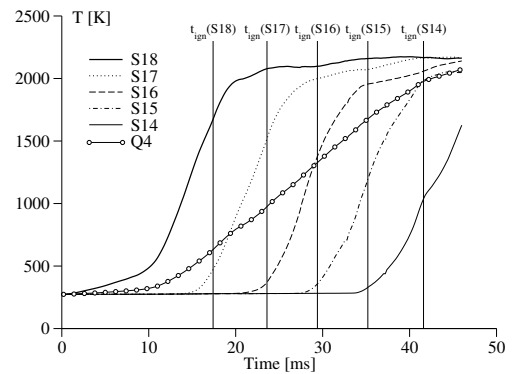


Fig. 30 Time evolution of the mean temperature into the $Q4$ quadrant and each single sector of $Q4$.

$\Delta t_{ign}(S_i)$ is defined as the ignition time delay between two successive sectors: $\Delta t_{ign}(S_i) = t_{ign}(S_i) - t_{ign}(S_i^-)$ where S_i^- is the preceding sector in the ignition sequence. Figure 31 compares Δt_{ign} for each sector (located

by their azimuthal position) of the four quadrants. Ignition of the four burners surrounding the igniters (Phase II in "Introduction") lasts longer than the following ones. Moreover, these times change according to the azimuthal direction with respect to the igniter: around 17 ms for the clockwise-located sectors (S9 and S18) and around 23 ms for the two others (S1 and S10). This 35% lag is due to the asymmetric cold flow induced by the swirled injection (see Fig. 21). Indeed, the analysis of the single sector flow has shown that the vortex breakdown is not symmetric because of its interactions with the six cold air jets coming from the internal and external holes (see Fig. 7). As a result, the vortex responsible for the flame front capture preceding ignition (see Fig. 15, $t = 10$ ms) is more intense in sectors S9 and S18 than in S1 and S10. Despite these initial variations, the four next sectors ($\theta_i = 30$ deg.) have the same ignition delay $\Delta t_{ign}(S_i) = 6$ ms. The ignition of sectors located at $30 < \theta_i < 90$ deg. corresponds to Phase III. For quadrants Q2 and Q4, $\Delta t_{ign}(S_i)$ have a rather similar and constant value around 6 ms. Ignition times for quadrants Q1 and Q3 are larger and less consistent: they vary from 6 to 10 ms. Again, the aerodynamics of the burner is invoked to explain these variations. The previous analyses have shown that the large eddies modulate the absolute flame speed. Accordingly, the randomness of these turbulent structures may explain the variations of the ignition time. Figure 32 provides another picture of the ignition times by plotting the time evolution of each flame leading point (LP) azimuthal position in each quadrant. In the initial phase ($t < 12$ ms, Phase II), quadrants Q2 and Q4 are faster than Q1 and Q3, as previously noticed. From $t = 12$ to 20 ms (Phase III), the four quadrants have rather similar evolutions. Indeed, the LP is located in the downstream region of the combustor (see Fig. 16d) so the flame progress is fairly independent of the swirled injection. On the contrary, from $t = 20$ to 46 ms, the LP of each quadrant has a different progress speed, quadrants Q1 and Q3 being slower than Q2 and Q4. During this period, the flame front evolves close to the injection (see Fig. 16d) where the flow aerodynamics generates flame speed fluctuations, as previously mentioned.

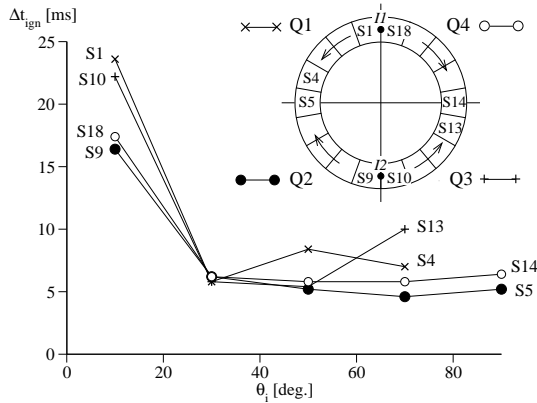


Fig. 31 Ignition time delay between two successive sectors in the four quadrants as a function of the azimuthal sector angle with respect to the igniter (I1 or I2).

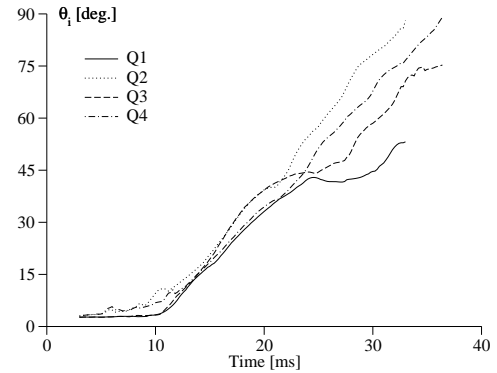


Fig. 32 Time evolution of the azimuthal position of the flame front leading point θ_i in each of the four Q_i quadrants.

To summarise, three types of ignition times variations have been observed:

- A sector-to-sector variation due to the LP location in the axial direction.
- A quadrant-to-quadrant variation according to the azimuthal direction of the flame progress. This variation is due to the asymmetry of each single sector flow with respect to the corresponding injector axis.
- Both quadrants and sectors variations due to randomness of the turbulent resolved structures.

Conclusion

Thanks to massively parallel computing, LES is now able to simulate the ignition sequence of a full aeronautical combustor. The present calculation uses a compressible explicit solver, the Thickened Flame model with a simplified chemistry and Euler-Euler (EE) model to account for liquid fuel injection. This EE approach allows to keep a full parallel computing efficiency on a large unstructured grid (19 million cells) using 700 processors. To describe the major features of the flow inside the Turbomeca combustor, the computational domain includes the main air and fuel spray inlets, i.e. 18 main injectors and 108 primary holes while the 2 torch-igniters are modelled by hot jets. Simulating the full ignition of this 360 degrees annular chamber brings considerable new insight into the physics of

such a complex phenomenon. Investigation of the results has been achieved thanks to various postprocessing analyses: two and three-dimensional views of the flame motion, Lagrangian tracking of the flame front leading point, Eulerian diagnostics in selected control sections and volumes, burnt gas mass balance and flame structure analysis. Several mechanisms have been identified as key factors of the ignition process:

- Having its own characteristic time, spray evaporation introduces a delay in the ignition time. Indeed, as the initial air-spray mixture is saturated, most of the liquid fuel has to be vaporised thanks to the heat released by combustion. This has an impact on the ignition of the first burners (Phase II) as well as on the consumption speed of the flame progressing from burner to burner (Phase III).
- During Phase III, the unbalance between the burnt gases production in the flame and their outflux through the combustor outlet induces a mean flow in the azimuthal direction. As a result, the mean absolute flame speed is much higher than the actual turbulent flame consumption speed. This blow effect is also responsible for the "jump" of the flame from a burner to its neighbour.
- The own aerodynamics of the burners strongly modulates the flame leading point speed according to whether the flame is entering or leaving the main injector recirculation zone. As this zone is not symmetrical, its effect on the front movement depends on the azimuthal direction of the flame progress.

In addition to these observations, a significant variability of the sectors and quadrants ignition delays has been highlighted. These variations depends on the flame topology, its azimuthal direction of progress and the randomness of the large turbulent scales.

To conclude, LES shows great potential to predict ignition into gas turbine combustors. As an unsteady approach, it is particularly adapted to such time-varying phenomena. Moreover, the flame propagation appears to be strongly influenced by the large turbulent structures which are explicitly resolved by the method. Computational costs can efficiently be handled thanks to massively parallel computing (The present simulation took less than a week of execution time). For the sake of predictive calculations, further developments are required. Among them are: to account for spray polydispersion, to include more realistic evaporation and chemistry models for kerosene, to describe more accurately the true combustor inflows (full swirler geometry, cooling films, multi-perforated walls, etc.) and to analyse the impact of the outflow condition.

References

- ¹D.R. Ballal and A.H. Lefebvre. The influence of flow parameters on minimum ignition energy and quenching distance. *Proc. of the Combustion Institute*, 15:1473–1481, 1974.
- ²M. Champion, B. Deshaies, G. Joulin, and K. Kinoshita. Spherical flame initiation: Theory versus experiments for lean propane-air mixtures. *Combust. Flame*, 65:319–337, 1986.
- ³T.M. Sloane. Energy requirements for spherical ignitions in methane-air mixtures at different equivalence ratios. *Combust. Sci. Tech.*, 73:351–365, 1990.
- ⁴J.L. Beduneau, B. Kim, L. Zimmer, and Y. Ikeda. Measurements of minimum ignition energy in premixed laminar methane/air flow by using laser induced spark. *Combust. Flame*, 132(4):653–665, 2003.
- ⁵V. Kurdyumov, J. Blasco, A.L. Sanchez, and A. Linan. On the calculation of the minimum ignition energy. *Combust. Flame*, 136(3):394–397, 2004.
- ⁶A. Alkidas and P. Durbetaki. Ignition characteristics of a stagnation point combustible mixture. *Combust. Sci. Tech.*, 3:187, 1971.
- ⁷M. Baum and T. Poinso. Effects of mean flow on premixed flame ignition. *Combust. Sci. Tech.*, 106(1-3):19, 1995.
- ⁸Y. Ko and V.S. Arpaci. Spark ignition of propane-air mixtures near the minimum ignition energy : Part ii. a model development. *Combust. Flame*, 83:88–105, 1991.
- ⁹T.M. Sloane and P.D. Ronney. A comparison of ignition phenomena with detailed and simplified kinetics. *Combust. Sci. Tech.*, 88:1–13, 1992.
- ¹⁰T. Sloane. Ignition and flame propagation modeling with an improved propane oxidation mechanism. *Combust. Sci. Tech.*, 83:77–96, 1992.
- ¹¹T.M. Sloane. Numerical simulation of electric spark ignition in methane-air mixtures at pressures above one atmosphere. *Combust. Sci. Tech.*, 86:121–133, 1992.
- ¹²SF Ahmed and E. Mastorakos. Spark ignition of lifted turbulent jet flames. *Combust. Flame*, 146(1-2):215–231, 2006.
- ¹³R. Maly. Ignition model for spark discharges and the early phase of flame front growth. In *18th Symp. (Int.) on Combustion*, pages 1747–1754. The Combustion Institute, Pittsburgh, 1981.
- ¹⁴S Pischinger and J.B. Heywood. A model for flame kernel development in a spark-ignition engine. In *23rd Symp. (Int.) on Combustion*, pages 1033–1040. The Combustion Institute, Pittsburgh, 1990.
- ¹⁵P. Boudier, S. Henriot, T. Poinso, and Baritaud T. A model for turbulent flame ignition and propagation in spark ignition engines. In *The Combustion Institute, editor, Twenty-Fourth Symposium (International) on Combustion*, pages 503–510, 1992.
- ¹⁶T. Kravchik and E. Sher. Numerical modeling of spark ignition and flame initiation in a quiescent methane-air mixture. *Combust. Flame*, 99:635–643, 1994.
- ¹⁷S. Richard, O. Colin, O. Vermorel, A. Benkenida, C. Angelberger, and D. Veynante. Towards large eddy simulation of combustion in spark ignition engines. *Proc. of the Combustion Institute*, 31(3059-3066), 2007.
- ¹⁸L. Selle, G. Lartigue, T. Poinso, R. Koch, K.-U. Schildmacher, W. Krebs, B. Prade, P. Kaufmann, and D. Veynante. Compressible large-eddy simulation of turbulent combustion in complex geometry on unstructured meshes. *Combust. Flame*, 137(4):489–505, 2004.
- ¹⁹T. Poinso and D. Veynante. *Theoretical and numerical combustion*. R.T. Edwards, 2nd edition., 2005.
- ²⁰H. Pitsch. Large eddy simulation of turbulent combustion. *Ann. Rev. Fluid Mech.*, 38:453–482, 2006.
- ²¹S. Menon and Patel N. Subgrid modeling for simulation of spray combustion in large scale combustors. *AIAA Journal*, 44(709-723), 2006.
- ²²H. El-Asrag and S. Menon. Large eddy simulation of bluff-body stabilized swirling non-premixed flames. *Proc. of the Combustion Institute*, 31:1747–1754, 2007.
- ²³M. Freitag and J. Janicka. Investigation of a strongly swirled premixed flame using les. *Proc. of the Combustion Institute*, 31:1477–1485, 2007.
- ²⁴Y. Sommerer, D. Galley, T. Poinso, S. Ducruix, F. Lacas, and D. Veynante. Large eddy simulation and experimental study of flashback and blow-off in a lean partially premixed swirled burner. *J. of Turbulence*, 5, 2004.
- ²⁵M. Boileau, S. Pascaud, E. Riber, B. Cuenot, L. Gicquel, and T.J. Poinso. Large eddy simulation of spray combustion in gas turbines. *Submitted to Flow Turb. and Combustion*, 2007.
- ²⁶J. Schluter, S. Apte, G. Kalitzin, E. vdWeide, J. Alonso, and H. Pitsch. Large-scale integrated les-rans simulations of a gas turbine engine. In *Annual Research Briefs*, pages 111–121. Center for Turbulence Research, NASA Ames/Stanford Univ., 2005.
- ²⁷T. Schönfeld and M. Rudgyard. Steady and unsteady flows simulations using the hybrid flow solver avbp. *AIAA Journal*, 37(11):1378–1385, 1999.
- ²⁸O. Colin and M. Rudgyard. Development of high-order taylor-galerkin schemes for unsteady calculations. *J. Comput. Phys.*, 162(2):338–371, 2000.
- ²⁹V. Moureau, G. Lartigue, Y. Sommerer, C. Angelberger, O. Colin, and T. Poinso. High-order methods for dns and les of compressible multi-component reacting flows on fixed and moving grids. *J. Comput. Phys.*, 202(2):710–736, 2005.
- ³⁰M. Moreau, B. Bedat, and O. Simonin. From euler-lagrange to euler-euler large eddy simulation approaches for gas-particle turbulent flows. In *ASME Fluids Engineering Summer Conference*. ASME FED, 2005.
- ³¹E. Riber, M. Garcia, V. Moureau, H. Pitsch, O. Simonin, and T. Poinso. Evaluation of numerical strategies for les of two-phase reacting flows. In *Proc of the Summer Program*, pages 197–213. Center for Turbulence Research, NASA Ames/Stanford Univ., 2006.
- ³²A. Sengissen, A. Giauque, G. Staffelbach, M. Porta, W. Krebs, P. Kaufmann, and T. Poinso. Large eddy simulation of piloting effects on turbulent swirling flames. *Proc. of the Combustion Institute*, 31:1729–1736, 2007.
- ³³A. Sengissen, J. F. VanKampen, R. Huls, G. Stoffels, J. B. W. Kok, and T. Poinso. Les and experimental studies of cold and reacting flows in a swirled partially premixed burner with and without fuel modulation. *Combust. Flame*, 150:40–53, 2007.
- ³⁴P. Schmitt, T.J. Poinso, B. Schuermans, and K. Geigle. Large-eddy simulation and experimental study of heat transfer, nitric oxide emissions and combustion instability in a swirled turbulent high pressure burner. *J. Fluid Mech.*, 570:17–46, 2007.
- ³⁵T. Schönfeld and M. Rudgyard. A cell-vertex approach to local mesh refinement for the 3-d euler equations. In *AIAA-94-0318*, editor, *32nd Aerospace Sciences Meeting & Exhibit*, Reno, U.S.A., 1994. AIAA.
- ³⁶F. Nicoud and F. Ducros. Subgrid-scale stress modelling based on the square of the velocity gradient. *Flow Turb. and Combustion*, 62(3):183–200, 1999.
- ³⁷T. Poinso and S. Lele. Boundary conditions for direct simulations of compressible viscous flows. *J. Comput. Phys.*, 101(1):104–129, 1992.
- ³⁸F. Ham, S. V. Apte, G. Iaccarino, X. Wu, M. Herrmann, G. Constantinescu, K. Mahesh, and P. Moin. Unstructured LES of reacting multiphase flows in realistic gas turbine combustors. In *Annual Research Briefs - Center for Turbulence Research*. NASA Ames/Stanford Univ., 2003.

- ³⁹K. Mahesh, G. Constantinescu, S. Apte, G. Iaccarino, F. Ham, and P. Moin. Progress towards large-eddy simulation of turbulent reacting and non-reacting flows in complex geometries. In *Annual Research Briefs*, pages 115–142. Center for Turbulence Research, NASA Ames/Stanford Univ., 2002.
- ⁴⁰K. Mahesh, G. Constantinescu, S. Apte, G. Iaccarino, F. Ham, and P. Moin. Large eddy simulation of reacting turbulent flows in complex geometries. In *ASME J. Appl. Mech.*, volume 73, pages 374–381, 2006.
- ⁴¹P. Moin and S. V. Apte. Large-eddy simulation of realistic gas turbine combustors. *AIAA Journal*, 44(4):698–708, 2006.
- ⁴²P. Moin. Large eddy simulation of multi-phase turbulent flows in realistic combustors. *Prog. Comput. Fluid Dynamics*, 4:237–240, 2004.
- ⁴³A. Kaufmann. *Vers la simulation des grandes échelles en formulation Euler/Euler des écoulements réactifs diphasiques*. PhD thesis, INP Toulouse, 2004.
- ⁴⁴J.-B. Mossa. *Extension polydisperse pour la description Euler-Euler des écoulements diphasiques réactifs*. PhD thesis, INP Toulouse, 2005.
- ⁴⁵E. Riber. *Développement de la méthode de simulation aux grandes échelles pour les écoulements diphasiques turbulents*. PhD thesis, INP Toulouse, 2007.
- ⁴⁶P. Février, O. Simonin, and K. Squires. Partitioning of particle velocities in gas-solid turbulent flows into a continuous field and a spatially uncorrelated random distribution: Theoretical formalism and numerical study. *J. Fluid Mech.*, 533:1–46, 2005.
- ⁴⁷E. Riber, M. Moreau, O. Simonin, and B. Cuenot. Towards large eddy simulation of non-homogeneous particle laden turbulent gas flows using euler-euler approach. In *11th Workshop on Two-Phase Flow Predictions*, Merseburg, Germany, 2005.
- ⁴⁸E. Riber, M. Garcia., V. Moureau, H. Pitsch, O. Simonin, and T. Poinso. Evaluation of numerical strategies for les of two-phase reacting flows. In *Proc of the Summer Program*, pages 197–213. Center for Turbulence Research, NASA Ames/Stanford Univ., 2006.
- ⁴⁹A. Kaufmann, O. Simonin, T. Poinso, and J. Helie. Dynamics and dispersion in eulerian-eulerian dns of two phase flow. In *Proceeding of the Summer Program*, pages 381–391, Center for Turbulence Research, NASA AMES/Stanford University, USA, 2002.
- ⁵⁰E. Riber, M. Moreau, O. Simonin, and B. Cuenot. Development of Euler-Euler LES approach for gas-particle turbulent jet flow. In *ASME - European Fluids Enigneering Summer Meeting*, Miami, Florida - USA, 2006.
- ⁵¹S.C. Li, B. Varatharajan, and F.A. Williams. Chemistry of JP-10 ignition. *AIAA Journal*, 39(12):2351–2356, 2001.
- ⁵²L. Vervisch, B. Labegorre, and J. Réveillon. Hydrogen-sulphur oxy-flames analysis and single-step flame tabulated chemistry. *Fuel*, 83(4-5):605–614, 2004.
- ⁵³O. Colin, F. Ducros, D. Veynante, and T. Poinso. A thickened flame model for large eddy simulations of turbulent premixed combustion. *Phys. Fluids*, 12(7):1843–1863, 2000.
- ⁵⁴C. Angelberger, F. Egolfopoulos, and D. Veynante. Large eddy simulations of chemical and acoustic effects on combustion instabilities. *Flow Turb. and Combustion*, 65(2):205–22, 2000.
- ⁵⁵C. Martin, L. Benoit, F. Nicoud, and T. Poinso. Analysis of acoustic energy and modes in a turbulent swirled combustor. In *Proc of the Summer Program*, pages 377–394, Stanford, 2004. Center for Turbulence Research, NASA Ames/Stanford Univ.
- ⁵⁶G. Staffelbach, L.Y.M. Gicquel, and T. Poinso. Highly parallel large eddy simulation of multiburner configurations in industrial gas turbines. *The Cyprus International Symposium on Complex Effects in Large Eddy Simulation*, 2005.
- ⁵⁷G. Staffelbach, L. Gicquel, and T. Poinso. Highly parallel Large Eddy Simulations of multiburner configurations in industrial gas turbines. In Springer, editor, *Lecture Notes in Computational Science and Engineering - Complex effects in Large Eddy Simulation*, volume 56, pages 326–336, 2006.
- ⁵⁸G. Staffelbach and T. Poinso. High performance computing for combustion applications. In *Super Computing 2006*, Tampa, Florida, USA, 2006.
- ⁵⁹G. Staffelbach. *Simulation aux grandes échelles des instabilités de combustion dans les configurations multi-brûleurs*. PhD thesis, Institut National Polytechnique de Toulouse, 2006.
- ⁶⁰M. Boileau, J. B. Mossa, B. Cuenot, T. Poinso, D. Bissieres, and C. Berat. Toward LES of an ignition sequence in a full helicopter combustor. In *1st Workshop INCA*, 2005.
- ⁶¹D. R. Ballal and A. H. Lefebvre. Flame propagation in heterogeneous mixtures of fuel droplets, fuel vapor and air. In The Combustion Institute, editor, *Proc. Combust. Inst.*, volume 18, pages 321–327, 1981.
- ⁶²G.D. Myers and A.H. Lefebvre. Flame propagation in heterogeneous mixtures of fuel drops and air. *Combust. Flame*, 66:193–210, 1986.

Compléments

Influence de la répartition de carburant liquide

L'analyse du point de progression de la flamme a montré que les variations locales de richesse et de taux de réaction ne se répercutent pas directement sur la vitesse de propagation du front tant que la flamme rencontre des conditions favorables à la combustion. Dans le cas présent, bien que température et pression initiales soient faibles, ces conditions sont vérifiées : le faible diamètre de gouttes ($25 \mu m$) et la richesse globale supérieure à 1 assure une propagation continue du front de flamme. En revanche, dans des conditions d'allumage difficiles (diamètre de gouttes élevé, forte hétérogénéité de richesse), la répartition de carburant dans le foyer peut influencer fortement le temps voire le succès de l'allumage. La Fig. 9.12 montre que la fraction volumique de liquide α_l dans les gaz frais est fortement hétérogène. Sous l'influence des structures turbulentes du gaz, les gouttes subissent les effets de concentration préférentielle mis en évidence dans le chapitre 6. Près de l'injection, elles s'accumulent autour du point d'arrêt amont de la zone de recirculation centrale (cf. section 9.2.1) et se retrouvent éjectées des structures tourbillonnaires recirculantes. Dans la région aval, la turbulence générée en amont a deux effets antagonistes : elle homogénéise la fraction volumique liquide par dispersion tout en créant une ségrégation par l'éjection des gouttes hors des zones de vorticit . La position du front de flamme par rapport au champ de α_l montre que la réaction n'est pas pilotée directement par la présence de ce carburant : certaines zones du front sont quasi exemptes de carburant liquide alors que d'autres en sont fortement chargées. Le plissement important du front de flamme est donc principalement d    la recirculation centrale du jet principal et non   une variation de vitesse de consommation en fonction de la richesse locale. La forme de la flamme stabilis e pr s de l'injecteur du secteur *S16* indique n anmoins que la r action reste en p riph rie de la zone o  la charge liquide  lev e est difficile    vaporer et o  le m lange gazeux est trop riche pour br ler. Cette r gion fortement charg e se limite toutefois   la sortie de l'injecteur et n'emp che pas la progression azimutale du front de flamme. Par ailleurs, l'absence de carburant liquide dans les gaz br l s montre que la totalit  du spray s' vapore dans le front de flamme. Pour des diam tres de gouttes plus  lev s induisant des temps d' vaporation plus longs, le taux de r action local pourrait diminuer jusqu'  provoquer l'extinction locale de la flamme l  o  la richesse est moins favorable   la r action. Ainsi, des tests ont montr  que l'allumage  choue lorsque le spray contient des gouttes 2 fois plus grosses ($50 \mu m$), la flamme n' tant pas capable de se propager de la zone d'allumage (jets chauds) aux br leurs principaux les plus proches.

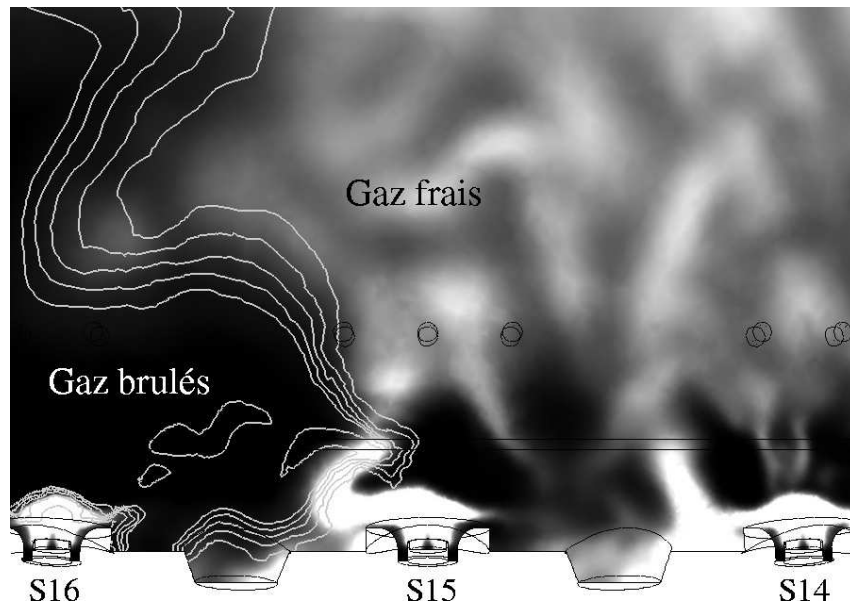


FIG. 9.12 - Champ de fraction volumique liquide dans la surface C (secteurs 14 à 16) à $t = 30.2 \text{ ms}$ (noir : $0 \rightarrow$ blanc : 3.10^{-4}). Le front de flamme est repéré par les iso-lignes de température (lignes gris clair).

Comparaison avec l'allumage en carburation gazeuse

Afin de poursuivre l'analyse de l'effet du spray sur l'allumage du foyer, on étudie une configuration où l'injection liquide est remplacée par un jet de carburant gazeux. La LES monophasique de l'allumage complet de la chambre *Vesta* fournit ainsi un élément de comparaison intéressant. Seuls deux paramètres différencient ce calcul monophasique, de l'allumage diphasique :

- le spray initial a été remplacé par une injection de carburant gazeux dont le débit massique est équivalent ;
- afin d'éviter un effet de "bombe", la carburation de la chambre est initiée au même instant que l'activation des jets chauds d'allumage.

La Fig. 9.13 illustre l'évolution du front de flamme dans le calcul monophasique. Par rapport à l'allumage diphasique (cf. article, Fig. 15), les différences suivantes sont notées :

- l'allumage des premiers brûleurs par les jets chauds se fait de manière quasi symétrique ;
- en raison de l'absence de carburant dans la condition initiale, le front de flamme n'est pas continu. En effet, la réaction a plutôt lieu dans la région amont du foyer, là où la richesse est suffisante, alors qu'elle est faible dans la région aval, en particulier durant les premiers instants de la séquence.
- en conséquence la flamme progresse surtout dans la zone proche des injecteurs et la présence de gaz chauds en aval résulte plutôt de la convection des gaz qui sont brûlés en amont.
- l'effet d'asymétrie de la progression azimutale du front est nettement moins marqué que dans le cas diphasique et la tendance inverse est observée : le front se propage légèrement plus vite dans le sens anti-horaire (vers la gauche sur la Fig. 9.13) que dans le sens horaire.

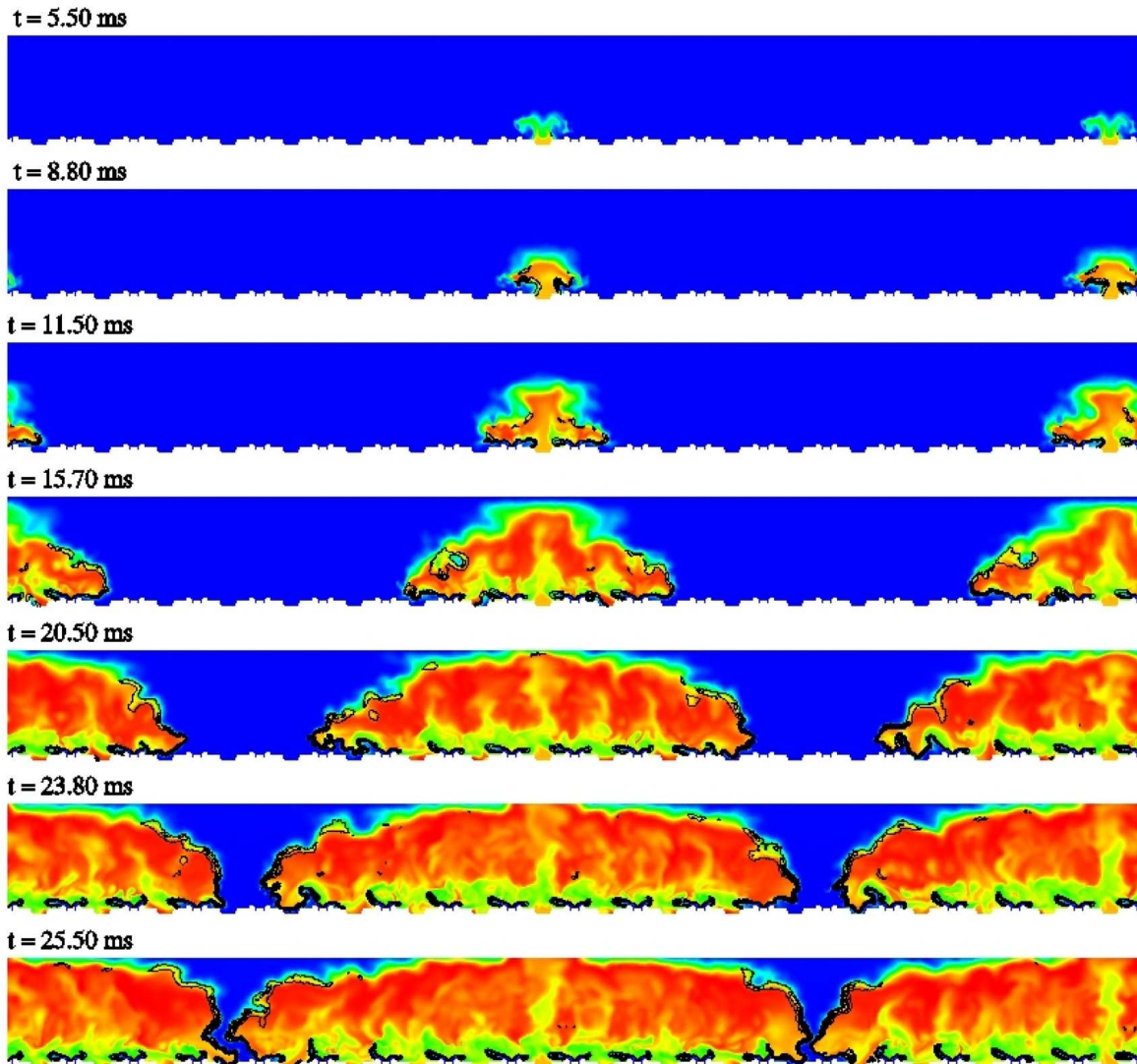


FIG. 9.13 - Surface C_{dev} coloriée par la température (bleu : 273 K \rightarrow rouge : 2400 K) à des instants successifs de la séquence d'allumage. Lignes noires : iso-lignes de taux de réaction.

La Fig. 9.14 montre que le point de progression (LP) avance nettement plus vite dans le cas monophasique : le délai nécessaire à l'allumage du premier brûleur (*phase 1*) est plus court et le taux de progression azimutale (*phase 2*) est plus élevé que dans le cas diphasique. Cette différence s'observe également sur la Fig. 9.15 qui indique une vitesse de progression azimutale (V_{LP}) environ deux fois plus rapide dans le cas monophasique. Malgré cet écart, pour des positions de la flamme situées entre 40° et 85° , on note une corrélation significative entre les deux simulations : V_{LP} augmente lorsque le front s'approche de l'axe de l'injecteur principal puis diminue lorsqu'il s'en éloigne. L'effet de l'aérodynamique propre des brûleurs sur la vitesse de progression diphasique a été mis en évidence dans l'article. D'après

la Fig. 9.15, un processus identique est à l'œuvre dans le cas monophasique. Les analyses détaillées décrivant le mécanisme de progression du front de flamme dans le cas diphasique n'ont pas été appliquées au calcul gazeux. Toutefois, les valeurs de l'ordre de 20 m.s^{-1} atteintes par la vitesse absolue de la flamme monophasique suggèrent que celui-ci est mû par un mécanisme identique : un effet de souffle dû à l'expansion thermique des gaz brûlés. L'écart de vitesse de progression s'explique alors par un taux de production des gaz brûlés (\dot{m}_{comb} dans l'Eq. 7 de l'article) plus grand dans le cas monophasique en raison d'une vitesse de consommation plus élevée de la flamme gazeuse par rapport à la flamme diphasique. Cette différence entraîne un délai d'allumage près de deux fois supérieur lorsque la combustion a lieu en milieu diphasique.

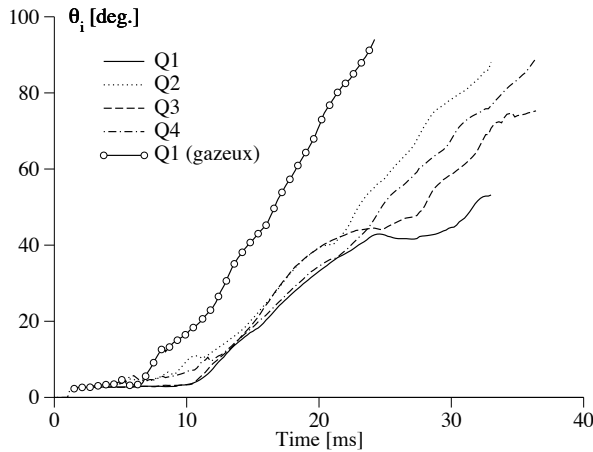


FIG. 9.14 - Évolution temporelle de la position azimutale du front de flamme θ_i dans les quatre quadrants de la chambre en diphasique et dans le quadrant Q1 en gazeux

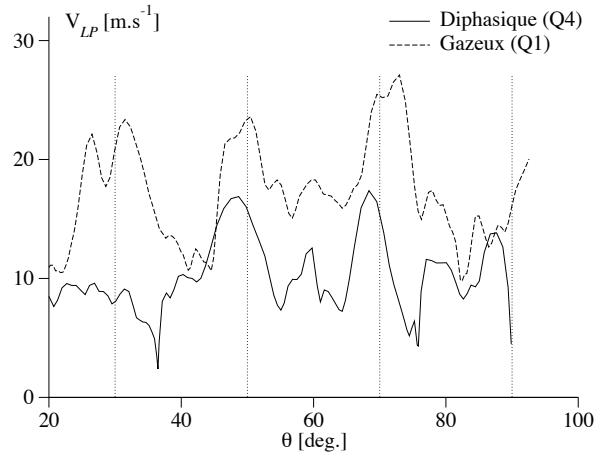


FIG. 9.15 - Vitesse azimutale du point de progression du front de flamme V_{LP} en fonction de sa position azimutale θ_i dans le quadrant Q1 (calcul gazeux) et Q4 (calcul diphasique). Les traits verticaux pointillés indiquent la position des injecteurs.

Conclusion

L'analyse du champ de fraction volumique liquide montre que la flamme se propage dans un écoulement fortement hétérogène en carburant liquide. Dans le cas présent où les caractéristiques du spray sont favorables à l'allumage, ces fluctuations ne semblent pas affecter le mécanisme de progression de la flamme. Toutefois, elles sont susceptibles d'influencer les cas où l'allumage du spray est difficile (temps d'évaporation et de combustion plus longs) et cette analyse montre que le modèle Euler-Euler est capable de prendre en compte ces fluctuations à l'échelle résolue.

La comparaison avec un allumage équivalent en phase gazeuse confirme les observations concernant

l'effet du spray sur la dynamique de l'allumage : l'allumage des premiers secteurs et la propagation azimutale du front sont tous deux retardés par le délai nécessaire à l'évaporation du carburant liquide. Cependant, cet effet diphasique ne remet pas en cause le mécanisme fondamental de propagation : tant en monophasique qu'en diphasique, le front de flamme avance grâce à l'effet d'expansion thermique des gaz brûlés et sa vitesse de progression est modulée par l'aérodynamique propre des brûleurs. En provoquant une diminution de la vitesse locale de consommation donc du taux intégral de production des gaz brûlés, la présence du spray réduit l'effet de souffle dû à l'expansion thermique. Une comparaison plus fine des cas monophasique et diphasique permettrait de préciser l'origine de certaines différences comme la variabilité de l'allumage en fonction du sens azimutal de progression. Cette analyse serait toutefois limitée par l'influence des conditions initiales de carburation distinctes entre les deux cas.

Conclusion générale

L'objectif général de cette thèse est d'améliorer la compréhension et la prédiction de l'allumage dans les foyers de turbines aéronautiques grâce à un outil numérique original basé sur la simulation aux grandes échelles (LES). Sans traiter le problème de la création du noyau initial d'allumage, l'étude s'est focalisée sur le processus de propagation et stabilisation de flamme où le phénomène de combustion diphasique est prépondérant. La complexité de la combustion diphasique turbulente a orienté les choix théoriques initiaux vers des modèles simples pour décrire les phénomènes non résolus explicitement par la méthode LES (échelles turbulentes de sous-maille, réaction chimique, évaporation de gouttes, etc.). Pour sa facilité de couplage et son aptitude au calcul massivement parallèle, l'approche eulérienne mésoscopique a été retenue pour modéliser la phase dispersée. Au Cerfacs, le développement théorique de cette approche résulte du travail de thèse d'A. Kaufmann [110] et a été étendu au contexte de la LES par E. Riber dans sa thèse [206]. Une première application à la combustion diphasique est proposée dans la thèse de S. Pascaud [181]. Dans la continuité de ces travaux, la présente étude fournit un cadre théorique complet pour décrire les écoulements diphasiques réactifs en LES avec l'approche eulérienne mésoscopique. Les développements portent en particulier sur le couplage entre le spray et le modèle de combustion turbulente et sur la mise en place d'un modèle cinétique simplifié décrivant la chimie du kérosène. Sur le plan informatique, le solveur eulérien initialement développé par Kaufmann [110] et Mossa [173] a été intégré à la version monophasique courante du code de calcul LES AVBP (travail en collaboration avec E. Riber) pour obtenir la version actuelle (AVBP V6.X), aujourd'hui largement utilisée. L'emploi d'algorithmes développés pour le solveur gazeux et le respect des contraintes de codage imposées par le parallélisme ont permis de conserver les performances originales d'AVBP en terme de calcul massivement parallèle. La présentation de l'outil LES diphasique réactif a fait l'objet d'une publication collective dans *Flow, Turbulence and Combustion* [28] (cf. annexe B).

À travers trois cas tests académiques, le travail de validation s'est efforcé de montrer que, malgré la simplicité de ses modèles, cet outil permet de décrire les principales caractéristiques de la combustion diphasique. Premièrement, l'étude de l'évaporation de gouttes dans une turbulence homogène isotrope a montré la capacité du code LES à prendre en compte le rôle de la concentration préférentielle des gouttes, de l'évaporation et du transport diffusif dans la production de variance de vapeur. Cette caractéristique est importante car la distribution de vapeur de carburant résultant des phénomènes conjoints de dispersion turbulente et d'évaporation influence fortement la structure des flammes rencontrées dans les foyers industriels. En outre, la conservativité de la masse et de l'énergie a été vérifiée et le calcul présente une comparaison satisfaisante avec une simulation lagrangienne équivalente. Les deux cas tests suivants fournissent une première validation du code dans une configuration réactive à travers deux flammes planes

diphases. Pour la première flamme, dite homogène, le code LES reproduit avec précision la solution analytique du problème. La seconde flamme, dite saturée, présente un caractère propagatif mettant en jeu un couplage fort entre le spray et la zone réactive. L'analyse de la structure de cette flamme a révélé une dynamique où la réaction chimique, le transport diffusif mais aussi les transferts de masse, de chaleur et de quantité de mouvement entre phases jouent un rôle crucial. L'étude paramétrique reproduit un comportement prédit par le modèle théorique de Ballal et Lefebvre [17] ainsi que les tendances relevées dans l'étude bibliographique pour ce type de flamme. Enfin, cette étude permet de tester le modèle de flamme diphase épaissie avant son utilisation dans la LES.

L'outil LES complet a été appliqué à la simulation de l'écoulement turbulent diphase réactif dans une géométrie réaliste représentant un secteur périodique de chambre de combustion annulaire d'hélicoptère. Ce calcul démontre la faisabilité de la méthode et le bon comportement du couplage entre les différents sous-modèles. Le régime de flamme stationnaire observé dépend essentiellement de la richesse globale, de l'aérodynamique interne du foyer et des propriétés initiales du spray. Le mécanisme de stabilisation de flamme fait intervenir l'évaporation du liquide dans les gaz chauds recirculés et la combustion de la vapeur de carburant en régime de diffusion. L'influence du spray se manifeste aussi par des effets de saturation en vapeur et de diminution de la température de flamme sous l'effet de la chaleur latente. Dans un second temps, cette configuration mono-secteur a permis de simuler l'allumage d'un brûleur par un dispositif de type allumeur-torche. Le calcul souligne l'importance des effets diphases et montre que l'allumage n'est pas dû à un phénomène propagatif. Il résulte plutôt du transport convectif d'une flamme de type diffuse par l'écoulement recirculé. La compréhension de ce mécanisme d'allumage représente une étape importante dans la prédiction du processus global. Les résultats de cette application industrielle révèlent la nécessité d'améliorer les prédictions du schéma cinétique en régime riche. D'autre part, l'impact du modèle de combustion est difficile à estimer dans la mesure où les structures de flamme rencontrées dans la LES diffèrent sensiblement de la structure des flammes académiques ayant servi à la validation. Outre l'approximation due à la représentation de l'allumeur par un jet chaud, une des principales incertitudes réside dans le manque d'informations sur les caractéristiques initiales du spray (distribution de taille de gouttes, de vitesse, etc.), paramètre influençant fortement l'allumage.

Passer de la géométrie d'un secteur unique de 20 deg. aux 360 deg. d'une chambre de combustion complète représente un défi informatique que le calcul massivement parallèle a permis de relever. Au-delà de la démonstration des performances informatiques du code, la simulation sur 700 processeurs de l'allumage complet de la chambre *Vesta* fournit un éclairage précieux sur le mécanisme permettant la progression d'une flamme de secteur à secteur. La phase liquide joue un rôle dans la dynamique des différentes étapes de l'allumage : d'une manière générale, le phénomène d'évaporation induit un effet de retard sur le phénomène d'allumage. L'effet modérateur de la phase liquide sur la dynamique des différentes étapes de l'allumage a été mis en évidence. Les vitesses de progression mesurées montrent que le front de flamme avance nettement plus vite que la vitesse de flamme turbulente en raison d'un effet de « souffle » lié à l'accumulation des gaz brûlés dans les zones allumées. En outre, l'aérodynamique propre des brûleurs influence fortement la vitesse locale de progression et introduit des variations en fonction du secteur de chambre, du quadrant et du sens azimutal de progression.

Les simulations réalisées dans cette thèse montrent que la LES est un outil prometteur dans la prédiction de l'allumage des foyers aéronautiques. Son caractère instationnaire et sa capacité à résoudre explicitement les structures turbulentes impliquées dans l'allumage représentent ses principaux atouts. Les coûts

de calcul élevés engendrés par cette méthode peuvent être efficacement maîtrisés grâce au calcul massivement parallèle. Toutefois, pour des applications d'allumage, deux limitations majeures peuvent être identifiées :

- Les conditions physiques défavorables peuvent conduire à des temps d'allumage très longs (plusieurs secondes), hors de portée des calculs LES actuels.
- Lorsqu'on recherche une probabilité d'allumage, la simulation d'une séquence unique n'a pas de valeur prédictive. Une moyenne d'ensemble sur un grand nombre de réalisations (c.-à-d. de simulations) est donc requise. Bien qu'un parallélisme de tâche soit alors envisageable, une telle approche statistique semble difficilement réalisable avec les moyens de calcul actuels. Sur le plan théorique, notons par ailleurs qu'une simulation LES unique ne peut représenter strictement une réalisation physique.

La simplicité des modèles utilisés appelle naturellement des développements ultérieurs, dont les principaux sont les suivants :

- La présence d'une large gamme de richesse lors de l'allumage requiert une cinétique chimique adaptée à tous les régimes.
- La prise en compte de l'interaction flamme-spray par le modèle de flamme épaissie reste assez rudimentaire et nécessite des améliorations.
- Le caractère partiellement prémélangé des régimes rencontrés dans les applications industrielles suggère le recours à un modèle de combustion conçu pour ces régimes tel que le modèle *PCM*. Ce modèle devra toutefois prendre en compte les effets diphasiques.
- Dans l'approche eulérienne mésoscopique l'erreur liée à l'utilisation du couplage inverse pour décrire les transferts massiques et thermiques du liquide vers le gaz n'a pas été quantifiée. La prise en compte du couplage inverse (pour la traînée) fait l'objet de la thèse en cours de E. Massi Boscolo à l'IMFT.
- Les effets de polydispersion du spray devront être considérés car ils jouent un rôle important dans l'allumage (la présence de petites gouttes pouvant favoriser l'allumage).

Du point de vue de la validation, les cas académiques étudiés font apparaître certains couplages caractéristiques de la combustion diphasique turbulente mais ne permettent pas d'évaluer les modèles dans une configuration où toutes les interactions sont prises en compte. Un étude DNS d'une flamme saturée dans une turbulence homogène isotrope fournirait un cas test intéressant pour valider le modèle de combustion turbulente diphasique. Les études académiques permettent une exploration poussée des phénomènes physiques mais ne se substituent pas à la confrontation expérimentale : la validation complète du code nécessite une expérience de référence bien documentée comme celle de Pichard *et al.* [190] ou Widmann et Presser [268]. Enfin, concernant les configurations réalistes, une étude paramétrique permettrait d'étudier l'effet de différents facteurs ayant une influence sur le temps et le succès de l'allumage (diamètre de gouttes, richesse, température, pression, débits, position de l'allumeur, etc.).

Les progrès de l'informatique et des modèles physiques sont donc nécessaires pour rendre l'approche LES pleinement prédictive. Toutefois, la LES représente un outil précieux pour étudier la physique des phénomènes de combustion à grande échelle qui sont actuellement hors de portée de la simulation numérique directe. L'allumage des foyers aéronautiques en est un exemple mais on peut citer également les incendies voire les phénomènes de combustion turbulente à l'échelle cosmique tels que les explosions

CONCLUSION GÉNÉRALE

d'étoiles.

Bibliographie

- [1] ABRAMZON, B., AND SIRIGNANO, W. A. Droplet vaporisation model for spray combustion calculations. *Int. J. Heat Mass Transfer* 9 (1989), 1605–1618. 70
- [2] AHMED, S., AND MASTORAKOS, E. Spark ignition of lifted turbulent jet flames. *Combust. Flame* 146, 1-2 (2006), 215–231. 239
- [3] AKAMATSU, F., MIZUTANI, Y., KATSUKI, M., TSUSHIMA, S., AND CHO, Y. D. Measurement of the local group combustion number of droplet clusters in a premixed spray stream. *Proc. Combust. Inst.* 26 (1996), 1723–1729. 36
- [4] AKAMATSU, F., MIZUTANI, Y., KATSUKI, M., TSUSHIMA, S., CHO, Y. D., AND NAKABE, K. Group combustion behavior of droplets in a premixed-spray flame. *Atomization and Sprays* 7 (1997), 199–218. 36
- [5] ALKIDAS, A., AND DURBETAKI, P. Ignition characteristics of a stagnation point combustible mixture. *Combust. Sci. Tech.* 3 (1971), 187. 239
- [6] ALLSOPP, N., TABARY, A., FOLLOWS, J., VEZOLLE, P., HENNECKE, M., REDDY, H., ISHIBASHI, F., SOSA, C., PAOLINI, M., PRAKASH, S., QUINTERO, D., AND LASCU, O. *Unfolding the IBM eServer Blue Gene Solution*, First ed. IBM Redbooks, 2005, pp. 277–285. 40, 123
- [7] ANGELBERGER, C., EGOLFOPOULOS, F., AND VEYNANTE, D. Large eddy simulations of chemical and acoustic effects on combustion instabilities. *Flow Turb. and Combustion* 65, 2 (2000), 205–22. 97
- [8] ANGELBERGER, D., VEYNANTE, D., EGOLFOPOULOS, F., AND POINSOT, T. Large eddy simulations of combustion instabilities in premixed flames. In *Summer Program* (1998), Center for Turbulence Research, NASA Ames/Stanford Univ., pp. 61–82. 97, 98
- [9] APTE, S., GOROKHOVSKI, M., AND MOIN, P. Large-eddy simulation of atomizing spray with stochastic modeling of secondary breakup. *Int. J. Multiphase Flow* 29 (2003), 1503–1522. 34
- [10] APTE, S. V., MAHESH, K., MOIN, P., AND OEFELEIN, J. C. Large-eddy simulation of swirling particle-laden flows in a coaxial-jet combustor. *Int. J. Multiphase Flow* 29, 8 (2003), 1311–1331. 35, 36
- [11] ARMENIO, V., PIOMELLI, U., AND FIOROTTO, V. Effect of the subgrid scales on particle motion. *Phys. Fluids* 11, 10 (1999), 3030–3042. 35
- [12] AVBP. www.cerfacs.fr/cfd/avbp_code.php. 124

BIBLIOGRAPHIE

- [13] BALLAL, D., AND LEFEBVRE, A. The influence of flow parameters on minimum ignition energy and quenching distance. *Proc. of the Combustion Institute 15* (1974), 1473–1481. 239
- [14] BALLAL, D., AND LEFEBVRE, A. Ignition and flame quenching of quiescent fuel mists. In *Proc. R. Soc. Lond. A* (1978), vol. 364, pp. 277–294. 27
- [15] BALLAL, D., AND LEFEBVRE, A. Ignition and flame quenching of flowing heterogeneous fuel-air mixtures. *Combust. Flame 35* (1979), 155–168. 27
- [16] BALLAL, D., AND LEFEBVRE, A. A general model of spark ignition for gaseous and liquid fuel-air mixtures. In *Eighteenth Symp. (Intern.) on Combustion* (Pittsburg, 1981), vol. 18, The Combustion Institute, pp. 1737–1747. 27, 235
- [17] BALLAL, D. R., AND LEFEBVRE, A. H. Flame propagation in heterogeneous mixtures of fuel droplets, fuel vapor and air. In *18th Symp. (Int.) on Combustion* (1981), The Combustion Institute, pp. 321–327. 27, 159, 161, 188, 198, 270
- [18] BAUM, M., AND POINSOT, T. Effects of mean flow on premixed flame ignition. *Combust. Sci. Tech. 106*, 1-3 (1995), 19. 239
- [19] BEDUNEAU, J.-L., KIM, B., ZIMMER, L., AND IKEDA, Y. Measurements of minimum ignition energy in premixed laminar methane/air flow by using laser induced spark. *Combust. Flame*, 132 (2003), 653–665. 239
- [20] BEN DAKHLIA, R. *Combustion stationnaire et instationnaire de mélanges diphasiques*. PhD thesis, Ecole Centrale Paris, 2001. 158, 161, 188, 190, 198, 235
- [21] BILGER, R. W. Conditional moment closure for turbulent reacting flow. *Phys. Fluids 5* (1993), 437. 96
- [22] BIRD, R., STEWART, W., AND LIGHFOOT, E. *Transport phenomena*. John Wiley, New York, 1960. 52
- [23] BLINT, R. The relationship of the laminar flame width to flame speed. *Combust. Sci. Tech. 49* (1986), 79–92. 189
- [24] BOGER, M., AND VEYNANTE, D. Large eddy simulations of a turbulent premixed v-shape flame. In *Advances in Turbulence VIII*, C. Dopazo, Ed. CIMNE, Barcelona, Spain, 2000, pp. 449 – 452. 95
- [25] BOGER, M., VEYNANTE, D., BOUGHANEM, H., AND TROUVÉ, A. Direct numerical simulation analysis of flame surface density concept for large eddy simulation of turbulent premixed combustion. In *27th Symp. (Int.) on Combustion* (Boulder, 1998), The Combustion Institute, Pittsburgh, pp. 917–927. 95
- [26] BOILEAU, M., MOSSA, J.-B., CUENOT, B., POINSOT, T., BISSIÈRES, D., AND BÉRAT, C. Toward LES of an ignition sequence in a full helicopter combustor. In *1st Workshop INCA* (SNECMA, Villaroche, France, 2005), pp. 27–34. 40, 240
- [27] BOILEAU, M., PASCAUD, S., CUENOT, B., AND T., P. Large eddy simulation of spray combustion in aeronautical combustors. In *Eleventh International Conference on Numerical Combustion* (Granada, Spain, 2006), SIAM NC06. 240
- [28] BOILEAU, M., PASCAUD, S., RIBER, E., CUENOT, B., GICQUEL, L., AND POINSOT, T. Large eddy simulation of spray combustion in gas turbines. *Submitted to Flow Turb. and Combustion* (2007). 37, 38, 223, 240, 269

- [29] BORÉE, J., ISHIMA, T., AND FLOUR, I. The effect of mass loading and inter-particle collisions on the development of the polydispersed two-phase flow downstream of a confined bluff body. *J. Fluid Mech.* 443 (2001), 129–165. 38
- [30] BORGHI, R. Background on droplets and sprays. In *Combustion and turbulence in two phase flows, Lecture Series 1996-02* (1996), Von Karman Institute for Fluid Dynamics. 31, 32
- [31] BORGHI, R. The links between turbulent combustion and spray combustion and their modelling. In *8th International Symposium on Transport Phenomena in Combustion* (1996), pp. 1–18. 31
- [32] BORGHI, R., AND CHAMPION, M. *Modélisation et théorie des flammes*, editions technip ed. TECHNIP, 2000. 31
- [33] BOUDIER, G., GICQUEL, L. Y. M., POINSOT, T., BISSIÈRES, D., AND BÉRAT, C. Comparison of LES, RANS and experiments in an aeronautical gas turbine combustion chamber. *Proc. of the Combustion Institute 31* (2007), 3075–3082. 23
- [34] BOUDIER, P., HENRIOT, S., POINSOT, T., AND T., B. A model for turbulent flame ignition and propagation in spark ignition engines. In *Twenty-Fourth Symposium (International) on Combustion* (1992), T. C. Institute, Ed., pp. 503–510. 239
- [35] BOUGHANEM, H. *Évaluation des termes de transport et de dissipation de surface de flamme par simulation numérique directe de la combustion turbulente*. PhD thesis, Université de Rouen, 1998. 137
- [36] BRUNO, T. J., HUBER, M. L., LAESECKE, A., LEMMON, E. W., AND PERKINS, R. A. Thermochemical and thermophysical properties of JP-10. Tech. Rep. NISTIR 6640, Chemical science and technology laboratory, 325 Broadway Boulder, CO 80305, June 2006. 105
- [37] BURGER, M., SCHMEHL, R., PROMMERSBERGER, K., SCHÄFER, O., KOCH, R., AND WITIG, S. Droplet evaporation modelling by the distillation curve model : accounting for kerosene fuel and elevated pressures. *Int. J. Heat Mass Transfer* , 46 (2003), 4403–12. 71
- [38] BUTLER, T., AND O’ROURKE, P. A numerical method for two-dimensional unsteady reacting flows. In *16th Symp. (Int.) on Combustion* (1977), The Combustion Institute, pp. 1503 – 1515. 97
- [39] CALHOON, W., AND MENON, S. Subgrid modeling for large eddy simulations. In *AIAA 34th Aerospace Science Meeting* (Reno, Nevada, 1996), pp. AIAA Paper 96–0516. 96
- [40] CANNEVIÈRE, K. *Simulation numérique directe de la combustion turbulente diphasique : application à l’étude de la propagation et de la structure des flammes*. PhD thesis, INSA de Rouen, 2003. 77
- [41] CASTANET, G., LAVIEILLE, P., LEMOINE, F., LEMOUCHÉ, M., ATTHASIT, A., BISCOS, Y., AND LAVERGNE, G. Energetic budget on an evaporating monodisperse droplet stream using combined optical methods. evaluation of the convective heat transfer. *Int. J. Heat Mass Transfer* , 45 (2002), 5053–5067. 71, 76, 78
- [42] CHAMPION, M., DESHAIES, B., JOULIN, G., AND KINOSHITA, K. Spherical flame initiation : Theory versus experiments for lean propane-air mixtures. */CF 65* (1986), 319–337. 239
- [43] CHANG, S. *Transport phenomena in combustion*. Taylor & Francis, 1996. 31
- [44] CHAPMAN, S., AND COWLING, T. *The Mathematical Theory of Non-Uniform Gases*, cambridge mathematical library ed. Cambridge University Press, 1939 (digital reprint 1999). 57

BIBLIOGRAPHIE

- [45] CHARLETTE, F., VEYNANTE, D., AND MENEVEAU, C. A power-law wrinkling model for LES of premixed turbulent combustion : Part I - non-dynamic formulation and initial tests. *Combust. Flame* 131 (2002), 159–180. 100
- [46] CHASSAING, P. *Turbulence en mécanique des fluides, analyse du phénomène en vue de sa modélisation à l'usage de l'ingénieur*. Cépaduès Editions, 2000. 81
- [47] CHIANG, C., RAJU, M., AND SIRIGNANO, W. Numerical analysis of convecting, vaporizing fuel droplet with variable properties. *Int. J. Heat Mass Transfer* 35, 5 (1992), 1307–1324. 71
- [48] CHIANG, C. H., AND SIRIGNANO, W. A. Interacting, convecting, vaporizing fuel droplets with variable properties. *Int. J. Heat Mass Transfer* 36, 4 (1993), 875–886. 71
- [49] CHICKOS, J. S., HILLESHEIM, D., AND NICHOLS, G. The enthalpies of vaporization and sublimation of exo- and endo-tetrahydrodicyclopentadienes at $t = 298.15$ k. *J. Chem. Thermodynamics* 34, 10 (December 2002), 1647–1658. 105
- [50] CHIU, H., KIM, H., AND CROKE, E. Internal group combustion of liquid droplets. In *19th Symp. (Int.) on Combustion* (1982), The Combustion Institute, Pittsburgh, pp. 971–980. 30
- [51] CHIU, H., AND LIU, T. Group combustion of liquid droplets. *Combust. Sci. Tech.* 17 (1977), 127–131. 30
- [52] CHIU, H. H. Advances and challenges in droplet and spray combustion. i. toward a unified theory of droplet aerothermochemistry. *Prog. Energy Comb. Sci.*, 26 (2000), 381–416. 34
- [53] CHIU, H. H., AND CROKE, E. Group combustion of liquid fuel sprays. Energy Technology Lab 81-2, University of Illinois, Chicago, 1981. 30
- [54] COLIN, O., DUCROS, F., VEYNANTE, D., AND POINSOT, T. A thickened flame model for large eddy simulations of turbulent premixed combustion. *Phys. Fluids* 12, 7 (2000), 1843–1863. 97, 98, 99, 100
- [55] COLIN, O., AND RUDGYARD, M. Development of high-order taylor-galerkin schemes for unsteady calculations. *J. Comput. Phys.* 162, 2 (2000), 338–371. 115, 116, 119
- [56] COLTRIN, M., KEE, R., AND RUPLEY, F. SURFACE CHEMKIN (version 4.0) : A fortran package for analyzing heterogeneous chemical kinetics at a solid-surface – gas-phase interface. Tech. Rep. SAND90-8003C, Sandia National Laboratories, 1990. 106
- [57] CONSTANTINESCU, G., MAHESH, K., APTE, S. V., IACCARINO, G., HAM, F., AND MOIN, P. A new paradigm for simulation of turbulent combustion in realistic gas turbine combustors using les. In *ASME Turbo Expo 2003-Power for Land Sea and Air* (Atlanta, Georgia, USA, 2003), vol. GT2003-38356. 35
- [58] COOK, A., AND BUSHE, W. A subgrid-scale model for the scalar dissipation rate in non premixed combustion. *Phys. Fluids A* 11, 3 (1999), 746 – 748. 96
- [59] COOK, A., AND RILEY, J. A subgrid model for equilibrium chemistry in turbulent flows. *Phys. Fluids A* 6, 8 (1994), 2868 – 2870. 96
- [60] CUENOT, B., BENOIT, L., TRUFFIN, K., MOSSA, J.-B., PASCAUD, S., RIBER, E., AND BOILEAU, M. Rapport PRC - Année 2. Contract report CR/CFD/03/120, CERFACS, December 2003. 144

- [61] DAMKÖHLER, G. The effect of turbulence on the flame velocity in gas mixtures. *Z. Electrochem* 46 (1940), 601–626. 28
- [62] DE BRUYN KOPS, S., RILEY, J., KOSALY, G., AND COOK, A. Investigation of modeling for non-premixed turbulent combustion. *Flow Turb. and Combustion* 60, 1 (1998), 105–122. 96
- [63] DESJARDINS, O., FOX, R. O., AND VILLEDIEU, P. A quadrature-based moment closure for the Williams spray equation. In *Proc. of the Summer Program*. Center for Turbulence Research, NASA Ames/Stanford Univ., 2006, pp. 223–234. 59
- [64] DOMINGO, P., VERVISCH, L., AND BRAY, K. Partially premixed flamelets in LES of non-premixed turbulent combustion. *Combust. Theory and Modelling* 6, 529–551 (2002). 96
- [65] DOMINGO, P., VERVISCH, L., PAYET, S., AND HAUGUEL, R. DNS of a premixed turbulent V flame and LES of a ducted flame using a FSD-PDF subgrid scale closure with FPI-tabulated chemistry. *Combust. Flame* 143, 566–586 (2005). 96
- [66] DUCHAINE, F., GICQUEL, L., BISSIÈRES, D., BÉRAT, C., AND POINSOT, T. Automatic design optimization applied to lean premixed combustor cooling. In *1st Workshop INCA* (SNECMA Villaroche, France, 2005), pp. 295–304. 23
- [67] DUCHAINE, F., GICQUEL, L., POINSOT, T., BISSIÈRES, D., AND BÉRAT, C. Optimization loop based on a CFD RANS code. In *ICAS 2006* (Munich, Germany, 2006). 23
- [68] DUCROS, F., COMTE, P., AND LESIEUR, M. Large-eddy simulation of transition to turbulence in a boundary layer developing spatially over a flat plate. *J. Fluid Mech.* 326 (1996), 1–36. 87
- [69] ECHEKKI, T., AND FERZIGER, J. A simplified reaction rate model and its application to the analysis of premixed flames. *Combust. Sci. Tech.* 89 (1993), 293–351. 168
- [70] EL-ASRAG, H., AND MENON, S. Large eddy simulation of bluff-body stabilized swirling non-premixed flames. *Proc. of the Combustion Institute* 31 (2007), 1747–1754. 240
- [71] FEDE, P., AND SIMONIN, O. Numerical study of the subgrid fluid turbulence effects on the statistics of heavy colliding particles. *Phys. Fluids* 18, 045103 (2006). 35
- [72] FERNÁNDEZ-TARRAZO, E., SÁNCHEZ, A. L., LIÑÁN, A., AND WILLIAMS, F. A. A simple one-step chemistry model for partially premixed hydrocarbon combustion. *Combust. Flame* (2006). 109
- [73] FÉVRIER, P. *Etude numérique des effets de concentration préférentielle et de corrélation spatiale entre vitesses de particules solides en turbulence homogène isotrope stationnaire*. PhD thesis, INP Toulouse, 2000. 70, 147
- [74] FÉVRIER, P., AND SIMONIN, O. Statistical and continuum modelling of turbulent reactive particulate flows. part 2 : Application of a two-phase second-moment transport model for prediction of turbulent gas-particle flows. In *Theoretical and Experimental Modeling of Particulate Flows, Lecture Series 2000-06, von Karman Institute for Fluid Dynamics, Rhode Saint Genese (Belgium)* (2000). 68, 70
- [75] FÉVRIER, P., SIMONIN, O., AND LEGENDRE, D. Particle dispersion and preferential concentration dependence on turbulent reynolds number from direct numerical simulation and large eddy simulation of isotropic homogeneous turbulence. In *Proc. 4th Int. Conference on Multiphase Flow* (New Orleans, USA, 2001), ICFM-2000. 147

BIBLIOGRAPHIE

- [76] FÉVRIER, P., SIMONIN, O., AND SQUIRES, K. Partitioning of particle velocities in gas-solid turbulent flows into a continuous field and a spatially uncorrelated random distribution : Theoretical formalism and numerical study. *J. Fluid Mech.* 533 (2005), 1–46. 58, 62
- [77] FIORINA, B., BARON, R., GICQUEL, O., THÉVENIN, D., CARPENTIER, S., AND DARABIHA, N. Modelling non-adiabatic partially premixed flames using flame-prolongation of ILDM. *Combust. Theory and Modelling* 7 (2003), 449–470. 110
- [78] FIORINA, B., GICQUEL, O., VERVISCH, L., CARPENTIER, S., AND DARABIHA, N. Approximating the chemical structure of partially-premixed and diffusion counter-flow flames using FPI flamelet tabulation. *Combust. Flame* 140 (2005), 147–160. 110
- [79] FIORINA, B., GICQUEL, O., VERVISCH, L., CARPENTIER, S., AND DARABIHA, N. Premixed turbulent combustion modeling using a tabulated detailed chemistry and PDF. *Proc. Combust. Inst.* 30, 1 (2005), 867–874. 96
- [80] FREITAG, M., AND JANICKA, J. Investigation of a strongly swirled premixed flame using les. *Proc. of the Combustion Institute* 31 (2007), 1477–1485. 240
- [81] FUREBY, C., AND GRINSTEIN, F. Monotonically integrated large-eddy simulation of free shear flows. *AIAA Journal* 37, 5 (1999), 544–556. 86
- [82] GALLANT, R. W., AND YAWS, C. L. *Physical properties of hydrocarbons and other chemicals*, vol. 3. Gulf Publishing Company, 1993. 105
- [83] GALPIN, J. Simulation des grandes structures des flammes non-prémélangées dans une perspective d’application de la LES aux moteurs Diesel. Rapport de thèse à mi-parcours, Institut Français du Pétrole, 2006. 96
- [84] GARCÍA, M., SOMMERER, Y., SCHÖNFELD, T., AND POINSOT, T. Evaluation of Euler/Euler and Euler/Lagrange strategies for large eddy simulations of turbulent reacting flows. In *ECCOMAS Thematic Conference on Computational Combustion* (2005). 56, 156
- [85] GERMANO, M., PIOMELLI, U., MOIN, P., AND CABOT, W. A dynamic subgrid-scale eddy viscosity model. *Phys. Fluids* 3, 7 (1991), 1760–1765. 87
- [86] GIAUQUE, A., SELLE, L., POINSOT, T., BUECHNER, H., KAUFMANN, P., AND KREBS, W. System identification of a large-scale swirled partially premixed combustor using LES and measurements. *J. Turb.* 6, 21 (2005), 1–20. 37, 120, 223
- [87] GICQUEL, L. LES non réactives monophasique et non réactives diphasiques en configuration industrielle : calculs VESTA. Contract report CR/CFD/03/137, CERFACS, December 2003. 207
- [88] GICQUEL, L., BOILEAU, M., AND POINSOT, T. LES monophasiques réactives - Makila 2a. Rapport contractuel CR/CFD/04/88, CERFACS, September 2004. 22
- [89] GICQUEL, L. M. Y., BOUDIER, G., AND POINSOT, T. J. Evaluation de la méthode Large Eddy Simulations pour la prédiction de l’extinction d’un moteur d’hélicoptère - deliverable 2 : ARRIUS extinction 9/1000 et 10/1000. Tech. Rep. CR/CFD/06/54, CERFACS, March 2006. 109
- [90] GICQUEL, O. Développement de méthodes automatiques de réduction de schémas cinétiques dédiées à la combustion laminaire et turbulente. Habilitation à diriger des recherches, 2005. 110
- [91] GICQUEL, O., DARABIHA, N., AND THÉVENIN, D. Laminar premixed hydrogen/air counter-flow flame simulations using flame prolongation of ildm with differential diffusion. *Proc. of the Combustion Institute* 28 (2000), 1901–1908. 110

- [92] GIRIMAJI, S., AND ZHOU, Y. Analysis and modeling of subgrid scalar mixing using numerical data. *Phys. Fluids A* 8, 5 (1996), 1224–1236. 96
- [93] GOULDIN, F. C. Combustion intensity and burning rate integral of premixed flames. In *26th Symp. (Int.) on Combustion* (1996), The Combustion Institute, Pittsburgh, pp. 381–388. 95
- [94] GREENBERG, J. B., SILVERMAN, I., AND TAMBOUR, Y. On the origin of spray sectional conservation equations. *Combust. Flame* 93 (1993), 90–96. 58, 160, 161
- [95] GREENBERG, J. B., SILVERMAN, I., AND TAMBOUR, Y. A new heterogeneous burning velocity formula for the propagation of a laminar flame front through a polydisperse spray of droplet. *Combust. Flame* 104 (1996), 358–368. 160
- [96] GREENBERG, J. B., SILVERMAN, I., AND TAMBOUR, Y. On droplet enhancement of the burning velocity of laminar premixed spray flames. *Combust. Flame (Short communication)* 113 (1998), 271–273. 160
- [97] HAM, F., APTE, S. V., IACCARINO, G., WU, X., HERRMANN, M., CONSTANTINESCU, G., MAHESH, K., AND MOIN, P. Unstructured LES of reacting multiphase flows in realistic gas turbine combustors. In *Annual Research Briefs - Center for Turbulence Research*. NASA Ames/Stanford Univ., 2003. 35, 57
- [98] HARRAN-KLOTZ, P., AND VILLEDIEU, P. PRC combustion : intégration du solveur diphasique lagrangien SPARTE dans le code AVBP. Tech. Rep. 1/08563, ONERA-DMAE, 2003. 144, 145, 146
- [99] HARSTAD, K., AND BELLAN, J. Modeling evaporation of Jet-A, JP-7 and RP-1 drops at 1 to 15 bars. *Combust. Flame* 77 (2004), 163–177. 71
- [100] HAWKES, E. R., AND CANT, S. R. A flame surface density approach to large eddy simulation of premixed turbulent combustion. In *28th Symp. (Int.) on Combustion* (2000), The Combustion Institute, Pittsburgh, pp. 51–58. 95
- [101] HAYASHI, S., AND KUMAGAI, S. Flame propagation in fuel droplet-vapor-air mixtures. In *Fifteenth Symp. (Intern.) on Combustion* (Pittsburg, 1974), Institute, The Combustion, pp. 445–452. 159, 161
- [102] HAYASHI, S., KUMAGAI, S., AND SAKAI, T. Propagation velocity and structure of flames in droplet-vapor-air mixtures. *Combust. Sci. Tech.* 15 (1976), 169–177. 159, 160, 161
- [103] HIROYASU, H., AND KADOTA, T. Fuel droplet size distribution in diesel combustion chamber. *SAE Technical paper 740715* (1974). 35
- [104] HIRSCH, C. *Numerical Computation of internal and external flows*. John Wiley, New York, 1988. 115
- [105] HIRSCHFELDER, J., CURTISS, C., AND BYRD, R. *Molecular theory of gases and liquids*. John Wiley & Sons, New York, 1969. 52
- [106] HUBBARD, G., DENNY, V., AND MILLS, A. Droplet evaporation : effects of transient and variable properties. *International Journal of Heat and Mass Transfer* 18 (1975), 1003–1008. 72, 76
- [107] JAMESON, A., SCHMIDT, W., AND TURKEL, E. Numerical solution of the Euler equations by finite volume methods using Runge-Kutta time stepping schemes. In *14th Fluid and Plasma Dynamic Conference* (Palo Alto, 1981), A. p. 81-1259, Ed. 116

BIBLIOGRAPHIE

- [108] KARLOVITZ, B., DENNISTON, D., KNAPSCHAEFER, D., AND WELLS, F. Studies on turbulent flames. In *4th Symp. (Int.) on Combustion (1953)*, William and Wilkins, Eds., The Combustion Institute, Pittsburgh, pp. 613–620. 28
- [109] KARPETIS, A., AND GOMEZ, A. An experimental study of well-defined turbulent nonpremixed spray flames. *Combust. Flame* 121, 1 (2000), 1–23. 203
- [110] KAUFMANN, A. *Vers la simulation des grandes échelles en formulation Euler/Euler des écoulements réactifs diphasiques*. PhD thesis, INP Toulouse, 2004. 37, 57, 58, 69, 132, 145, 176, 269
- [111] KAUFMANN, A., HÉLIE, J., SIMONIN, O., AND POINSOT, T. Comparison between Lagrangian and Eulerian particle simulations coupled with dns of homogeneous isotropic decaying turbulence. In *Proceedings of the Estonian Academy of Sciences, Tallinn, Estonia (2005)*, vol. 11, pp. 91–105. 79
- [112] KAUFMANN, A., MOREAU, M., SIMONIN, O., AND HELIE, J. Comparison between lagrangian and eulerian mesoscopic modelling approaches for inertial particles suspended in decaying isotropic turbulence. *submitted to J. Comput. Phys.* (2006). 131
- [113] KEE, R. J., RUPLEY, F. M., AND MILLER, J. A. Chemkin-ii : a fortran chemical kinetics package for the analysis of gas-phase chemical kinetics. Tech. rep., Sandia National Laboratories, 1991. 52
- [114] KERSTEIN, A. A linear eddy model of turbulent scalar transport and mixing. *Combust. Sci. Tech.* 60 (1988), 391. 96
- [115] KERSTEIN, A. Linear-eddy modeling of turbulent transport : Part ii. application to shear layer mixing. *Combust. Flame* 75, 3 - 4 (1989), 397 – 413. 96
- [116] KERSTEIN, A. Linear-eddy modelling of turbulent transport. part 3. mixing and differential molecular diffusion in round jets. *J. Fluid Mech.* 216 (1990), 411 – 435. 96
- [117] KERSTEIN, A. Linear-eddy modelling of turbulent transport. part 6. microstructure of diffusive scalar mixing fields. *J. Fluid Mech.* 231 (1991), 361 – 394. 96
- [118] KERSTEIN, A. Linear-eddy modeling of turbulent transport. part 4 : structure of diffusion flames. *Combustion, Science and Technology* 81 (1992), 75 – 96. 96
- [119] KERSTEIN, A., AND LAW, C. K. Percolation in combustion sprays i : Transition from cluster combustion to percolate combustion in non-premixed sprays. In *19th Symp. (Int.) on Combustion (1982)*, The Combustion Institute, Pittsburgh, pp. 961–969. 30
- [120] KIM, S. H., AND PITSCH, H. Conditional filtering method for large eddy simulation of turbulent nonpremixed combustion. *Phys. Fluids* 17, 10 (2005), 105103.1–105103.12. 96
- [121] KLIMENKO, A. Y. Multicomponent diffusion of various admixtures in turbulent flow. *Fluid Dynamics* 25, 3 (1990), 327 – 334. 96
- [122] KO, Y., AND ARPACI, V. Spark ignition of propane-air mixtures near the minimum ignition energy : Part ii. a model development. *Combust. Flame* 83 (1991), 88–105. 239
- [123] KOLMOGOROV, A. The local structure of turbulence in incompressible viscous fluid for very large reynolds numbers. *C.R. Acad. Sci. USSR* 30 (1941), 301. 86, 133

- [124] KRAVCHIK, T., AND SHER, E. Numerical modeling of spark ignition and flame initiation in a quiescent methane-air mixture. *Combust. Flame* 99 (1994), 635–643. 239
- [125] KUO, K. *Principles of Combustion*. John Wiley & Sons, New York, 1986. 53, 72
- [126] KURDYUMOV, V., BLASCO, J., SANCHEZ, A., AND LINAN, A. On the calculation of the minimum ignition energy. *Combust. Flame*, 136 (2004), 394–397. 239
- [127] KUROSE, R., DESJARDINS, O., NAKAMURA, M., AKAMATSU, F., AND PITSCH, H. Numerical simulations of spray flames. *Annual Research Briefs, 2004 : Center for Turbulence Research* (2005), 269–280. 35
- [128] LAURENT, F., AND MASSOT, M. Multi-fluid modelling of laminar polydisperse sprayflames : origin, assumptions and comparison of sectional and sampling methods. *Combust. Theory and Modelling* 5 (2001), 537–572. 58, 161
- [129] LAURENT, F., MASSOT, M., AND VILLEDIEU, P. Eulerian multi-fluid modeling for the numerical simulation of coalescence in polydisperse dense liquid sprays. *Journal of Computational Physics* (2004). 58, 161
- [130] LAX, P. D., AND WENDROFF, B. Systems of conservation laws. *Comm. Pure Appl. Math.* 13 (1960), 217–237. 115
- [131] LEFEBVRE, A. *Gas Turbines Combustion*. Taylor & Francis, 1999. 20, 21, 24, 25, 27, 34, 211
- [132] LÉGIER, J.-P. *Simulations numériques des instabilités de combustion dans les foyers aéronautiques*. Phd thesis, INP Toulouse, 2001. 97
- [133] LÉGIER, J.-P., POINSOT, T., AND VEYNANTE, D. Dynamically thickened flame large eddy simulation model for premixed and non-premixed turbulent combustion. In *Summer Program 2000* (Center for Turbulence Research, Stanford, USA, 2000), pp. 157–168. 96, 97, 101
- [134] LESIEUR, M. Recent approaches in large-eddy simulations of turbulence. In *New tools in turbulence modelling*, O. Métais and J. Ferziger, Eds. Les Editions de Physique - Springer Verlag, 1997, pp. 1 – 28. 88
- [135] LESIEUR, M., AND METAIS, O. New trends in large-eddy simulations of turbulence. *Ann. Rev. Fluid Mech.* 28 (1996), 45 – 82. 88
- [136] LI, S., VARATHARAJAN, B., AND WILLIAMS, F. Chemistry of JP-10 ignition. *AIAA Journal* 39, 12 (2001), 2351–2356. 107
- [137] LIN, T. H., LAW, C. K., AND CHUNG, S. H. Theory of laminar flame propagation in off-stoichiometric dilute sprays. *Int. J. Heat Mass Transfer* 31 (1988), 1023–1034. 160, 166
- [138] LIN, T. H., AND SHEU, Y. Y. Theory of laminar flame propagation in near-stoichiometric dilute sprays. *Int. J. Heat Mass Transfer* 84 (1991), 333–342. 160, 166
- [139] LUCCA-NEGRO, O., AND O'DOHERTY, T. Vortex breakdown : a review. *Prog. Energy Comb. Sci.* 27 (2001), 431–481. 209
- [140] MAAS, U., AND POPE, S. B. Simplifying chemical kinetics : intrinsic low-dimensional manifolds in composition space. *Combust. Flame* 88 (1992), 239 – 264. 110
- [141] MAHESH, K., CONSTANTINESCU, G., APTE, S., IACCARINO, G., HAM, F., AND MOIN, P. Progress towards large-eddy simulation of turbulent reacting and non-reacting flows in complex geometries. In *Annual Research Briefs*. Center for Turbulence Research, NASA Ames/Stanford Univ., 2002, pp. 115–142. 35, 56

BIBLIOGRAPHIE

- [142] MAHESH, K., CONSTANTINESCU, G., APTE, S., IACCARINO, G., HAM, F., AND MOIN, P. Large eddy simulation of reacting turbulent flows in complex geometries. In *ASME J. Appl. Mech.* (2006), vol. 73, pp. 374–381. 35, 96
- [143] MALY, R. Ignition model for spark discharges and the early phase of flame front growth. In *18th Symp. (Int.) on Combustion* (1981), The Combustion Institute, Pittsburgh, pp. 1747–1754. 239
- [144] MARCHISIO, D. L., AND FOX, R. O. Solution of population balance equations using the direct quadrature method of moments. *J. Aerosol Sci.* 36 (2005), 43–73. 59
- [145] MARTIN, C. *Etude énergétique des instabilités thermo-acoustiques et optimisation génétique des cinétiques réduites - TH/CFD/05/84*. PhD thesis, INP Toulouse, 2005. 106, 108
- [146] MARTIN, C., BENOIT, L., SOMMERER, Y., NICOUD, F., AND POINSOT, T. Les and acoustic analysis of combustion instability in a staged turbulent swirled combustor. *AIAA Journal* 44, 4 (2006), 741–750. 223
- [147] MARTINEZ, L. Vers la simulation des écoulements diphasiques denses en formulation Euler-Euler. Rapport de stage Mastère Mécanique des Fluides Numériques - ENSEEIHT WN/CFD/05/59, CERFACS, August 2005. 125
- [148] MASHAYEK, F. Direct numerical simulations of evaporating droplet dispersion in forced low mach number turbulence. *Int. J. Heat Mass Transfer* 41, 17 (1998), 2601–2617. 131, 152
- [149] MASHAYEK, F., AND PANDYA, R. Analytical description of particle/droplet-laden turbulent flows. *Prog. Energy Comb. Sci.* 29 (2003), 329–378. 56, 131
- [150] MATHEY, F., AND CHOLLET, J. Subgrid-scale model of scalar mixing for large eddy simulation of turbulent flows. In *Direct and Large Eddy Simulation II*, J. P. Chollet, P. R. Voke, and L. Kleiser, Eds. Kluwer Academic Publishers, 1997, pp. 103 – 114. 96
- [151] MATTINGLY, J. D. *Elements of gas turbine propulsion*, 2nd ed. AIAA, 2005. 17
- [152] MAXEY, M. The gravitational settling of aerosol particles in homogeneous turbulence and random flow fields. *J. Fluid Mech.* 174 (1987), 441–465. 147
- [153] MCMURTHY, P., MENON, S., AND KERSTEIN, A. A linear eddy subgrid model for turbulent reacting flows : application to hydrogen-air combustion. In *24th Symp. (Int.) on Combustion* (1992), The Combustion Institute, Pittsburgh, pp. 271 – 278. 96
- [154] MENDEZ, S. Numerical investigation of a turbulent flow around a multi-perforated plate. *submitted to J. Fluid Mech. in December 2006* (2007). 125
- [155] MENDEZ, S., ELDREDGE, J., NICOUD, F., POINSOT, T., SHOEBY, M., AND IACCARINO, G. Numerical investigation and preliminary modeling of a turbulent flow over a multi-perforated plate. In *Summer Program* (Center for Turbulence Research, NASA AMES, Stanford University, USA, 2006), pp. 57–72. 125
- [156] MENDEZ, S., AND NICOUD, F. Direct and large eddy simulation of a turbulent flow with effusion. In *ERCOTAC Workshop - DLES6* (Poitiers, France, 2005). 125
- [157] MENDEZ, S., AND NICOUD, F. Large-eddy simulations of a periodic turbulent flow over a perforated plate. In *1st Workshop INCA* (SNECMA, Villaroche, France, 2005), pp. 313–320. 125
- [158] MENDEZ, S., AND NICOUD, F. Les of a turbulent flow around a perforated plate. In *CY-LES* (Limassol, Cyprus, 2005). 125

- [159] MENEVEAU, C., AND POINSOT, T. Stretching and quenching of flamelets in premixed turbulent combustion. *Combust. Flame* 86 (1991), 311–332. 99
- [160] MENON, S., MCMURTHY, P., KERSTEIN, A., AND CHEN, J. Prediction of nox production in a turbulent hydrogen-air jet flame. *J. Prop. Power* 10 (1994), 161–168. 96
- [161] MENON, S., AND N., P. Subgrid modeling for simulation of spray combustion in large scale combustors. *AIAA Journal* 44, 709-723 (2006). 96, 240
- [162] MICHALEWICZ, Z., AND JANIKOW, C. Z. GENOCOP : a genetic algorithm for numerical optimization problems with linear constraints. *Commun. ACM* 39, 12es (December 1996), 175. 106
- [163] MICHOU, Y. *Étude expérimentale de flammes diphasiques turbulentes, partiellement prémélangées et prévaporisées d'un mélange pauvre heptane-air*. PhD thesis, Université d'Orléans, 2000. 36, 203
- [164] MICHOU, Y., PICHARD, C., AND GOKALP, I. Droplet size distribution and residence time effects on a lean partially-premixed turbulent spray flame. In *ICLASS* (2000), pp. 17–24. 36, 203
- [165] MIKAMI, M., YAMAMOTO, K., MORIUE, O., AND KOJIMA, N. Combustion of partially premixed spray jets. In *Proc. Combust. Inst.* (2005), vol. 30, Elsevier, pp. 2021–2028. 203
- [166] MILLER, R., AND BELLAN, J. Direct numerical simulation of a confined three-dimensional gas mixing layer with one evaporating hydrocarbon-droplet-laden stream. *J. Fluid Mech.* 384 (1999), 293–338. 131
- [167] MILLER, R. S., HARSTAD, K., AND BELLAN, J. Evaluation of equilibrium and non-equilibrium evaporation models for many-droplet gas-liquid flow simulations. *Int. J. Multiphase Flow* , 24 (1998), 1025–1055. 34, 71, 76, 77
- [168] MITANI, T. Propagation velocities of two-reactant flames. *Combust. Sci. Tech.* 21 (1980), 175. 166
- [169] MOIN, P. Large eddy simulation of multi-phase turbulent flows in realistic combustors. *Prog. Comput. Fluid Dynamics* 4 (2004), 237–240. 56
- [170] MOIN, P., AND APTE, S. V. Large-eddy simulation of realistic gas turbine combustors. *AIAA Journal* 44, 4 (2006), 698–708. 35, 96
- [171] MOREAU, M. *Modélisation numérique directe et des grandes échelles des écoulements turbulents gaz-particules dans le formalisme eulérien mésoscopique*. PhD thesis, INP Toulouse, 2006. 93
- [172] MOREAU, M., BEDAT, B., AND SIMONIN, O. A priori testing of subgrid stress models for euler-euler two-phase LES from euler-lagrange simulations of gas-particle turbulent flow. In *18th Ann. Conf. on Liquid Atomization and Spray Systems* (2005), ILASS Americas. 93
- [173] MOSSA, J.-B. *Extension polydisperse pour la description Euler-Euler des écoulements diphasiques réactifs - TH/CFD/05/74*. PhD thesis, INP Toulouse, 2005. 37, 38, 58, 59, 66, 156, 235, 269
- [174] MOUREAU, V. *Simulation aux grandes échelles de l'aérodynamique interne des moteurs à piston*. PhD thesis, Ecole Centrale Paris, 2004. 140, 141
- [175] MOUREAU, V., LARTIGUE, G., SOMMERER, Y., ANGELBERGER, C., COLIN, O., AND POINSOT, T. High-order methods for DNS and LES of compressible multi-component reacting flows on fixed and moving grids. *J. Comput. Phys.* 202, 2 (2005), 710–736. 124

BIBLIOGRAPHIE

- [176] NAKAMURA, M., AKAMATSU, F., KUROSE, R., AND KATSUKI, M. Combustion mechanism of liquid fuel spray in a gaseous flame. *Physics of Fluids* 17 (2005), 123301. 33
- [177] NICOUD, F., BAGGETT, J., MOIN, P., AND CABOT, W. New approximate boundary conditions for les. part 1 : Finding the answer via an optimal control strategy. In *APS/DFD meeting* (New York, 1999), vol. 44 of *Bull. Amer. Phys. Soc.* 87
- [178] NOMURA, H., UJIIE, Y., RATH, H. J., SATO, J., AND KONO, M. Experimental study on high-pressure droplet evaporation using microgravity conditions. In *26th Symp. (Int.) on Combustion* (1996), The Combustion Institute, Pittsburgh, pp. 1267–1273. 71
- [179] OKONG’O, N., AND BELLAN, J. A priori subgrid analysis of temporal mixing layers with evaporating droplets. *Phys. of Fluids* 12, 6 (2000), 1573–1591. 131
- [180] PANDYA, R., AND MASHAYEK, F. Two-fluid large-eddy simulation approach for particle-laden turbulent flows. *Int. J. Heat Mass Transfer* 45 (2002), 4753–4759. 56
- [181] PASCAUD, S. *Vers la simulation aux grandes échelles des écoulements turbulents diphasiques réactifs : application aux foyers aéronautiques*. PhD thesis, INP Toulouse, 2006. 37, 213, 223, 269
- [182] PASCAUD, S., BOILEAU, M., CUENOT, B., AND POINSOT, T. Large eddy simulation of turbulent spray combustion in aeronautical gas turbines. In *ECCOMAS Thematic Conference on computational combustion* (Lisbon, Portugal, 2005). 223
- [183] PASCAUD, S., BOILEAU, M., MARTINEZ, L., CUENOT, B., AND POINSOT, T. LES of steady spray flame and ignition sequences in aeronautical combustors. In *1st workshop INCA* (SNECMA, Villaroche, France, 2005), pp. 19–26. 223
- [184] PASSOT, T., AND POUQUET, A. Numerical simulation of compressible homogeneous flows in the turbulent regime. *J. Fluid Mech.* 181 (1987), 441 – 466. 137
- [185] PÉRA, C. *Simulation et modélisation de la dispersion turbulente, l’évaporation et la combustion d’écoulements diphasiques*. PhD thesis, INSA de Rouen, 2005. 35, 131
- [186] PETERS, N. Laminar diffusion flamelet models in non-premixed turbulent combustion. *Prog. Energy Comb. Sci.* 10 (1984), 319–339. 35
- [187] PETERS, N. The turbulent burning velocity for large-scale and small-scale turbulence. *J. Fluid Mech.* 384 (1999), 107 – 132. 95
- [188] PETERS, N. *Turbulent combustion*. Cambridge University Press, 2000. 35, 94
- [189] PICHARD, C. *Caractérisation expérimentale de l’atomisation et de la combustion d’un mélange diphasique partiellement prévaporisé et prémélangé*. PhD thesis, Université d’Orléans, 2003. 36
- [190] PICHARD, C., MICHOU, Y., CHAUVEAU, C., AND GOKALP, I. Average droplet vaporization rates in partially prevaporized turbulent spray flames. In *Proc. Combust. Inst.* (2002), vol. 29, pp. 527–533. 36, 203, 221, 271
- [191] PIERCE, C., AND MOIN, P. A dynamic model for subgrid scale variance and dissipation rate of a conserved scalar. *Phys. Fluids* 10, 12 (1998), 3041–3044. 96
- [192] PIERCE, C., AND MOIN, P. Progress-variable approach for large eddy simulation of non-premixed turbulent combustion. *J. Fluid Mech.* 504 (2004), 73–97. 35, 96

- [193] PISCHINGER, S., AND HEYWOOD, J. A model for flame kernel development in a spark-ignition engine. In *23rd Symp. (Int.) on Combustion* (1990), The Combustion Institute, Pittsburgh, pp. 1033–1040. 239
- [194] PITSCH, H. Large-Eddy Simulation of turbulent combustion. *Ann. Rev. Fluid Mech.* 38 (2006), 453–482. 37, 94, 240
- [195] POINSOT, T., ANGELBERGER, C., EGOLFOPOULOS, F., AND VEYNANTE, D. Large eddy simulations of combustion instabilities. In *1st Int. Symp. On Turbulence and Shear Flow Phenomena* (Santa Barbara, Sept 12-15., 1999), pp. 1–6. 124
- [196] POINSOT, T., AND LELE, S. Boundary conditions for direct simulations of compressible viscous flows. *J. Comput. Phys.* 101, 1 (1992), 104–129. 124
- [197] POINSOT, T., AND VEYNANTE, D. *Theoretical and numerical combustion*. R.T. Edwards, 2nd edition., 2005. 34, 51, 82, 84, 97, 98, 124, 164, 177, 189, 240
- [198] POPE, S. B. *Turbulent flows*. Cambridge University Press, 2000. 81
- [199] POZORSKY, J., APTE, S., AND RAMAN, V. Filtered particle tracking for dispersed two-phase turbulent flows. In *Proceedings of the Summer Program* (2004), Center for Turbulence Research, NASA Ames/Stanford Univ. 35
- [200] PRIÈRE, C. *Simulation aux grandes échelles : application au jet transverse*. PhD thesis, INP Toulouse, 2005. 137
- [201] REVEILLON, J., BRAY, K., AND VERVISCH, L. Dns study of spray vaporisation and turbulent micro-mixing, 1998. 131
- [202] RÉVEILLON, J., MASSOT, M., AND PERA, C. Analysis and modeling of the dispersion of vaporizing polydispersed sprays in turbulent flows. In *Proceedings of the Summer Program 2002 - Center for Turbulence Research* (2002). 131
- [203] RÉVEILLON, J., PERA, C., MASSOT, M., AND KNIKKER, R. Eulerian analysis of the dispersion of evaporating polydispersed sprays in a statistically stationary turbulent flow. *J. Turb.* 5, 1 (2004), 1–27. 131
- [204] RÉVEILLON, J., AND VERVISCH, L. Spray vaporisation in nonpremixed turbulent combustion modeling : A single droplet model. *Combust. Flame* 121 (2000), 75–90. 35, 131, 151
- [205] RÉVEILLON, J., AND VERVISCH, L. Analysis of weakly turbulent diluted-spray flames and spray combustion regimes. *J. Fluid Mech.* 537 (2005), 317–347. 30, 31, 33, 35, 161, 214, 218, 219
- [206] RIBER, E. *Développement de la méthode de simulation aux grandes échelles pour les écoulements diphasiques turbulents*. PhD thesis, INP Toulouse, 2007. 35, 37, 38, 59, 78, 132, 140, 141, 223, 269
- [207] RIBER, E., GARCIA., M., MOUREAU, V., PITSCH, H., SIMONIN, O., AND POINSOT, T. Evaluation of numerical strategies for les of two-phase reacting flows. In *Proc of the Summer Program* (2006), Center for Turbulence Research, NASA Ames/Stanford Univ., pp. 197–213. 35, 38, 59, 156, 214
- [208] RIBER, E., MOREAU, M., SIMONIN, O., AND CUENOT, B. Towards large eddy simulation of non-homogeneous particle laden turbulent gas flows using euler-euler approach. In *11th Workshop on Two-Phase Flow Predictions* (Merseburg, Germany, 2005). 35, 66, 93

BIBLIOGRAPHIE

- [209] RICHARD, S., COLIN, O., VERMOREL, O., BENKENIDA, A., ANGELBERGER, C., AND VEYNANTE, D. Towards large eddy simulation of combustion in spark ignition engines. *Proc. of the Combustion Institute 31*, 3059-3066 (2007). 95, 239
- [210] RICHARD, S., VERMOREL, O., AND VEYNANTE, D. Development of LES models based on the flame surface density approach for ignition and combustion in SI engines. In *ECCOMAS Thematic Conference on computational combustion* (2005), pp. 1–20. 95
- [211] RITMAN, D. Maîtriser les turbulents phénomènes de combustion. *La Recherche - Supplément : Les défis des supercalculateurs 408* (May 2007), 18–19. 240
- [212] ROUX, S. *Influence de la modélisation du mélange air/carburant et de l'étendue du domaine de calcul dans la simulation aux grandes échelles des instabilités de combustion. Application à des foyers aéronautiques*. PhD thesis, INP Toulouse, 2007 (en préparation). 109
- [213] ROUX, S., LARTIGUE, G., POINSOT, T., MEIER, U., AND BÉRAT, C. Studies of mean and unsteady flow in a swirled combustor using experiments, acoustic analysis and large eddy simulations. *Combust. Flame 141* (2005), 40–54. 37, 120, 223
- [214] RULLAUD, M. *Modélisation de la combustion turbulente via une méthode de tabulation de la cinétique chimique détaillée couplée à des fonctions de densités de probabilité. Application aux foyers aéronautiques*. PhD thesis, INSA de Rouen, 2004. 96
- [215] SAGAUT, P. *Introduction à la simulation des grandes échelles*, mathématiques & applications ed. Springer, 1998. 81, 87
- [216] SAGAUT, P. *Large Eddy Simulation for Incompressible Flows*. Springer, Berlin, 1998. 82
- [217] SANKARAN, V., AND MENON, S. LES of spray combustion in swirling flows. *J. Turb. 3* (2002), 011. 35
- [218] SAULNIER, C. Analyse théorique et simulation numérique d'une flamme monodimensionnelle laminaire diphasique. Rapport de stage - INP Toulouse WN/CFD/02/64, CERFACS, 2002. 166
- [219] SAZHIN, S. S. Advanced models of fuel droplet heating and evaporation. *Prog. Energy Comb. Sci. 32* (2006), 162–214. 34, 70, 71
- [220] SAZHIN, S. S., KRISTYADI, T., ABDELGHAFAR, W. A., AND HEIKAL, M. R. Models for fuel droplet heating and evaporation : Comparative analysis. *Fuel 85* (2006), 1613–1630. 34, 71
- [221] SCHIESTEL, R. *Les écoulements turbulents. Modelisation et simulation*. HERMES, 1998. 152
- [222] SCHILLER, L., AND NAUMAN, A. A drag coefficient correlation. *VDI Zeitung 77* (1935), 318–320. 69
- [223] SCHLUTER, J., APTE, S., KALITZIN, G., VD WEIDE, E., ALONSO, J., AND PITSCH, H. Large-scale integrated LES-RANS simulations of a gas turbine engine. In *Annual Research Briefs*. Center for Turbulence Research, NASA Ames/Stanford Univ., 2005, pp. 111–121. 240
- [224] SCHMITT, P. *Simulation aux grandes échelles de la combustion étagée dans les turbines à gaz et son interaction stabilité-polluants-thermique*. PhD thesis, Institut National Polytechnique de Toulouse, 2005. 124
- [225] SCHMITT, P., POINSOT, T., SCHUERMANS, B., AND GEIGLE, K. Large-eddy simulation and experimental study of heat transfer, nitric oxide emissions and combustion instability in a swirled turbulent high pressure burner. *J. Fluid Mech. 570* (2007), 17–46. 124, 223

- [226] SCHONFELD, T., AND POINSOT, T. Initial and boundary conditions for large eddy simulation of combustion instabilities. In *Annual Research Briefs*. Center for Turbulence Research, NASA Ames/Stanford Univ., 1999, pp. 73–84. 124
- [227] SELLE, L. *Simulation aux grandes échelles des interactions flamme-acoustique dans un écoulement vrillé*. PhD thesis, INP Toulouse, 2004. 97, 210
- [228] SELLE, L., BENOIT, L., POINSOT, T., NICOUD, F., AND KREBS, W. Joint use of compressible large-eddy simulation and helmoltz solvers for the analysis of rotating modes in an industrial swirled burner. *Combust. Flame* 145, 1-2 (2006), 194–205. 223
- [229] SELLE, L., LARTIGUE, G., POINSOT, T., KOCH, R., SCHILDMACHER, K.-U., KREBS, W., PRADE, B., KAUFMANN, P., AND VEYNANTE, D. Compressible large-eddy simulation of turbulent combustion in complex geometry on unstructured meshes. *Combust. Flame* 137, 4 (2004), 489–505. 37, 97, 120, 240
- [230] SENGISSEN, A. *Simulation aux grandes échelles des instabilités de combustion : vers le couplage fluide/structure - TH/CFD/06/12*. PhD thesis, Université de Montpellier II, 2006. 96
- [231] SENGISSEN, A., GIAUQUE, A., STAFFELBACH, G., PORTA, M., KREBS, W., KAUFMANN, P., AND POINSOT, T. Large eddy simulation of piloting effects on turbulent swirling flames. *Proc. of the Combustion Institute* 31 (2007), 1729–1736. 37, 120
- [232] SENGISSEN, A., VANKAMPEN, J. F., HULS, R., STOFFELS, G., KOK, J. B. W., AND POINSOT, T. LES and experimental studies of cold and reacting flows in a swirled partially premixed burner with and without fuel modulation. *Combust. Flame in press* (2007). 37, 96, 120
- [233] SHEPHERD, J. E., NUYT, C. D., AND LEE, J. J. Flash point and chemical composition of aviation kerosene (Jet A). Tech. rep., California institute of technology, May 2000. 105
- [234] SILVERMAN, I., GREENBERG, J. B., AND TAMBOUR, Y. Asymptotic analysis of premixed polydisperse spray flame. *SIAM J. Appl. Math.* 51 (1991), 1284–1303. 160, 161
- [235] SILVERMAN, I., GREENBERG, J. B., AND TAMBOUR, Y. Stoichiometry and polydispersity effects in premixed spray flames. *Combust. Flame* 93 (1993), 97–118. 160, 161
- [236] SIMONIN, O. Combustion and turbulence in two-phase flows. In *Lecture Series 1996-02* (1996), Von Karman Institute for Fluid Dynamics. 57, 79
- [237] SIMONIN, O., FEVRIER, P., AND LAVIEVILLE, J. On the spatial distribution of heavy particle velocities in turbulent flow : from continuous field to particulate chaos. *J. Turb.* 3 (2002). 58, 79
- [238] SIRIGNANO, W. A. *Fluid dynamics and transport of droplets and sprays*. Cambridge University Press, 1999. 65, 71
- [239] SLOANE, T. Energy requirements for spherical ignitions in methane-air mixtures at different equivalence ratios. *Combust. Sci. Tech.* 73 (1990), 351–365. 239
- [240] SLOANE, T. Ignition and flame propagation modeling with an improved propane oxidation mechanism. *Combust. Sci. Tech.* 83 (1992), 77–96. 239
- [241] SLOANE, T. Numerical simulation of electric spark ignition in methane-air mixtures at pressures above one atmosphere. *Combust. Sci. Tech.* 86 (1992), 121–133. 239
- [242] SLOANE, T., AND RONNEY, P. A comparison of ignition phenomena with detailed and simplified kinetics. *Combust. Sci. Tech.* 88 (1992), 1–13. 239

BIBLIOGRAPHIE

- [243] SMAGORINSKY, J. General circulation experiments with the primitive equations. i : The basic experiment. *Monthly Weather Review* 91(3) (1963), 99–165. 87, 93
- [244] SOMMERER, Y., GALLEY, D., POINSOT, T., DUCRUIX, S., LACAS, F., AND VEYNANTE, D. Large eddy simulation and experimental study of flashback and blow-off in a lean partially premixed swirled burner. *J. of Turbulence* 5 (2004). 240
- [245] SOMMERFELD, M., AND QIU, H. H. Detailed measurements in a swirling particulate two-phase flow by a phase-doppler anemometer. *Int. J. Heat Fluid Flow* 12, 1 (1991). 35, 38
- [246] SOMMERFELD, M., AND QIU, H. H. Experimental studies of spray evaporation in turbulent flow. *Int. J. Heat Fluid Flow* 19 (1998), 10–22. 35
- [247] SPALDING, D. B. The combustion of liquid fuels. In *4th Symp. (Int.) on Combustion* (1953), The Combustion Institute, Pittsburgh, pp. 847–864. 70
- [248] SPALDING, D. B. Experiments on the burning and extinction of liquid fuel spheres. *Fuel* 32 (1953), 169–185. 70
- [249] SQUIRES, K., AND EATON, J. Preferential concentration of particles by turbulence. *Phys. Fluids* 3, 5 (1991), 1169–1178. 147
- [250] STAFFELBACH, G., GICQUEL, L., AND POINSOT, T. Highly parallel large eddy simulation of multiburner configurations in industrial gas turbines. *The Cyprus International Symposium on Complex Effects in Large Eddy Simulation* (2005). 121, 123
- [251] STAFFELBACH, G., AND POINSOT, T. High performance computing for combustion applications. In *Super Computing 2006* (Tampa, Florida, USA, 2006). 40, 123
- [252] STRUIJS, R. *A multi-dimensional upwind discretization method for the Euler equation on structured grids*. PhD thesis, TU Delft, 1994. 124
- [253] STULL, D., AND PROPHET, H. Janaf thermochemical tables, 2nd edition. Tech. Rep. NSRDS-NBS 37, US National Bureau of Standards, 1971. 49
- [254] SUZUKI, T., AND CHIU, H. Multi droplet combustion on liquid propellants. In *Proceedings of the Ninth International Symposium on Space and Technology and Science* (1971), pp. 145–154. 30
- [255] THOBOIS, L. *Intérêt et faisabilité de la simulation aux grandes échelles dans les moteurs automobiles*. PhD thesis, INP Toulouse, 2006. 88, 120, 121
- [256] THOBOIS, L., LAUVERGNE, R., AND POINSOT, T. J. Massively parallel large eddy simulation of diesel engine intake ports. *Submitted to Flow Turb. and Combustion* (2006). 120, 121
- [257] TRUFFIN, K. *Simulation aux grandes échelles et identification acoustique des turbines à gaz en régime partiellement prémélangé*. PhD thesis, INP Toulouse, 2005. 96, 97, 109
- [258] TRUFFIN, K., AND POINSOT, T. Comparison and extension of methods for acoustic identification of burners. *Combust. Flame* 142, 4 (2005), 388–400. 223
- [259] VERSAEVEL, P. *Combustion laminaire diphasique : étude théorique et expérimentale*. PhD thesis, Ecole Centrale Paris, 1996. 76, 161, 185, 188, 198, 235
- [260] VERVISCH, L. Study and modelling of finite rate chemistry effects in turbulent non premixed flames. In *Annual Research Briefs*, C. f. T. Research, Ed. Center for Turbulence Research, NASA Ames/Stanford Univ., 1992, pp. 411–431. 96

-
- [261] VERVISCH, L., HAUGUEL, R., DOMINGO, P., AND RULLAUD, M. Three facets of turbulent combustion modelling : DNS of premixed V-flame, LES of lifted nonpremixed flame and RANS of jet flame. *J. Turb.* 5 (2004), 004. 96, 110
- [262] VERVISCH, L., LABEGORRE, B., AND RÉVEILLON, J. Hydrogen-sulphur oxy-flames analysis and single-step flame tabulated chemistry. *Fuel* 83, 4-5 (2004), 605–614. 109
- [263] VEYNANTE, D., AND VERVISCH, L. Turbulent combustion modeling. *Prog. Energy Comb. Sci.* 28 (2002), 193 – 266. 94
- [264] WANG, L.-P., AND MAXEY, M. R. Settling velocity and concentration distribution of heavy particles in homogeneous isotropic turbulence. *J. Fluid Mech.* 256 (1993), 27–68. 70
- [265] WANG, Q., AND SQUIRES, K. Large eddy simulation of particle-laden turbulent channel flow. *Phys. Fluids* 8, 5 (1996), 1207–1223. 35
- [266] WATANABE, H., KUROSE, R., HWANG, S., AND AKAMATSU, F. Characteristics of flamelets in spray flames formed in a laminar counterflow. *Combust. Flame* 148, 4 (2007), 234–248. 35
- [267] WELLER, H., TABOR, G., GOSMAN, A., AND FUREBY, C. Application of a flame-wrinkling LES combustion model to a turbulent mixing layer. In *27th Symp. (Int.) on Combustion* (1998), The Combustion Institute, Pittsburgh, pp. 899 – 907. 95
- [268] WIDMANN, J., AND PRESSER, C. A benchmark experimental database for multiphase combustion model input and validation. *Combustion and Flame* 129, 1 (2002), 47–86. 36, 203, 221, 271
- [269] WILLIAMS, F. *Combustion theory*. Benjamin Cummings, Menlo Park, CA, 1985. 97, 157, 182
- [270] WONG, S. C., AND LIN, A. R. Internal temperature distributions of droplets vaporizing in high-temperature convective flows. *J. Fluid Mech.* 237 (1992), 671–687. 71
- [271] YAO, G. F., ABDEL-KHALIL, S. I., AND GHIAASIAAN, S. M. An investigation of simple evaporation models used in spray simulations. In *ASME J. Heat Transfer* (2003), vol. 82, pp. 125–179. 70
- [272] YOSHIKAWA, A. Statistical theory for compressible turbulent shear flows, with the application to subgrid modeling. *Phys. Fluids* 29, 7 (1986), 2152–2164. 93
- [273] ZHU, M., AND ROGG, B. Modelling and simulation of sprays in laminar flames. *Meccanica* 31 (1996), 177–193. 161

BIBLIOGRAPHIE

Annexes

Annexe A

Bilan de masse et d'énergie dans la THI avec évaporation

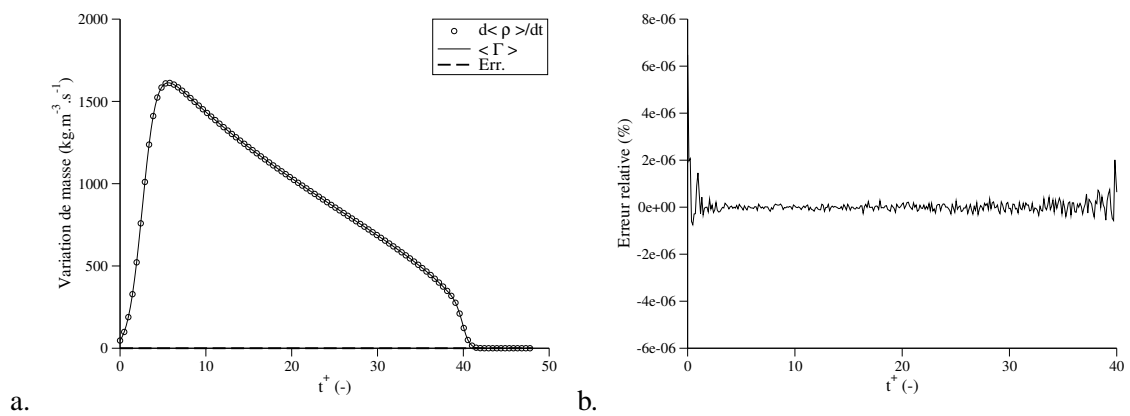


FIG. A.1 - Bilan instantané de masse totale gazeuse (a.) et erreur relative (b.)

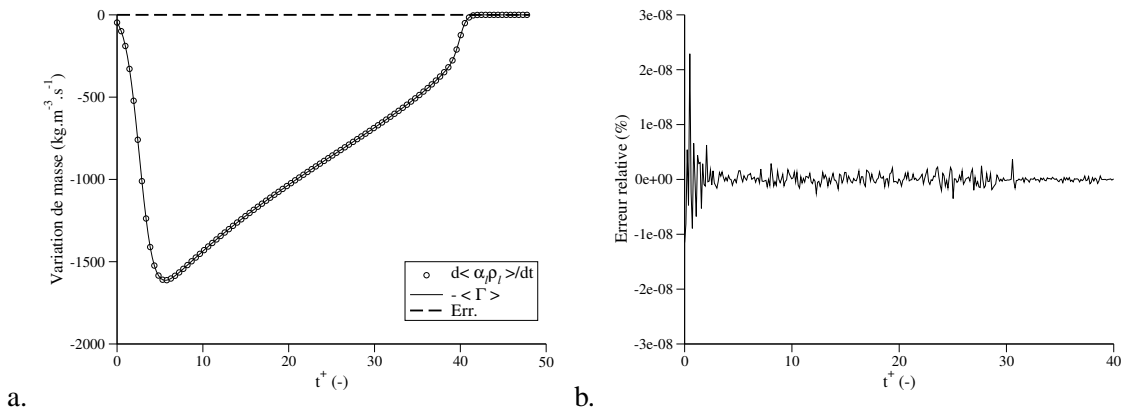


FIG. A.2 - Bilan instantané de masse liquide (a.) et erreur relative (b.)

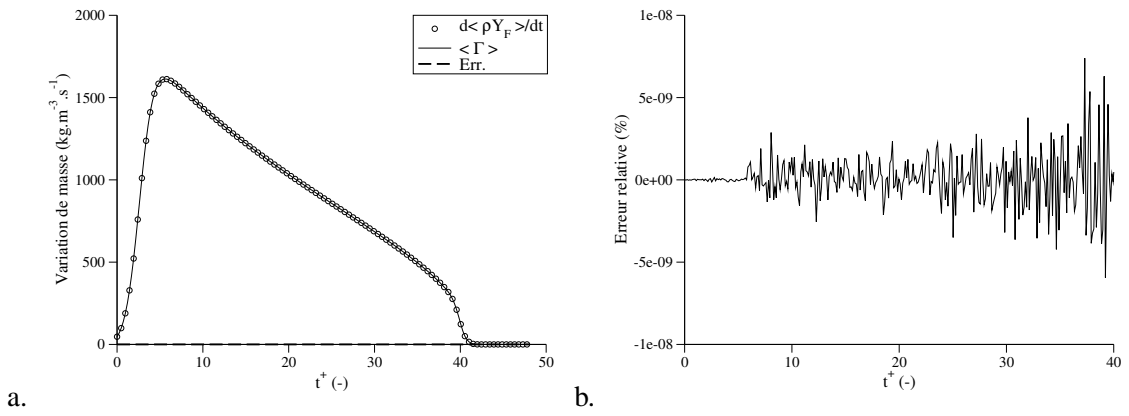


FIG. A.3 - Bilan instantané de masse de vapeur d'eau (a.) et erreur relative (b.)

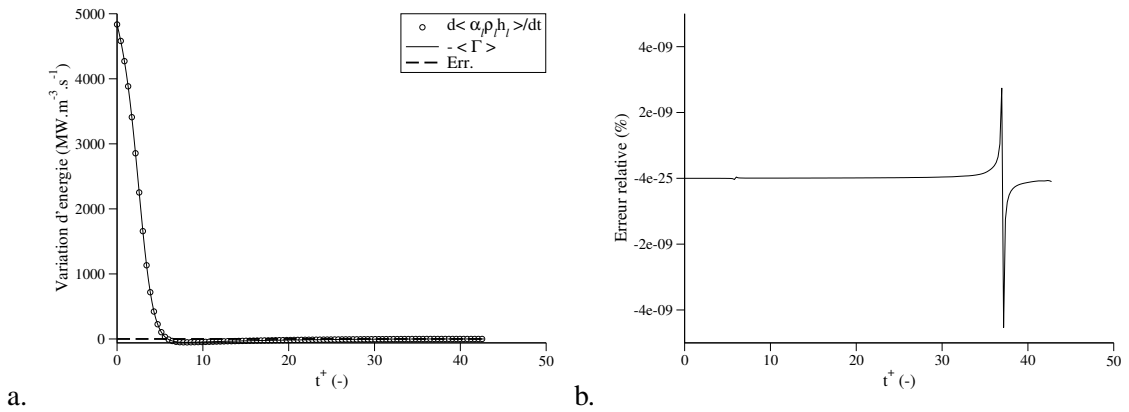


FIG. A.4 - Bilan instantané d'énergie liquide (a.) et erreur relative (b.)

Annexe B

Article soumis à *Flow, Turbulence and Combustion*

Investigation of two-fluid methods for Large Eddy Simulation of spray combustion in Gas Turbines

Boileau M.¹, Pascaud S.², Riber E.¹⁻³, Cuenot B.¹,
Gicquel L.Y.M.¹ and Poinsot T.J.³

June 29, 2007

¹*CERFACS, 42 avenue Gaspard Coriolis, 31057 Toulouse Cedex 01, France*

²*Now at TURBOMECA (Safran Group), Pau, France*

³*IMFT (UMR CNRS-INPT-UPS 5502), Toulouse, France*

Abstract

An extension of the Large Eddy Simulation (LES) technique to two-phase reacting flows, required to capture and predict the behavior of industrial burners, is presented.

While most efforts reported in the literature to construct LES solvers for two-phase flow focus on Euler-Lagrange formulation, the present work explores a different solution ('two-fluid' approach) where an Eulerian formulation is used for the liquid phase and coupled with the LES solver of the gas phase. The equations used for each phase and the coupling terms are presented before describing validation in two simple cases which gather some of the specificities of real combustion chamber: (1) a one-dimensional laminar JP10/air flame and (2) a non-reacting swirled flow where solid particles disperse [1]. After these validations, the LES tool is applied to a realistic aircraft combustion chamber to study both a steady flame regime and an ignition sequence by a spark. Results bring new insights into the physics of these complex flames and demonstrate the capabilities of two-fluid LES.

Keywords: Spray combustion, Turbulence, Large Eddy Simulation, Gas turbines.

1 Introduction

RANS (Reynolds Averaged Navier Stokes) equations are routinely solved to design combustion chambers, for both gaseous and liquid fuels. Recently, in order to provide better accuracy for the prediction of mean flows but also to give access to unsteady phenomena occurring in combustion devices (such as ignition, instabilities, flashback or quenching), Large-Eddy Simulation (LES) has been extended to reacting flows. As shown by the numerous examples published in the last years [2–12], this approach is very accurate in complex turbulent gaseous flows. This mainly results from the explicit and direct computation of the largest scale structures of the flow, which are the most difficult to model and contain a significant part of the physics controlling the flame.

However most LES calculations consider only gaseous flows and flames. The introduction of a dispersed liquid fuel raises two kinds of problems:

- The physics of a liquid fuel spray is very complex and is not yet fully understood [13]. The atomization process of a liquid fuel jet [14–18], the turbulent dispersion of the resulting droplets [19–23], their interaction with walls [24, 25], their evaporation and combustion [26] are phenomena occurring for LES at the subgrid scale and therefore requiring accurate modelling.
- The numerical implementation of two-phase flow in LES remains a challenge. The equations for both gaseous and dispersed phases must be solved together at each time step in a strongly coupled manner. This differs again from classical RANS where both phases can be solved in a weakly coupled procedure, bringing first the gas flow to convergence, then calculating the associated dispersed phase and iterating until convergence of both phases.

Attempts to extend RANS formulation to LES of two-phase combustion may be found in [7, 27–30]. They are all based on a Euler-Lagrange (EL) description of

the dispersed phase in which the flow is solved using an Eulerian method and the particles are tracked with a Lagrangian approach. An alternative is the Euler-Euler (EE) description, also called two-fluid approach, in which both the gas and the dispersed phases are solved using an Eulerian formulation.

In RANS codes, the weak numerical coupling of the phases makes the EL method well suited for gas turbine computations, but RANS with the EE approach may also be found for example in simulations of fluidized beds [31,32] or chemical reactors [33–35], two examples of two-phase flows with a high load of particles. The experience gained in the development of RANS has led to the conclusions that both approaches are useful and they are both found today in most commercial codes. Moreover, coupling strategies between EE and EL methods within the same application are considered for certain cases. In the framework of LES of gas turbines, it is interesting to compare again EL or EE formulations.

Following the individual trajectory of millions of droplets created by standard injectors implies computer resources that are still far beyond the capacities of computers available today and even in the coming years. To overcome this problem the stochastic Lagrangian approach is usually introduced, where each particle is only a "numerical" particle, representing in fact a statistically homogeneous group of real particles. This reduces the number of particles to compute but implies modelling for these parcels of particles [36]. Moreover in order to reach the accuracy required by LES, the stochastic Lagrangian approach must still involve an important number of particles that make it CPU time-consuming. Another difficult point is that the topology of the flow in dense zones (like near the injectors) differs from a cloud of droplets and a Lagrangian description is not adapted there. Finally the computer implementation of the EL approach is not well-suited to parallel computers: since two different solvers must be coupled, the complexity of the implementation on a parallel computer increases drastically compared to a single-phase code. Two

methods may be used for LES: (1) task parallelization in which certain processors compute the gas flow and others compute the droplets flow and (2) domain partitioning in which droplets are computed together with the gas flow on geometrical subdomains mapped on parallel processors. Droplets must then be exchanged between processors when leaving a subdomain to enter an adjacent domain. For LES, it is easy to show that only domain partitioning is efficient on large grids because task parallelization would require the communication of very large three-dimensional data sets at each iteration between all processors. However, codes based on domain partitioning are difficult to optimize on massively parallel architectures when droplets are clustered in one part of the domain (typically, near the fuel injectors). Moreover, the distribution of droplets may change during the computation: for a gas turbine re-ignition sequence, for example, the chamber is filled with droplets when the ignition begins thus ensuring an almost uniform droplet distribution; these droplets then evaporate rapidly during the computation, leaving droplets only in the near injector regions. To preserve a high parallel efficiency on thousands of processors, dynamic load-balancing strategies are required that re-decompose the domain during the computation itself [30].

The EE approach has the important advantage to be straightforward to implement in a numerical tool, and immediately efficient as it allows the use of the same parallel algorithm than for the gas phase [37]. However it requires an initial modelling effort much larger than in the EL method [38] and faces difficulties in handling droplet clouds with extended size distributions [39]. Moreover the resulting set of equations is numerically difficult to handle and requires special care [40].

Throughout this paper, two-phase flows will be treated like monodisperse sprays, an assumption which is not mandatory in EE methods but which makes their implementation easier. Results also suggest that in many flows (see for example section 4), this assumption is reasonable. Considering the lack of information on size

distribution at an atomizer outlet in a real gas turbine, this assumption might be a reasonable compromise in terms of complexity and efficiency: tracking multi-disperse sprays with precision makes sense only if the spray characteristics at the injection point are well known. In most cases, droplets are not yet formed close to the atomizer outlet anyway and even the Lagrange description faces difficulties there.

In the context of LES, a new modelling issue appears for two-phase flow simulations, either in the EL or EE formulation, and is linked to the subgrid scale model for the turbulent droplet dispersion. This problem has already been addressed in [41, 42] but is still an open question. However in the case of reacting flows, turbulent droplet dispersion occurs in a very limited zone between the atomizer and the flame and it is greatly influenced by the flame dynamics, therefore limiting the impact of the subgrid scale model.

The EE methodology in LES used throughout this work is taken from previous work [38, 40, 43, 44] where the validity and limitations have been discussed extensively, and it is not the purpose here to discuss further theoretical aspects. Despite the known limitations of such methodology, it is interesting to evaluate the potential and accuracy of the existing models when applied to realistic geometries and flows. This is the objective of the present paper, in the case of aeronautical gas turbines.

The framework and the basic equations for the EE description are first recalled in Section 2. The LES filtering procedure for these equations is described in Section 2.5 along with the closure assumptions and models for subgrid terms, including turbulent combustion. Simple validation cases are then presented: the laminar two-phase one-dimensional flame and the dispersion of particles in a turbulent swirled flow [1] are described in Section 3 and Section 4 respectively. The final application is a sector of a gas turbine burner for which both the steady flow and

an ignition sequence using a spark discharge are computed in Sections 5.2 and 5.3 respectively.

2 Equations

2.1 Carrier phase

The set of instantaneous conservation equations in a multi-species reacting gas can be written:

$$\frac{\partial \mathbf{w}}{\partial t} + \nabla \cdot \mathbf{F} = \mathbf{S}_c + \mathbf{S}_1 \quad (1)$$

where \mathbf{w} is the vector of the gaseous conservative variables $\mathbf{w} = (\rho u, \rho v, \rho w, \rho E, \rho_k)^T$ with respectively ρ , u , v , w , E , ρ_k the density, the three Cartesian components of the velocity vector $\mathbf{u} = (u, v, w)^T$, the total energy per unit mass defined by $E = \frac{1}{2} \mathbf{u} \cdot \mathbf{u} + E_i$ where E_i is the internal energy, and $\rho_k = \rho Y_k$ where Y_k is the mass fraction of species k . It is usual to decompose the flux tensor \mathbf{F} into an inviscid and a viscous component: $\mathbf{F} = \mathbf{F}(\mathbf{w})^I + \mathbf{F}(\mathbf{w}, \nabla \mathbf{w})^V$. The three spatial components of the inviscid flux tensor $\mathbf{F}(\mathbf{w})^I$ are:

$$\begin{pmatrix} \rho u^2 + P & \rho uv & \rho uw \\ \rho uv & \rho v^2 + P & \rho vw \\ \rho uw & \rho vw & \rho w^2 + P \\ (\rho E + P)u & (\rho E + P)v & (\rho E + P)w \\ \rho_k u & \rho_k v & \rho_k w \end{pmatrix} \quad (2)$$

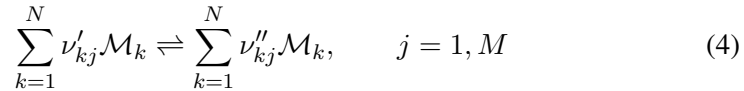
where the hydrostatic pressure P is given by the equation of state for a perfect gas: $P = \rho r T$, with the gas constant $r = \frac{R}{W} = \sum_{k=1}^N \frac{Y_k}{W_k} \mathcal{R}$ and $\mathcal{R} = 8.3143 \text{ J}/(\text{mol.K})$ the universal gas constant. The internal energy E_i is linked to the temperature through the heat capacity of the mixture calculated as $C_p = \sum_{k=1}^N Y_k C_{p,k}$.

The components of the viscous flux tensor $\mathbf{F}(\mathbf{w}, \nabla \mathbf{w})^V$ take the form:

$$\begin{pmatrix} -\tau_{xx} & -\tau_{xy} & -\tau_{xz} \\ -\tau_{xy} & -\tau_{yy} & -\tau_{yz} \\ -\tau_{xz} & -\tau_{yz} & -\tau_{zz} \\ -\mathbf{u} \cdot \boldsymbol{\tau} + q_x & -\mathbf{u} \cdot \boldsymbol{\tau} + q_y & -\mathbf{u} \cdot \boldsymbol{\tau} + q_z \\ J_{x,k} & J_{y,k} & J_{z,k} \end{pmatrix} \quad (3)$$

It is composed of the stress tensor $\boldsymbol{\tau} = 2\mu(S - 1/3 \delta_{ij} Tr(S))$ (momentum equations), the energy flux $\mathbf{u} \cdot \boldsymbol{\tau} + q$ (energy equation) and the diffusive flux J_k (species equations). In the stress tensor expression, $S = 1/2(\nabla \cdot \mathbf{u} + (\nabla \cdot \mathbf{u})^T)$ is the deformation matrix and μ is the dynamic viscosity following a classical power law. The diffusive flux of species k includes a correction velocity V^c that guarantees mass conservation, so that $J_k = -\rho \left(D_k \frac{W_k}{W} \nabla X_k - Y_k V^c \right)$ with $V^c = \sum_{k=1}^N D_k \frac{W_k}{W} \nabla X_k$, X_k being the molar fraction of species k . The mixture diffusion coefficient for species k is computed as $D_k = \frac{\mu}{\rho S_{c_k}}$ where the Schmidt number S_{c_k} is a constant. Finally the heat flux vector q follows a Fourier's law and includes an additional term due to heat transport by species diffusion: $q = -\lambda \nabla T + \sum_{k=1}^N J_k h_{s,k}$, where $\lambda = \mu C_p / Pr$ is the heat conduction coefficient of the mixture, with the Prandtl number Pr fixed at a constant value.

The chemical part of the source term \mathbf{S}_c on the right hand side of Eq. (1) adds a term to the energy equation ($\dot{\omega}_T$) and to the species equations ($\dot{\omega}_k$). Chemistry is described by M reactions involving the N reactants \mathcal{M}_k as follows:



The production/consumption rate $\dot{\omega}_k$ for species k is the sum of the reaction rates $\dot{\omega}_{kj}$ produced by all M reactions:

$$\dot{\omega}_k = \sum_{j=1}^M \dot{\omega}_{kj} = W_k \sum_{j=1}^M \nu_{kj} \mathcal{Q}_j \quad (5)$$

where $\nu_{kj} = \nu''_{kj} - \nu'_{kj}$ and \mathcal{Q}_j is the rate of progress of reaction j and is written:

$$\mathcal{Q}_j = K_{f,j} \prod_{k=1}^N \left(\frac{\rho Y_k}{W_k} \right)^{\nu'_{kj}} - K_{r,j} \prod_{k=1}^N \left(\frac{\rho Y_k}{W_k} \right)^{\nu''_{kj}} \quad (6)$$

The forward reaction rate follows an Arrhenius law: $K_{f,j} = A_{f,j} \exp\left(-\frac{E_{a,j}}{\mathcal{R}T}\right)$ where $A_{f,j}$ and $E_{a,j}$ are the pre-exponential factor and the activation energy. The reverse reaction rate is deduced from the equilibrium relation $K_{r,j} = K_{f,j}/K_{eq}$ where K_{eq} is the equilibrium constant.

The heat release is calculated from the species production/consumption rates as:

$$\dot{\omega}_T = - \sum_{k=1}^N \dot{\omega}_k \Delta h_{f,k}^0 \quad (7)$$

where $\Delta h_{f,k}^0$ is the formation enthalpy of species k .

The second part of the source term \mathbf{S}_1 is associated to the liquid phase through the drag force and the evaporation. It adds a vector I to the right hand side of the momentum equations, a heat transfer term Π on the energy equation and a mass transfer term Γ on the fuel equation (see Section 2.3).

2.2 Dispersed phase

Eulerian equations for the dispersed phase may be derived by several means. A popular and simple way consists in volume filtering of the separate, local, instantaneous phase equations accounting for the inter-facial jump conditions [45]. Such an averaging approach may be restrictive, because particle sizes and particle distances have to be smaller than the smallest length scale of the turbulence. Besides, it does not account for the Random Uncorrelated Motion (RUM), which measures the deviation of particles velocities compared to the local mean velocity of the dispersed phase [38] (see section 2.4). In the present study, a statistical approach analogous to kinetic theory [46] is used to construct a probability density function (pdf) $\check{f}_p(\mathbf{c}_p, \zeta_p, \mu_p, \mathbf{x}, t)$ which gives the local instantaneous probable number of

droplets with the given translation velocity $\mathbf{u}_p = \mathbf{c}_p$, the given mass $m_p = \mu_p$ and the given temperature $T_p = \zeta_p$. The resulting model leads to conservation equations having the same form than for the gas phase, for the particle number density \check{n}_l , the volume fraction $\check{\alpha}_l$, the correlated velocity \check{u}_l (see section 2.4) and the sensible enthalpy $\check{h}_{s,l}$ (supposed uniform in the droplet, so that in particular the interface temperature T_ζ is equal to the liquid temperature T_l). For a monodisperse spray, neglecting droplets interaction terms, the conservation equations read:

$$\frac{\partial}{\partial t} \check{n}_l + \frac{\partial}{\partial x_j} \check{n}_l \check{u}_{l,j} = 0 \quad (8)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} \rho_l \check{\alpha}_l + \frac{\partial}{\partial x_j} \rho_l \check{\alpha}_l \check{u}_{l,j} = -\Gamma \quad (9)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} \rho_l \check{\alpha}_l \check{u}_{l,i} + \frac{\partial}{\partial x_j} \rho_l \check{\alpha}_l \check{u}_{l,i} \check{u}_{l,j} = F_{d,i} - \check{u}_{l,i} \Gamma - \frac{\partial}{\partial x_j} \rho_l \check{\alpha}_l \delta \check{R}_{l,ij} \quad (10)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} \rho_l \check{\alpha}_l \check{h}_{s,l} + \frac{\partial}{\partial x_j} \rho_l \check{\alpha}_l \check{h}_{s,l} \check{u}_{l,j} = -(\Phi + \Gamma h_{s,F}(\check{T}_l)) \quad (11)$$

In these equations, the momentum and heat phase exchange source terms are split in two parts : $I = -F_d + \check{\mathbf{u}}_l \Gamma$ includes both the drag force and a momentum transfer due to the mass transfer, and $\Pi = \Phi + \Gamma h_{s,F}(\check{T}_l)$, where $h_{s,F}(\check{T}_l)$ is the fuel vapor enthalpy taken at the interface temperature T_l , includes conduction and heat transfer linked to the mass transfer. The tensor $\delta \check{R}_{l,ij}$ corresponds to the random uncorrelated motion (RUM) and is explained in section 2.4.

Note that without source terms (i.e. without evaporation, drag and RUM) the momentum equation Eq. 10 is similar to the Burger's equation, known to create shock-like velocity gradients and therefore difficult to handle numerically. The absence of an isotropic pressure-like force can also lead to very high droplet number density gradients. Without the use of shock-capturing numerical schemes it is necessary to add stabilisation terms to this equation. This is explained in section 2.6.

The resulting set of equations Eqs. 8 to 11 is equivalent to the lagrangian description of the dispersed phase (without collision terms and for monodisperse

sprays) and leads to the same solutions, as shown in [47].

2.3 Phase exchange source terms

Mass transfer between the gas and the liquid phases is linked to evaporation, which follows the classical Spalding model [48]. Assuming that the dispersed phase is composed of spherical droplets of pure fuel (denoted with the subscript F), the evaporation rate may be written as :

$$\Gamma = \pi \check{n}_l d Sh(\rho D_F) \ln(1 + B_M) \quad (12)$$

where d is the droplet diameter, D_F is the fuel vapor diffusivity and Sh is the Sherwood number that takes into account convective and turbulent effects. A commonly used expression for this number is $Sh = 2.0 + 0.55 Re_d^{1/2} Sc_F^{1/3}$ where $Re_p = d|\mathbf{u} - \check{\mathbf{u}}_l|/\nu$ is the particle Reynolds number and Sc_F is the fuel vapor Schmidt number. In this definition ν is the carrier phase kinematic viscosity. In Eq. (12), one important parameter is the Spalding number $B_M = (Y_{F,\zeta} - Y_F)/(1 - Y_{F,\zeta})$ where $Y_{F,\zeta}$ is the fuel mass fraction at the droplet surface, calculated from the fuel vapor partial pressure at the interface $p_{F,\zeta}$ which is evaluated from the Clausius-Clapeyron relation:

$$p_{F,\zeta} = p_{cc} \exp\left(\frac{W_F L_v}{\mathcal{R}} \left(\frac{1}{T_{cc}} - \frac{1}{T_l}\right)\right) \quad (13)$$

The reference pressure and temperature p_{cc} and T_{cc} correspond to the saturation conditions, and L_v is the latent heat of vaporisation.

The drag force is expressed as:

$$F_d = \frac{\rho_l \check{\alpha}_l}{\tau_p} (u_i - \check{u}_{l,i}) \quad (14)$$

introducing the particle relaxation time τ_p :

$$\tau_p = \frac{4\rho_l d^2}{3\rho\nu C_d Re_d} \quad (15)$$

itself based on the drag coefficient C_d , which is 0.44 for Re_d greater than 1000 and is defined by $C_d = \frac{24}{Re_d}(1 + 0.15 Re_d^{0.687})$ otherwise.

Finally, the conductive flux Φ through the interface is calculated as $\Phi = \pi \check{n}_l d \lambda Nu(\check{T}_l - T)$. In this expression, λ is the carrier phase conductivity and Nu is the Nusselt number usually expressed similarly to the Sherwood number: $Nu = 2.0 + 0.55 Re_d^{1/2} Pr^{1/3}$.

2.4 The Random Uncorrelated Motion (RUM)

The averaging operation for the liquid droplet velocity described in the previous section introduces a particle velocity deviation from the mean (or correlated) velocity, noted $u_p'' = u_p - \check{u}_l$, and named the random uncorrelated velocity [38]. By definition the statistical average (based on the particle probability density function) of this uncorrelated velocity is zero: $\langle u_p'' \rangle = 0$. A conservation equation can be written for the associated kinetic energy $\delta\check{\theta}_l = \langle u_{p,i}'' u_{p,i}'' \rangle / 2$:

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} \rho_l \check{\alpha}_l \delta\check{\theta}_l + \frac{\partial}{\partial x_j} \rho_l \check{\alpha}_l \check{u}_{l,j} \delta\check{\theta}_l &= -\frac{1}{2} \frac{\partial}{\partial x_j} \rho_l \check{\alpha}_l \delta\check{S}_{l,ij} - \frac{2 \check{n}_l}{\tau_p} \delta\check{\theta}_l \\ &- \rho_l \check{\alpha}_l \delta\check{R}_{l,ij} \frac{\partial \check{u}_{l,i}}{\partial x_j} - \Gamma \delta\check{\theta}_l \end{aligned} \quad (16)$$

where unclosed terms $\delta\check{R}_{l,ij}$ and $\delta\check{S}_l$ (called here RUM terms) appear. However the modelling of these terms as proposed for example in [47, 49, 50] is not yet satisfactory and it is still an open and difficult question. In [47, 50] it has been shown that in a configuration representative of industrial flows, the RUM is not essential to capture the mean fields (velocity and mass flux) of the liquid phase, but only influences the particle turbulent agitation. It has been therefore omitted in the applications presented later in the paper.

2.5 LES approach

The two sets of conservative equations defined by Eq. (1) and Eqs. (8)-(11) describe turbulent reacting two-phase flows that require a high grid resolution in order to solve from the smallest to the largest scales. In LES only the largest scales are computed while the smallest scales are modelled. A spatially localized time independent filter of given size, Δ , is applied to a single realization of the flow.

The filtered quantity \bar{f} is resolved in the numerical simulation whereas $f' = f - \bar{f}$ is the subgrid scale part due to the unresolved flow motion. For variable density ρ , a mass-weighted Favre filtering is introduced so that:

$$\bar{\rho} \tilde{f} = \overline{\rho f} \quad (17)$$

The balance equations for gas phase LES are obtained by filtering the instantaneous balance equation (1):

$$\frac{\partial \bar{\mathbf{w}}}{\partial t} + \nabla \cdot \bar{\mathbf{F}} = \bar{\mathbf{S}}_c + \bar{\mathbf{S}}_l \quad (18)$$

where the filtered flux tensor $\bar{\mathbf{F}}$ can be divided in three parts: the inviscid part $\bar{\mathbf{F}}^I$, the viscous part $\bar{\mathbf{F}}^V$ and the subgrid scale turbulent part $\bar{\mathbf{F}}^t$. The three spatial components of the inviscid and viscous flux tensor use expressions similar to Eqs. 2 and 3, based on filtered quantities. The subgrid-scale turbulent flux $\bar{\mathbf{F}}^t = \bar{\boldsymbol{\tau}}^t$ is a new term introduced by the LES approach and is modelled through the turbulent viscosity concept:

$$\bar{\boldsymbol{\tau}}^t = -\bar{\rho}(\widetilde{\mathbf{u} : \mathbf{u}} - \tilde{\mathbf{u}} : \tilde{\mathbf{u}}) = 2 \bar{\rho} \nu_t (\tilde{S} - \frac{1}{3} \delta_{ij} Tr(\tilde{S})) \quad (19)$$

The turbulent viscosity ν_t is determined using the WALE model [51], similar to the Smagorinsky model, but with an improved behavior near solid boundaries. Similarly, a subgrid-scale diffusive flux vector for species $\bar{J}_k^t = \bar{\rho}(\widetilde{\mathbf{u} Y_k} - \tilde{\mathbf{u}} \tilde{Y}_k)$ and a subgrid-scale heat flux vector $\bar{q}^t = \bar{\rho}(\widetilde{\mathbf{u} E} - \tilde{\mathbf{u}} \tilde{E})$ appear and are modelled following the same expressions as in section 2, using filtered quantities and introducing a

turbulent diffusivity $D_k^t = \nu_t / Sc_k^t$ and a thermal diffusivity $\lambda_t = \mu_t \overline{C_p} / Pr^t$. The turbulent Schmidt and Prandtl numbers are fixed to 1 and 0.9 respectively.

In turbulent reacting cases the Dynamically Thickened Flame model [52–55] is used, where a thickening factor F is introduced to thicken the flame front and the efficiency function \mathcal{E} developed by Colin *et al.* [4] is used to account for subgrid scale wrinkling.

For the dispersed phase, filtered conservative variables and equations are built with the same methodology as for the carrier phase and similarly a particle subgrid stress tensor $\overline{\tau}_{l,ij}^t$ appears :

$$\overline{\tau}_{l,ij}^t = -\bar{n}_l (u_{l,i} \widehat{u}_{l,j} - \hat{u}_{l,i} \hat{u}_{l,j}) \quad (20)$$

where the Favre filtered quantities \hat{f}_l are defined as $\bar{n}_l \hat{f}_l = \overline{\check{n}_l \check{f}_l}$. By analogy to compressible single phase flows [56, 57], Riber *et al.* propose a viscosity model for the SGS tensor $T_{l,ij}$ [44]. The trace-free SGS tensor is modeled using a viscosity assumption (compressible Smagorinsky model), while the subgrid energy is parametrized by a Yoshizawa model [58] :

$$\overline{\tau}_{l,ij}^t = C_{S,l} 2\Delta^2 \bar{n}_l |\hat{S}_l| (\hat{S}_{l,ij} - \frac{\delta_{ij}}{3} \hat{S}_{l,kk}) - C_{V,l} 2\Delta^2 \bar{n}_l |\hat{S}_l|^2 \delta_{ij} \quad (21)$$

where \hat{S}_l is the filtered particle strain rate tensor, of norm $|\hat{S}_l|^2 = 2\hat{S}_{l,ij}\hat{S}_{l,ij}$. The model constants have been evaluated in *a priori* tests [59] leading to the values $C_{S,l} = 0.02$, $C_{V,l} = 0.012$. The final set of equations for the gaseous and the dispersed phases is summarized in Table 1.

see page 15

2.6 Numerical Approach

The solver used for this study is a parallel fully compressible code for turbulent reacting two-phase flows, on both structured and unstructured grids. The fully explicit finite volume solver uses a cell-vertex discretisation with a Lax-Wendroff centred numerical scheme [60] or a third order in space and time scheme named

Gas velocity	$\frac{\partial \bar{\rho} \tilde{u}_i}{\partial t} + \frac{\partial \bar{\rho} \tilde{u}_i \tilde{u}_j}{\partial x_j} = -\frac{\partial \bar{P}}{\partial x_i} + \frac{\partial \tilde{\tau}_{ij} + \tau_{ij}^t}{\partial x_j} - F_{d,i} + \hat{u}_{l,i} \Gamma$
Mass fractions	$\frac{\partial \bar{\rho} \tilde{Y}_k}{\partial t} + \frac{\partial \bar{\rho} \tilde{u}_j \tilde{Y}_k}{\partial x_j} = -\frac{\partial \tilde{J}_k + J_k^t}{\partial x_j} + \dot{\omega}_k^t + \delta_{kF} \Gamma, \text{ for } k = 1, N$
Gas total energy (non chemical)	$\frac{\partial \bar{\rho} \tilde{E}}{\partial t} + \frac{\partial \bar{\rho} \tilde{u}_j \tilde{E}}{\partial x_j} = \frac{\partial (\tilde{\tau}_{ij} + \tau_{ij}^t) \tilde{u}_i}{\partial x_j} - \frac{\partial \tilde{q}_j + q_j^t}{\partial x_i} + \Phi + \tilde{u}_i (-F_{d,i} + \hat{u}_{l,i} \Gamma) + \dot{\omega}_T^t$
Number density	$\frac{\partial \bar{n}_l}{\partial t} + \frac{\partial \hat{u}_{l,j} \bar{n}_l}{\partial x_j} = 0$
Liquid volume fraction	$\frac{\partial \rho_l \bar{\alpha}_l}{\partial t} + \frac{\partial \hat{u}_{l,j} \rho_l \bar{\alpha}_l}{\partial x_j} = -\Gamma$
Liquid velocity	$\frac{\partial \rho_l \bar{\alpha}_l \hat{u}_{l,i}}{\partial t} + \frac{\partial \rho_l \bar{\alpha}_l \hat{u}_{l,i} \hat{u}_{l,j}}{\partial x_j} = F_{d,i} - \hat{u}_{l,i} \Gamma + \frac{\partial \bar{\tau}_{l,ij}^t}{\partial x_j}$
Enthalpy	$\frac{\partial \rho_l \bar{\alpha}_l \hat{h}_{s,l}}{\partial t} + \frac{\partial \rho_l \bar{\alpha}_l \hat{u}_{l,i} \hat{h}_{s,l}}{\partial x_j} = -(\Phi + \Gamma h_{s,F}(\check{T}_l))$

Table 1: Set of (6+N) conservation equations, where N is the number of chemical species.

TTGC [61]. Characteristic boundary conditions NSCBC [10, 62] are used for the gas phase. Boundary conditions are easier for the dispersed phase, except for solid walls where particles may bounce off. In the present study it is simply supposed that the particles stick to the wall, with either a slip or zero velocity.

As pointed out in section 2, high velocity and number density gradients may appear, and are difficult to handle with centered schemes. However the simulations presented in this paper run smoothly thanks to at least four reasons:

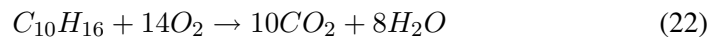
- (1) In the different cases, RUM is not so strong anyway because the small droplets tend to align with the gas flow and the light load avoids particle-particle and particle-wall interactions, that are the main sources of RUM.
- (2) In the combustion chamber application, evaporation reduces the numerical stiffness of the problem as it decreases even more the droplet size and the load.
- (3) The simulations are all run in the LES framework, i.e. calculating filtered (and by definition smoothed) quantities and introducing sub-grid scale turbulent viscosities.

(4) As is classical with centered schemes, artificial viscosity is used. This is done with great care to preserve accuracy, applying it very locally (using specific sensors) and with the minimum level of viscosity [40].

3 One-dimensional laminar two-phase flame

As the final application is combustion chambers, it is crucial to check that the model correctly handles flames. In this context, the one-dimensional two-phase flame burning liquid fuel (Fig. 1) is a classical and mandatory test case. Depending on inlet conditions, two different cases are possible: either the evaporation and reaction zones are separated (homogeneous flame), or they are overlapping (heterogeneous flame) [63, 64]. In the present case and for validation purposes only homogeneous flames are considered. This means that in a steady configuration, the flame must be located at a distance D from the injection allowing complete evaporation, i.e. $D \geq D_c = s_l t_{evap}$ where t_{evap} is the evaporation time that may be estimated from the d^2 -law for evaporation. see page 17

Following [63, 64], if the evaporation and combustion zones are separated, it is possible to build an analytical solution that will serve as a reference. The derivation assumes a constant Spalding number B , a constant and uniform liquid temperature T_l in the droplets, the same velocity u for both phases, a constant pressure P , and constant C_p , λ and ρD_F . For this validation case, the fuel is JP10 ($C_{10}H_{16}$), a kerosene surrogate, which is modelled using a simple one-step chemical scheme:



The chemical model follows an Arrhenius law with a pre-exponential factor $A = 6.454 \cdot 10^{13}$ cgs and the activation energy $E_a = 29189$ cal/mol. These coefficients have been adjusted with a genetic algorithm [65] starting from a reduced chemistry [66], to fit flame speed and thickness for lean premixed flames at atmospheric

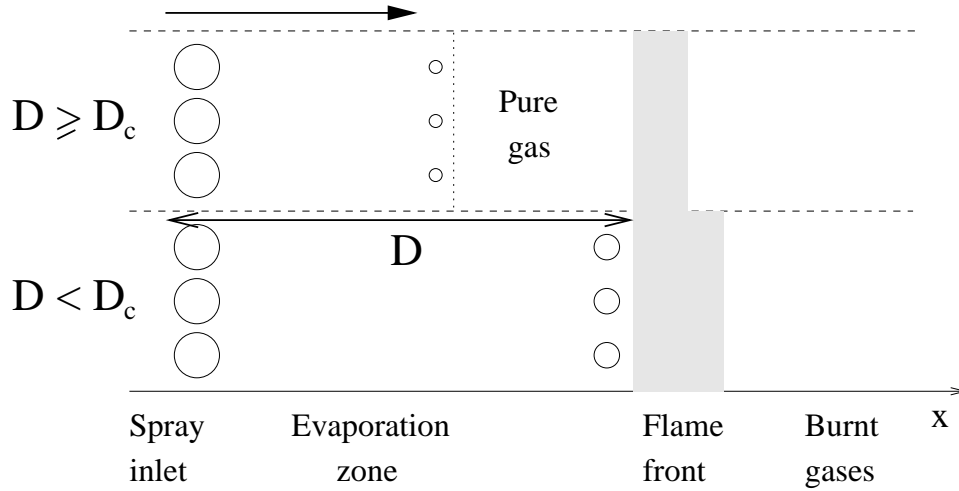


Figure 1: Sketch of the 1D-flame test case: top - homogeneous flame, bottom - heterogeneous flame.

pressure. Fig. 2 shows how this scheme performs compared to a full chemical scheme for JP10 for lean mixtures. *see page 18*

In the two-phase flame, pure liquid fuel is injected with a droplet diameter of $d = 20 \mu m$ and a volume fraction of $\alpha_l = 4.867 \cdot 10^{-5}$, corresponding to a stoichiometric ratio of $\phi = 0.7$. For this value of ϕ the flame speed of the JP10 flame is 0.49 m/s. The evaporation time being of the order of 6.67 ms, the flame must be initially placed at a minimal distance of 3.38 mm from the injection point in order to stay homogeneous.

Fig. 3 and 4 show a comparison of the computed flame and the reference solution for the liquid volume fraction and the droplet diameter, as well as mass and heat exchange terms. The agreement between the two solutions is very good. Only a slight difference is observed in the evaporation zone, as the reference solution is calculated with a constant liquid temperature whereas a variable liquid temperature is computed in the LES code. *pages 18,19*

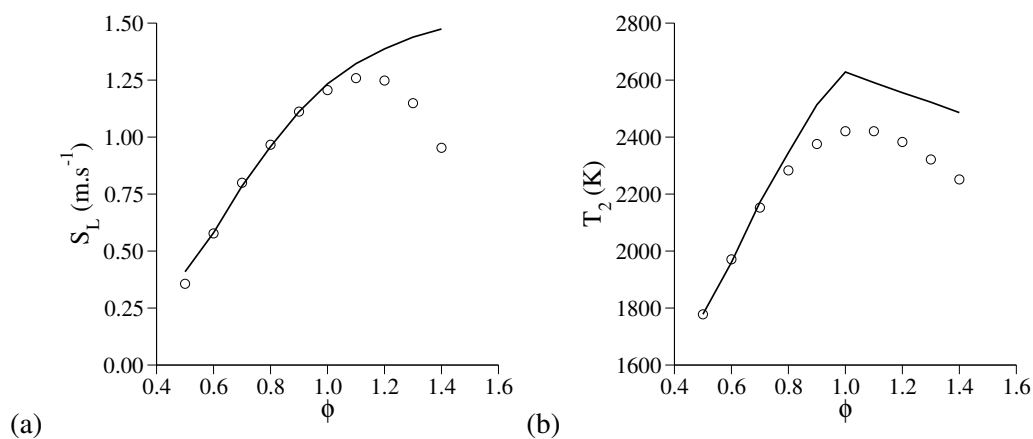


Figure 2: Flame speed and maximum flame temperature obtained with the one-step chemistry (lines) and compared with the reference complex chemistry curves (circles).

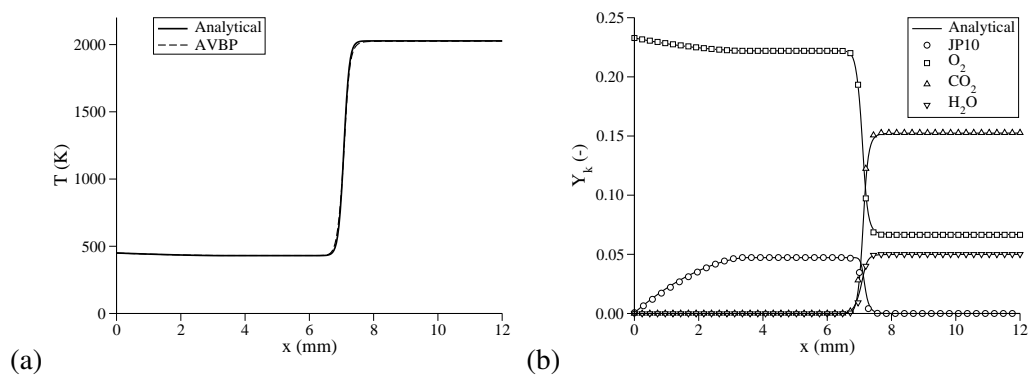


Figure 3: One-dimensional two-phase flame: comparison between the analytical solution and the calculation. (a) Gas temperature (b) Mass fractions.

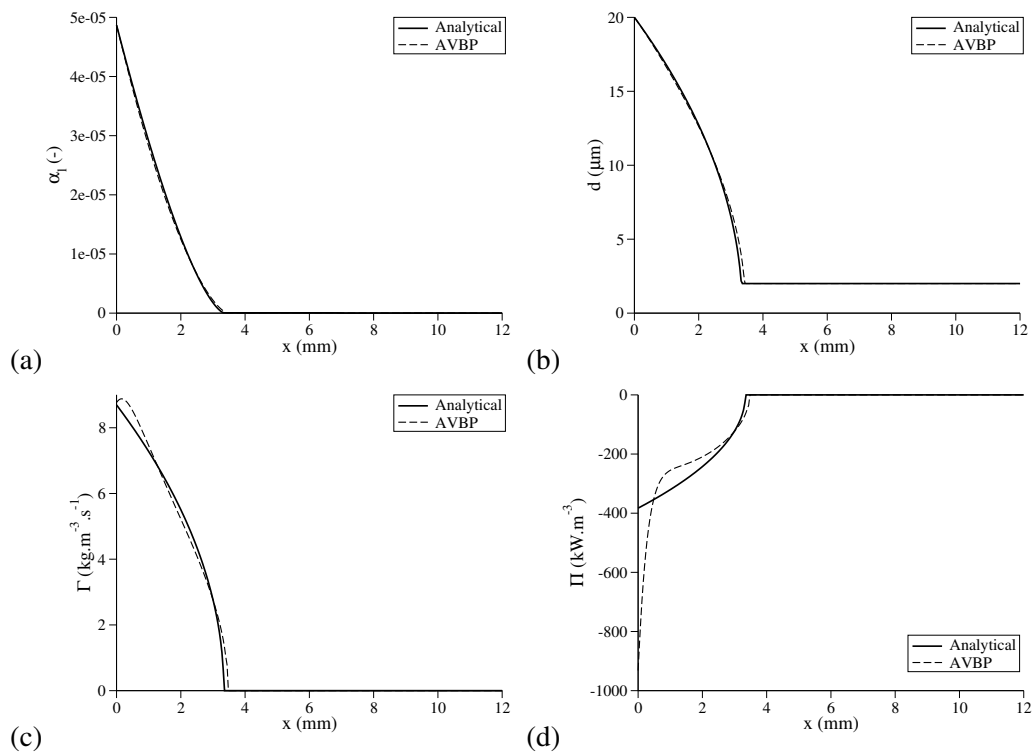


Figure 4: One-dimensional two-phase flame: comparison between the analytical solution and the calculation. (a) Liquid volume fraction (b) Diameter (c) Mass transfer (d) Heat transfer

4 Turbulent dispersion

A second validation is related to turbulent dispersion of the particles. Many experiments on turbulent dispersion of particles are reported in the literature, but only a few give enough detailed results to be used for comparison with LES and validation of the numerical method [67–69]. In the present work the experiment of Sommerfeld and Qiu [1] has been chosen as it is a well-known test case for two-phase-flows and provides a significant amount of data. This configuration has already been simulated with the EL approach on a refined mesh by Apte [70]. Our objective is to evaluate the performance of the EE approach and the associated models in the framework of LES with coarser grids.

The configuration (Fig. 5) is a simple pipe, with a swirling co-axial injection. *see page 21*
 The Plexiglas tube is 1.5 m long with an inner diameter of 194 mm. Dust particles are injected through the primary flow (inner pipe of the injector), with a mean diameter of 45 μm and a size spectrum between 15-80 μm . The secondary annular flow is swirled with a swirl number of 0.47 (calculated as the ratio of the axial flux of angular momentum to the axial flux of linear momentum, integrated over the injector section), resulting in a central annular recirculation zone. Particle size and velocity as well as particle size-velocity correlations were measured at several cross-sections using PDA. Although a polydisperse particle distribution was used in the experiment, monodisperse results are available using size-conditioned averages. The Euler-Euler simulation is performed for particles of 45 μm and compared to the same class of droplets used in the experiment. As for the dilute flows in gas turbines, particle-particle interactions and two-way coupling are negligible in this experiment so that statistics obtained for a single class can be compared to experimental data. Table 2 summarizes flow conditions and particle properties. *see page 21*

The simulation domain (Fig. 5) includes a portion of the inlet pipes (length *see page 21* 50 cm), the full test section and the stagnation chamber. The mesh (Fig. 5) contains *see page 21*

<i>Air flow</i>	
Mass flow rate of the primary jet (g/s)	9.9
Mass flow rate of the secondary jet (g/s)	38.3
Temperature (K)	300
<i>Particles</i>	
Mass flow rate (g/s)	0.34
Mass loading	0.034
Temperature (K)	300
Size distribution (μm)	15-80

Table 2: Flow conditions for the Sommerfeld configuration.

753,000 nodes, corresponding to 4,114,000 cells. It has a smallest cell size of 0.5 *mm* and is refined in the near-injector region. This leads to a CPU cost of 15 hours on a Compaq AlphaServer with 55 processors, for 40 ms of simulated physical time. The simulation uses a Smagorinsky sub-grid scale model for the gas and the model of Moreau [59] for the liquid. At the pipe inlet, fluctuating turbulent velocities are prescribed on both the gas and the liquid phases [47] to reproduce the inlet turbulence levels measured in the experiment.

Fig. 6 gives a global view of an instantaneous two-phase flow solution. The opening of the jet is clearly visible as well as the recirculation zone for both phases. After injection, the droplets travel first at the same velocity as the gas, but are trapped by the recirculation zone around the stagnation region. In this zone the droplets accumulate and the number density increases strongly. *see page 22*

Figs. 7 and 8 show the gaseous mean velocity components (axial and tangential) and Figs. 9 and 10 show their RMS values, at different axial positions. The agreement between the simulation results and the measurements is very good, for *see page 23* *see page 24*

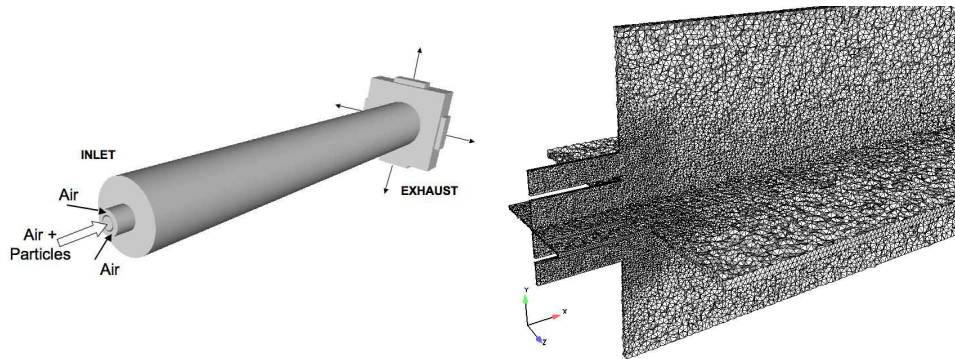


Figure 5: Computational domain and mesh of the Sommerfeld configuration.

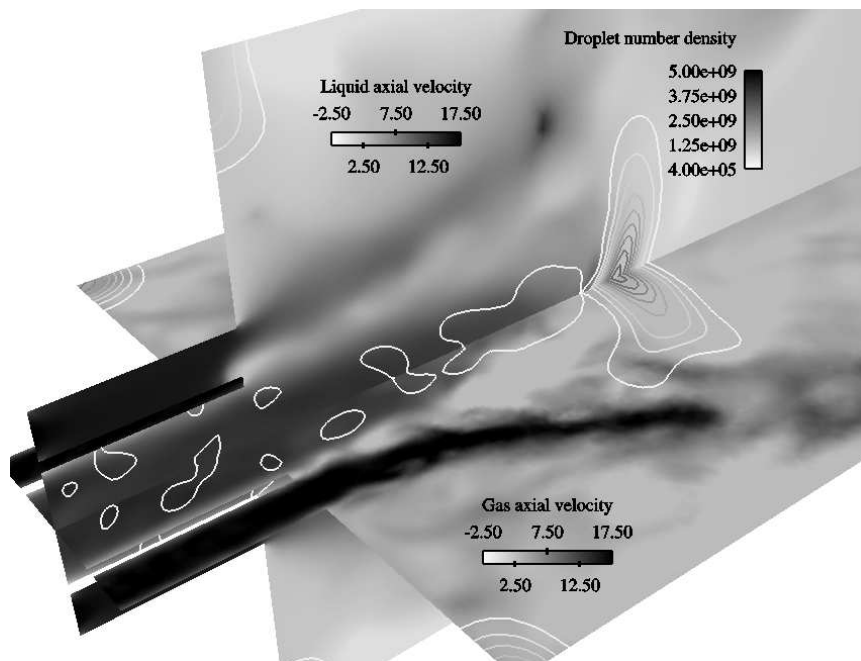


Figure 6: View of the instantaneous two-phase flow in the Sommerfeld configuration: vertical plane: liquid axial velocity; horizontal plane: gas axial velocity; isolines: droplet number density.

both mean and fluctuating values, and up to the plane located furthest downstream. In particular the location and thickness of the shear layer are well reproduced by

the simulation, both features that are known to be difficult to predict and demonstrate the quality of the present calculation. The recirculation zone is also well captured, at the correct location around 100 *mm* downstream the injector nozzle. This is confirmed by the results on fluctuating velocities, showing that not only the level but also the shape of the profiles are well captured.

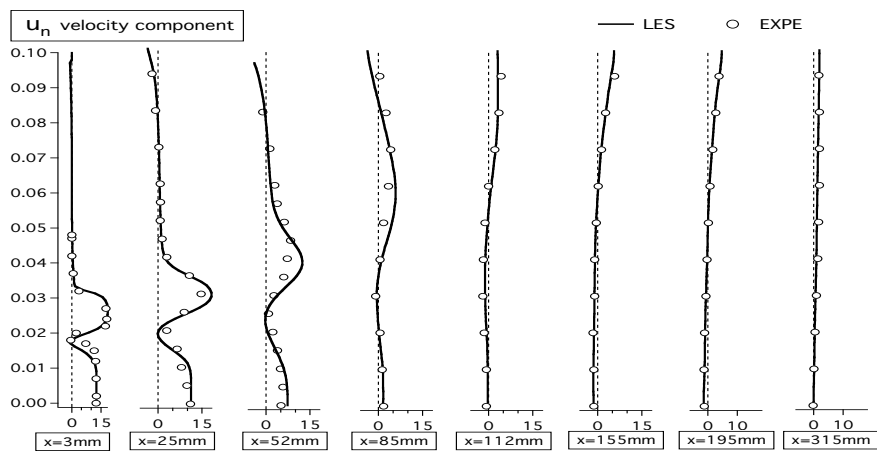


Figure 7: Mean axial velocity profiles for the gas phase.

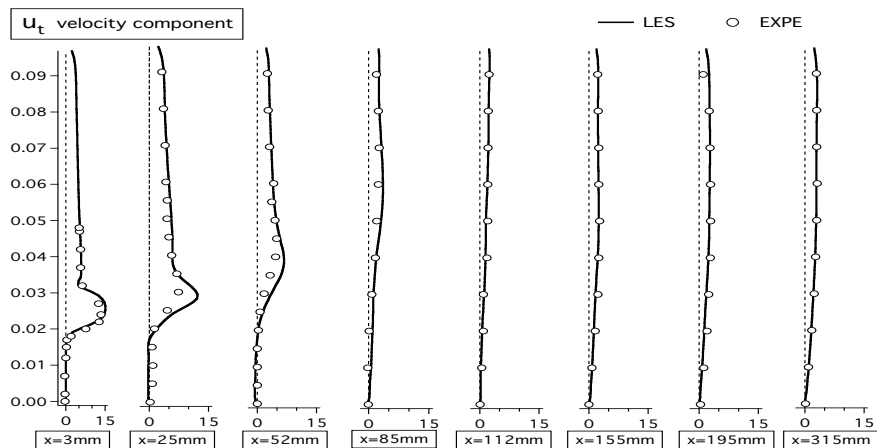


Figure 8: Mean tangential velocity profiles for the gas phase.

The same velocity profiles are plotted for the liquid phase on Figs. 11 to 14. *pages 26-27*

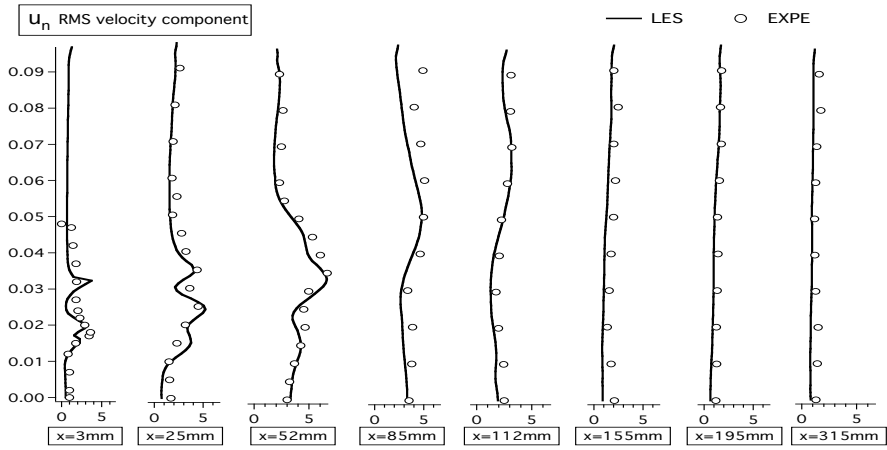


Figure 9: RMS axial velocity profiles for the gas phase.

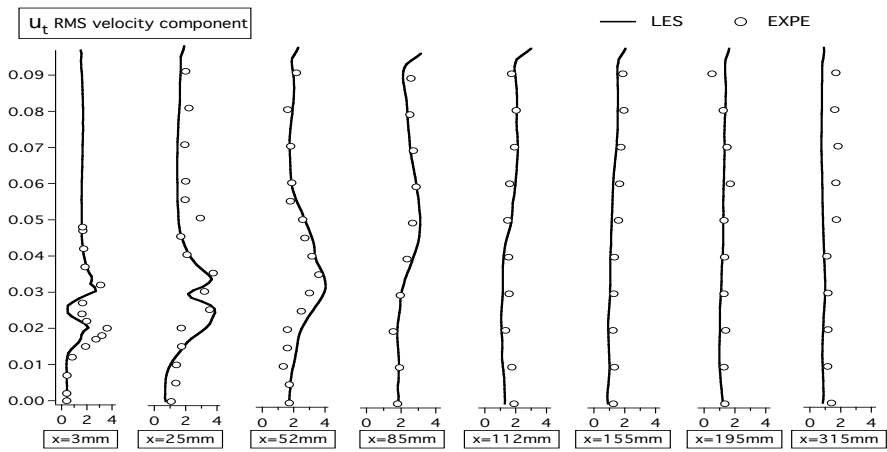


Figure 10: RMS tangential velocity profiles for the gas phase.

Two experimental results are plotted, corresponding to either the data conditioned on the single droplet size of $45 \mu m$ or to the data averaged on all droplet sizes. Results show that the effect of polydispersion on the mean velocity is weak, except near the stagnation zone induced by the recirculation where the polydispersion has a tendency to delay the velocity decrease. As for the gas phase, the numerical solution for the mean velocity is in good agreement with experimental data. The

main discrepancy is again near the stagnation zone, known to be difficult to predict, and seems to indicate that the recirculation zone is too close from the injection plane. However velocity profiles do not give a complete view of the flow structure and the comparison between the numerical and experimental 3D flow fields (Fig. 6) *see page 22* shows that the structures of the flow and of the recirculation zone are well captured by the simulation. Compared to experiment, fluctuating velocity profiles are also well captured in shape, but are underestimated by the simulation. This was also observed in [47, 50] and is due to the missing RUM, that represents a significant part of the particle sub-grid scale motion. Finally the liquid mass flow rate shown on Fig. 15 indicates a correct numerical prediction of the liquid phase, with only a *see page 28* reduced flux decrease along the axis due to the discrepancy between the velocities already observed in the same region.

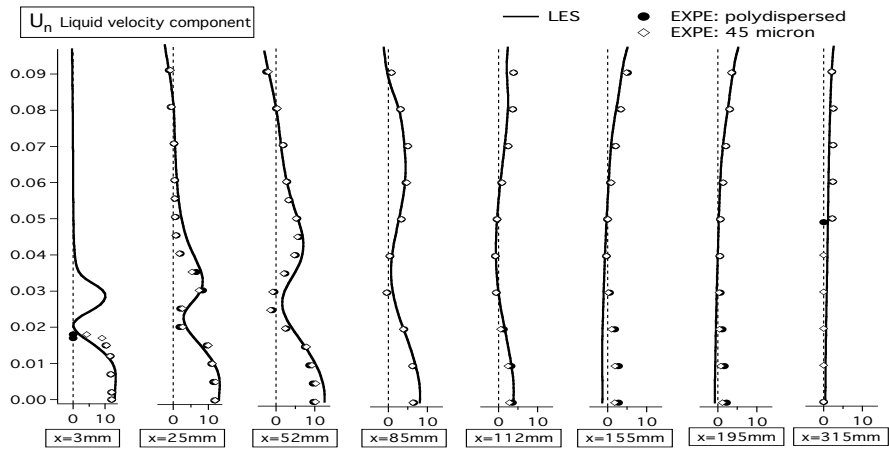


Figure 11: Mean axial velocity profiles for the liquid phase. Numerical simulations use $45 \mu m$ monodisperse droplets.

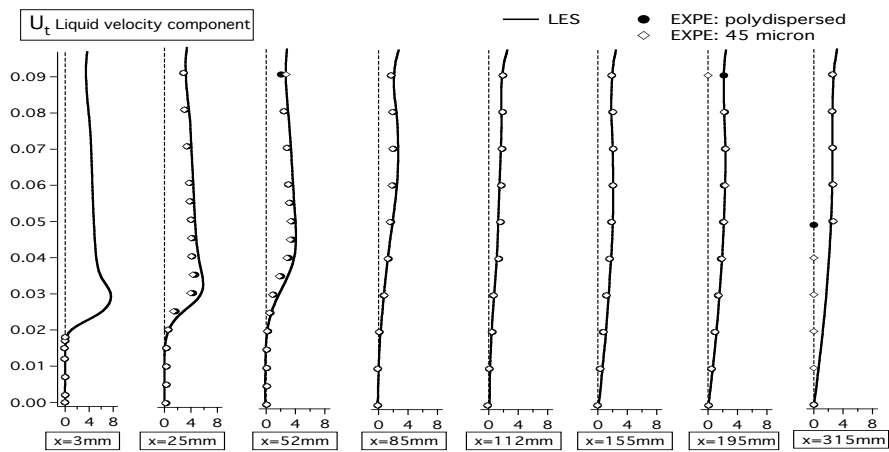


Figure 12: Mean tangential velocity profiles for the liquid phase. Numerical simulations use $45 \mu m$ monodisperse droplets.

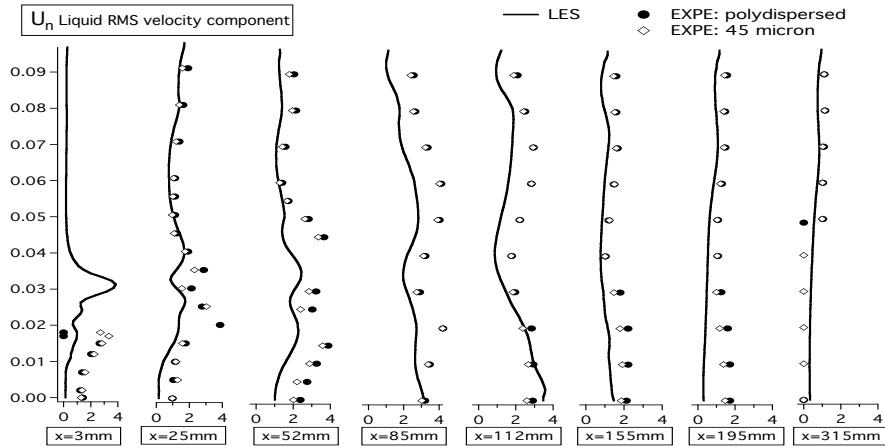


Figure 13: RMS axial velocity profiles for the liquid phase. Numerical simulations use $45 \mu\text{m}$ monodisperse droplets.

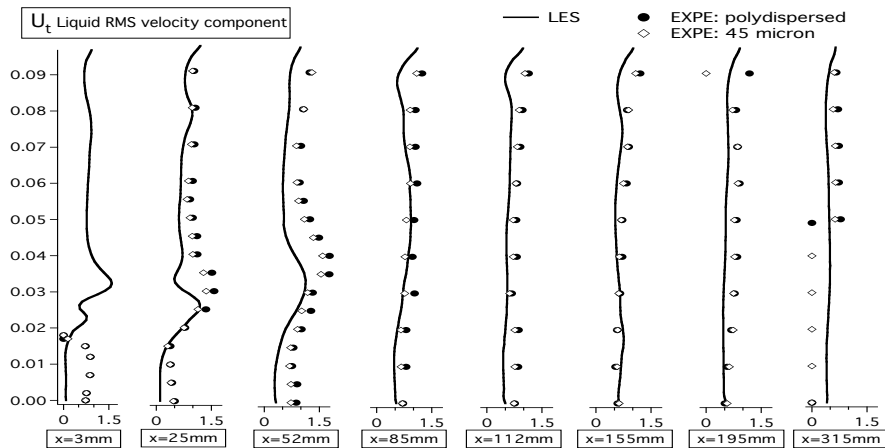


Figure 14: RMS tangential velocity profiles for the liquid phase. Numerical simulations use $45 \mu\text{m}$ monodisperse droplets.

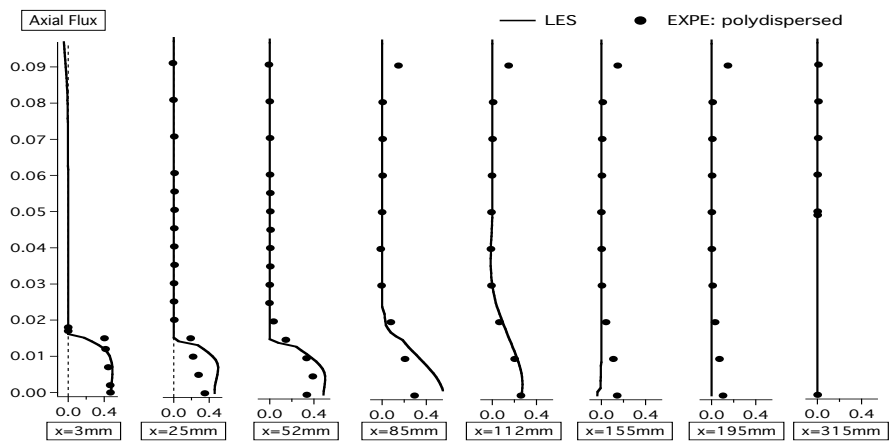


Figure 15: Axial liquid mass flux. Numerical simulations use $45 \mu\text{m}$ monodisperse droplets.

5 Reacting flow in an aircraft combustion chamber

5.1 Configuration

The last test case is a 3D sector of 22.5-degrees of an annular combustor at atmospheric pressure. The kerosene Liquid Spray (*LS*) is located at the center of the main Swirled Inlet (*SI*) (Fig. 17). Small Holes (*H*), located around the inlet aim at *see page 31* lifting the flame and protect the injector from high temperatures. The perforations localized on the upper and lower walls are divided in two parts. The Primary Jets (*PJ*) bring cold air to the flame in the first part of the combustor where combustion takes place. The Dilution Jets (*DJ*) inject air further downstream to reduce and homogenise the outlet temperature to protect the turbine. The Spark Plug (*SP*) is located under the upper wall between two (*PJ*) (Fig. 18). The geometry (Fig. 19) *see page 31* also includes cooling films which protect walls from the flame. *see page 31*

The inlet and outlet boundary conditions use characteristic treatments with relaxation coefficients to reduce acoustic reflexion [10, 71]. The *SI* imposed velocity field mimics the swirler influence. Figure 16 displays profiles of the three components of the air velocity as prescribed along the axis of the spray (*AB* on Fig. 19) *see page 31* in reduced units: $u^* = u/U_0$ as a function of $r^* = r/R_0$ where U_0 is the bulk velocity and R_0 is the radius of the *SI*. The other inlets are simple jets. The injected spray is monodisperse, composed of droplets of diameter of $15 \mu m$. The volume fraction, $\alpha_l \simeq 10^{-3}$, is imposed for a disk of radius $r^* = 0.4$. This corresponds to a lean global stoichiometric ratio of 0.28. At injection, the liquid velocity is equal to the gaseous velocity as the droplet Stokes number, based on the droplet relaxation time, is lower than one. The droplet inlet temperature equals $288 K$ and the air is at $525 K$. No-slip conditions are used on the upper and lower walls while a symmetry condition is used on the sector sides. All conditions are summarized

<i>Air flow</i>	
Total mass flow rate (g/s)	119
Temperature (K)	525
Pressure (bar)	1
<i>Liquid fuel</i>	
Mass flow rate (g/s)	2.38
Temperature (K)	300
Droplet size (μm)	15

Table 3: Flow conditions for the gas turbine configuration.

in Table 3.

see page 30

The unstructured mesh is composed of 400,000 nodes and 2,300,000 tetrahedra, which is typical and reasonable for LES of such configuration. The explicit time step is $\Delta t \simeq 0.22 \mu\text{s}$. The mesh is refined close to the inlets and in the combustion zone (Fig. 20), leading to a flame thickening factor of the order of 10. The one-step chemical scheme described in section 3 is used here without any changes. It has been checked that in the simulation the flame mostly burns mixtures with an equivalence ratio in the range between 0.5 and 1, where the chemical scheme is valid.

see page 31

5.2 Steady spray flame

First a steady turbulent two-phase flame is calculated. The $15 \mu\text{m}$ droplet motion follows the carrier phase dynamics so that the Centered Recirculation Zones (CRZ) are similar for gas and liquid, as illustrated on Fig. 21, showing the instantaneous backflow lines of both phases, plotted in the vertical central cutting

see page 32

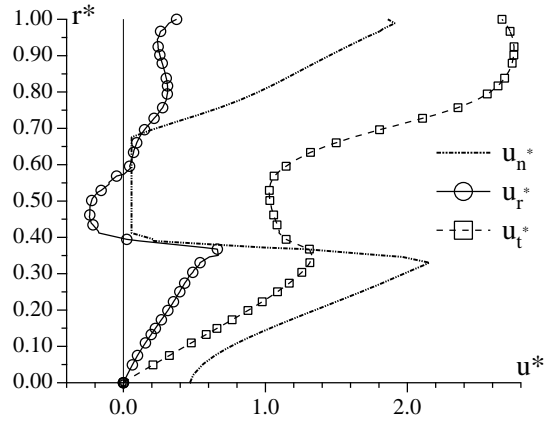


Figure 16: Normal, radial and tangential injection velocity profiles for the burner configuration: $r^* = r/R_0$ and $u^* = u/U_0$ where R_0 and U_0 are respectively the SI radius and the bulk velocity.

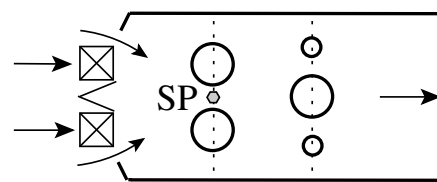
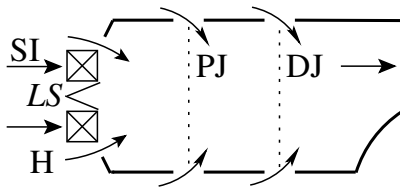


Figure 17: Geometry sketch : side view Figure 18: Geometry sketch : top view

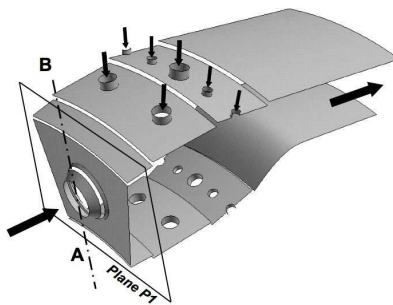


Figure 19: Chamber geometry

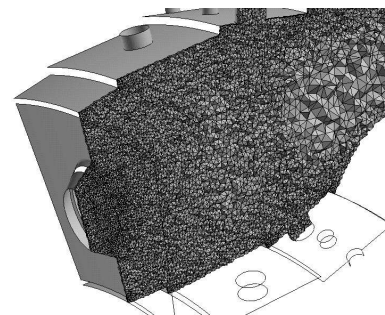


Figure 20: Mesh view on central plane

plane. Maintained by this CRZ, the droplets accumulate and the droplet number density, presented with the liquid volume fraction field on Fig. 21, rises above its *see page 32*

initial value: a zone where the droplet number density n_l is larger than $2n_{l,inj}$ (where $n_{l,inj}$ is its value at injection) is formed downstream of the injector at a distance approximately half of the nozzle diameter (lines with circles on Fig 21). The increased residence time of these droplets, whose diameter field is presented on Fig. 22, increases the local equivalence ratio distribution. The heat transfer linked to the phase change leads to the reduction of the gaseous temperature, as shown by the isoline $T = 450 K$ on Fig. 23, and an increase of the dispersed phase temperature. Thus, the CRZ, by trapping evaporating droplets, stabilises the vaporised fuel and the flame. The flame front visualized on Fig. 23 by the heat release field

see page 32

see page 32

see page 34

see page 34

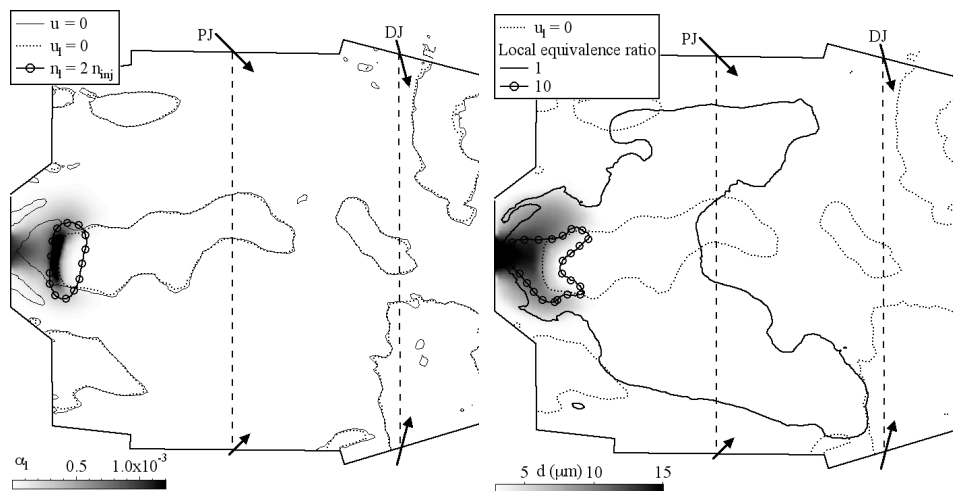


Figure 21: Instantaneous field of volume fraction in the central cutting plane of the chamber, with zero-velocity lines and $n_l = 2n_{inj}$ isoline. Figure 22: Instantaneous field of droplet diameter in the central cutting plane of the chamber, with equivalence ratio isolines for the values 1 and 10.

is influenced by both flow dynamics and evaporation rate. The main phenomena controlling flame stabilisation are :

1. the air velocity must be low enough to match the turbulent flame velocity :

the dynamics of the carrier phase (and in particular the CRZ) stabilises the flame front on a stable pocket of hot gases

2. zones where the local mixture fraction is within flammability limits must exist : combustion occurs between the fuel vapour radially dispersed by the swirl and the ambient air, where the equivalence ratio is low enough
3. the heat release must be high enough to maintain evaporation and reaction : the sum of heat flux Π and heat release $\dot{\omega}_T$, plotted on Fig. 23, allows to identify the zone (—) where the heat transfer due to evaporation compensates the local heat release : $\Pi + \dot{\omega}_T = 0$. *see page 34*

In the present case, the flame front is stabilised by the CRZ (1) but the heat release magnitude is reduced in the evaporation zone because of both effects (2) and (3). To determine the flame regime (premixed and/or diffusion), the Takeno index $\mathcal{T} = \nabla Y_F \cdot \nabla Y_O$ and an indexed reaction rate $\dot{\omega}_F^* = \dot{\omega}_F \frac{\mathcal{T}}{|\nabla Y_F| \cdot |\nabla Y_O|}$ are used [72]. The flame structure is then divided into two parts : $\dot{\omega}_F^* = +\dot{\omega}_F$ in the premixed regime and $\dot{\omega}_F^* = -\dot{\omega}_F$ in the diffusion regime (Fig. 24). In the primary zone, the partially premixed regime dominates because of the unsteady inhomogeneous fuel vapour. In the dilution zone, the unburned fuel reacts with dilution jets through a diffusion flame, as confirmed by the coincidence between the flame and the stoichiometric line. *see page 34*

In his review on vortex breakdown, Lucca-Negro [73] classifies the hydrodynamic instabilities appearing in swirled flows. For high swirl numbers, the axial vortex breaks down at the stagnation point S and a spiral is created around a central recirculation zone CRZ (Fig. 25) : this vortex breakdown is the so-called Precessing Vortex Core (PVC) and occurs in a large number of combustors [74]. LES captures the vortex breakdown in the combustor and its frequency is evaluated with the backflow line on a transverse plane (Fig. 26) at six successive times marked with *see page 34*

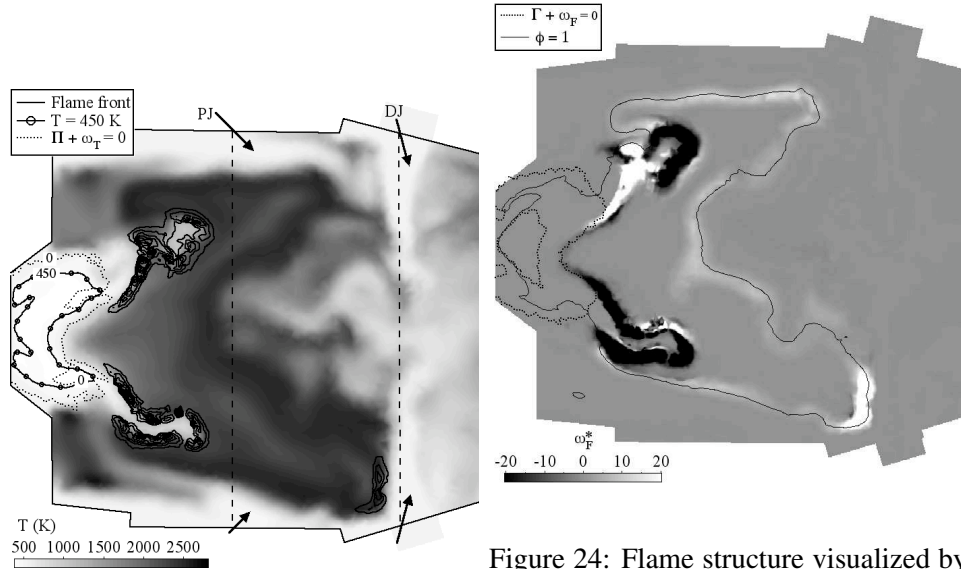


Figure 23: Flame front

Figure 24: Flame structure visualized by the indexed reaction rate. Black zones correspond to premixed flames and white zones to diffusion flames.

a number from 1 to 6 and separated by 0.5 ms. The turnover time is estimated at $\tau_{PVC} \simeq 3.5$ ms, corresponding to a frequency of $f_{PVC} \simeq 290$ Hz. Moreover, the three rotating motions of the SI, the whole PVC structure and the spiral winding turn in the same direction, as illustrated by the rotating arrows on Fig. 25. The PVC *see page 34* defined on Fig. 27a controls the motions of both the Vaporised Fuel (VF) zone and *see page 35* the flame front. Fig. 27b displays the temperature field, the maximum fuel mass *see page 35* fraction (white lines) and the flame front (black isolines of reaction rate $\dot{\omega}_F$). In the cutting plane, defined on Fig. 27a, the CRZ stabilises hot gases and enhances *see page 35* evaporation leading to a cold annular zone where the maximum fuel mass fraction precesses. The flame motion follows the PVC and the reaction rate is driven by the fuel vapour concentration.

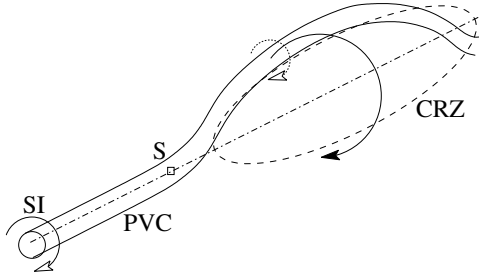


Figure 25: Precessing Vortex Core.

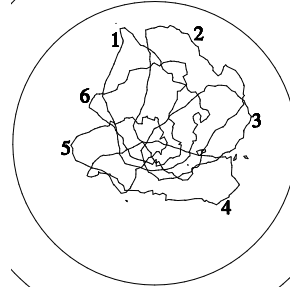


Figure 26: Backflow line : transverse cut in plane P1 (Fig 19).

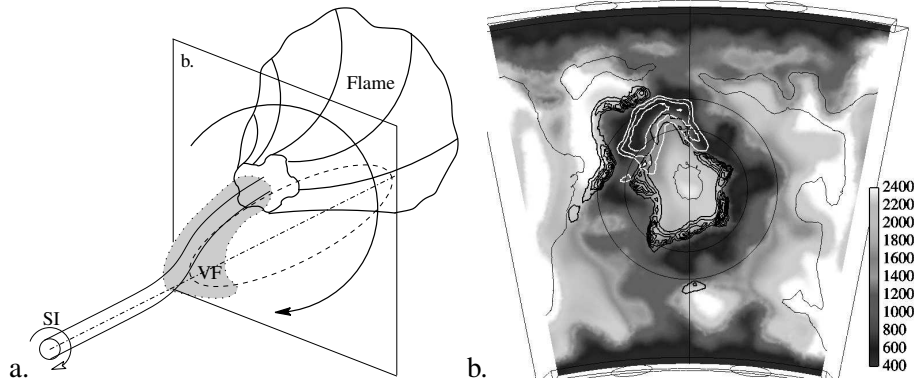


Figure 27: PVC influence on evaporation and combustion (left). Fields of temperature and isolines of fuel vapor (white lines) and reaction rate (black lines) (right).

5.3 Ignition sequence

Ignition sequences can also be simulated with the same LES tool. The numerical method used to mimic an ignition by spark plug in the combustion chamber is the addition of the source term $\dot{\omega}_{spark}$ in Eq. (23). This source term, defined by Eq. (23), is a gaussian function located at (x_0, y_0, z_0) near the upper wall between both primary jets and deposited at time $t = t_0 = 0$. The spark duration, typical of industrial spark plugs, is $\sigma_t = 0.04 \text{ ms}$. The total deposited energy is $E_{spark} =$

150 J.

$$\dot{\omega}_{spark} = \frac{E_{spark}}{(2\pi)^2 \sigma_t \sigma_r^3} e^{-\frac{1}{2} \left[\left(\frac{t-t_0}{\sigma_t} \right)^2 + \left(\frac{x-x_0}{\sigma_r} \right)^2 + \left(\frac{y-y_0}{\sigma_r} \right)^2 + \left(\frac{z-z_0}{\sigma_r} \right)^2 \right]} \quad (23)$$

The temporal evolution of the total (i.e. spatially integrated) power deposited by the spark is presented on Fig. 28, along with the total heat release $\dot{\omega}_T$ and the *see page 36* spatially averaged temperature. After a heating phase due to the source term on the energy equation (up to approximately 0.08 ms), the temperature is sufficient to initiate the reaction between fuel vapour and air, leading to a sudden increase of the heat release of the exothermic reaction. When the spark is stopped (at ≈ 0.18 ms), the total heat release decreases, and finally stabilizes at a level corresponding to a propagating flame, while the mean temperature continues to increase: the ignition is successful.

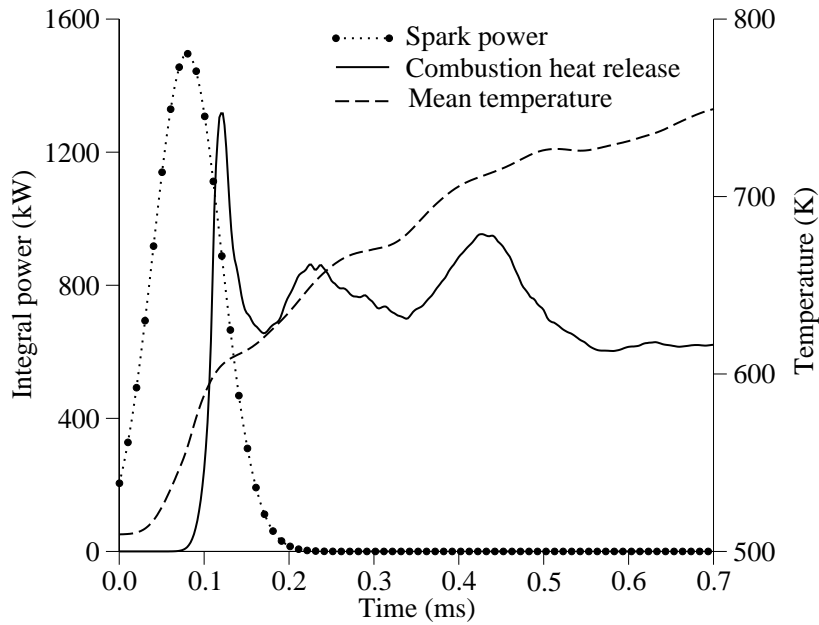


Figure 28: Total (spatially integrated) source term $\dot{\omega}_{spark}$, total heat release $\dot{\omega}_T$, and spatially averaged temperature.

The transition from the ignition of the first flame kernel ($t = 0.2 \text{ ms}$) to a complete stabilisation takes more time (more than 3 ms) and is illustrated on the longitudinal central cutting plane identified in Fig. 29 with the fuel mass fraction *see page 39* field and the reaction rate isolines. The first image is presented at $t = 0.2 \text{ ms}$ and after, successive images are separated by $\Delta t = 0.2 \text{ ms}$. At the beginning of the computation, the $15 \text{ }\mu\text{m}$ droplets evaporate in the ambient air at $T = 525 \text{ K}$ creating a turbulent cloud of vaporised fuel in the whole primary zone. This fuel vapour is trapped by the CRZ and is transported from the evaporation zone to the spark plug area. At $t = 0$, the spark ignition leads to the creation of a hot kernel. The propagation of the flame front created by this pocket of hot gases is highly controlled by the fuel vapour distribution between $t = 0$ and $t = 1 \text{ ms}$. After $t = 0.2 \text{ ms}$, this flame loses its spherical shape due to convective effects. The downstream side of the flame front is blown away and extinguishes by lack of fuel while the bottom side is progressing towards the center line where the fuel vapour concentration is high. When entering the CRZ ($t = 1 \text{ ms}$), the front is strongly wrinkled by the large turbulent scales of the flow. However, in the upstream region of the CRZ, the low velocities enable to stabilize the edge of the reacting zone close to the fuel injection ($t = 1$ to 1.4 ms). In this region, the flame and the back-flow maintain a high temperature ambient leading to a strong evaporation rate and creating a stable fuel vapour concentrated spot ($t = 1.6$ to 2.4 ms). Due to the swirled jet, this fuel vapour is radially dispersed into the air flow and produce a flammable mixture. Burning this mixture, the flame is able to spread in the radial direction and finally occupies a large section of the primary zone ($t = 2.4 \text{ ms}$). This last topology corresponds to the steady spray flame described in the previous section.

This ignition sequence shows the important role of the liquid phase, responsible for the great differences with the ignition of a purely gaseous flame. The

controlling mechanism is evaporation, that delays the start of the chemical reaction and, together with the droplet turbulent dispersion, modifies the fuel vapor distribution and consequently the flame front propagation. This was never visualized and, despite the use of simplified models, the simulation provides a good and new qualitative description of the phenomena.

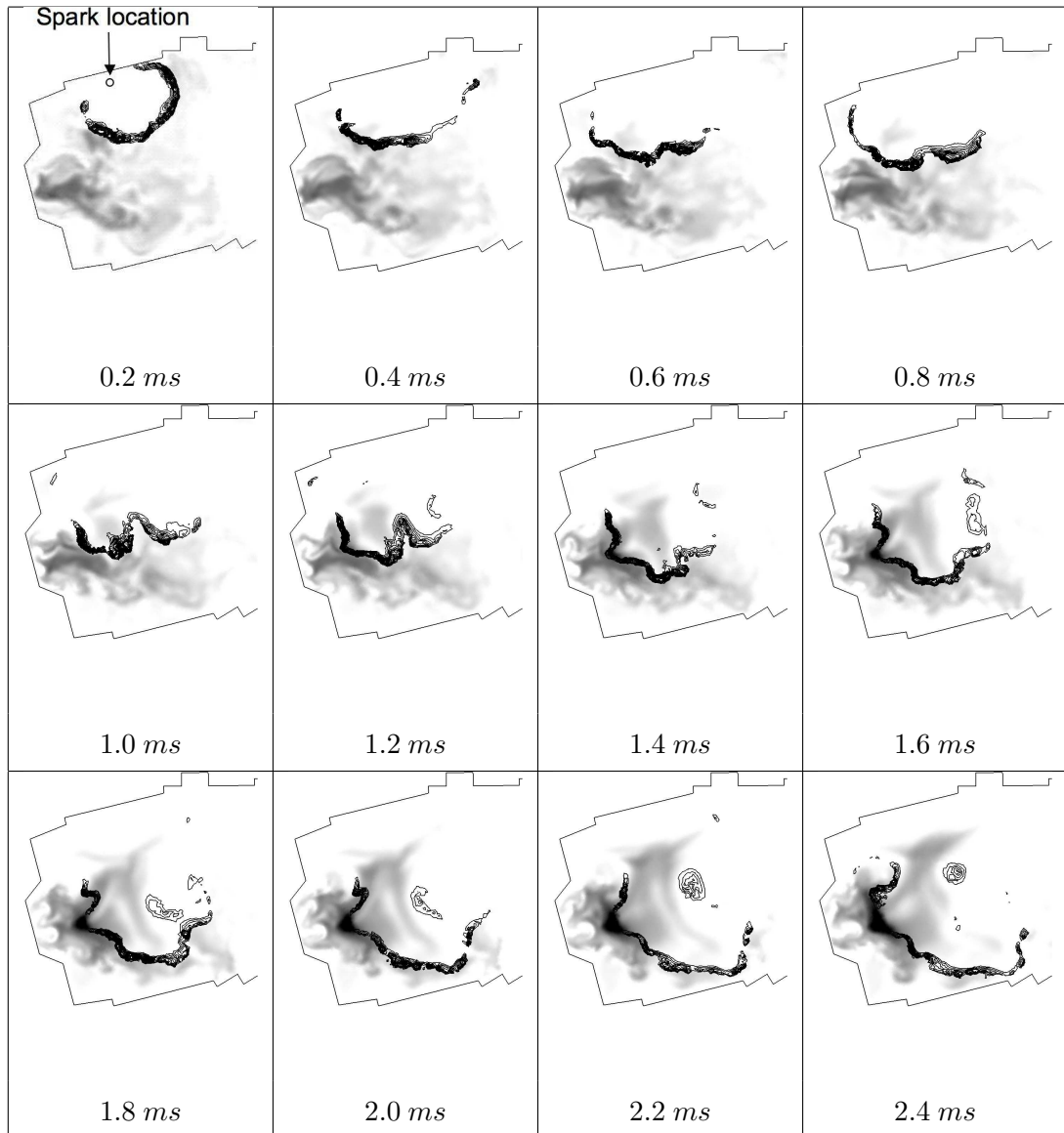


Figure 29: Flame front propagation on fuel mass fraction field (white: 0 → black: 0.35)

6 Conclusions

A steady spray flame in a realistic aeronautical combustor has been computed using a parallel LES Euler/Euler solver. This approach was first tested in two simple reference cases: a one-dimensional laminar two-phase flame of JP10 with air and a swirled non-reacting flow with solid particles [1]. The influence of the dispersed phase on the flame motion has been highlighted, in particular the role of the evaporation process. The unsteady approach brings new insight into the physics of such complex reactive two-phase flows. Furthermore, it allows the computation of an ignition sequence from the formation of the first spherical flame front to the stabilisation of the turbulent spray flame. Obviously more quantitative comparisons of the present method with existing Euler-Lagrange methods and with experiments (such as [47]) are needed. But this paper shows that despite its limitations and still open modelling issues, the Euler-Euler approach already leads to interesting results on the tested configurations and demonstrates its feasibility and capabilities for two-phase flow combustion.

Acknowledgements-This work was supported by the Safran group. The two monitors Dr. C. Bérat and Dr. M. Cazalens are gratefully acknowledged.

References

- [1] M. Sommerfeld and H. H. Qiu. Characterisation of particle-laden, confined swirling flows by phase-doppler anemometry and numerical calculation. *Int. J. Multiphase Flow*, 19(6):1093–1127, 1993.
- [2] D. Caraeni, C. Bergstrom, and L. Fuchs. Modeling of liquid fuel injection, evaporation and mixing in a gas turbine burner using large eddy simulation. *Flow Turb. and Combustion*, 65:223–244, 2000.
- [3] V.K. Chakravarthy and S. Menon. Subgrid modeling of turbulent premixed flames in the flamelet regime. *Flow Turb. and Combustion*, 65:133–161, 2000.
- [4] O. Colin, F. Ducros, D. Veynante, and T. Poinso. A thickened flame model for large eddy simulations of turbulent premixed combustion. *Phys. Fluids*, 12(7):1843–1863, 2000.
- [5] H. Forkel and J. Janicka. Large-eddy simulation of a turbulent hydrogen diffusion flame. *Flow Turb. and Combustion*, 65(2):163–175, 2000.
- [6] H. Pitsch and L. Duchamp de la Geneste. Large eddy simulation of premixed turbulent combustion using a level-set approach. *Proc of the Comb. Institute*, 29:2001–2005, 2002.
- [7] K. Mahesh, G. Constantinescu, and P. Moin. A numerical method for large-eddy simulation in complex geometries.
- [8] L. Selle, G. Lartigue, T. Poinso, R. Koch, K.-U. Schildmacher, W. Krebs, B. Prade, P. Kaufmann, and D. Veynante. Compressible large-eddy simulation of turbulent combustion in complex geometry on unstructured meshes. *Combust. Flame*, 137(4):489–505, 2004.

- [9] Y. Sommerer, D. Galley, T. Poinso, S. Ducruix, F. Lacas, and D. Veynante. Large eddy simulation and experimental study of flashback and blow-off in a lean partially premixed swirled burner. *J. of Turbulence*, 5, 2004.
- [10] V. Moureau, G. Lartigue, Y. Sommerer, C. Angelberger, O. Colin, and T. Poinso. High-order methods for DNS and LES of compressible multi-component reacting flows on fixed and moving grids. *J. Comput. Phys.*, 202(2):710–736, 2005.
- [11] S. Roux, G. Lartigue, T. Poinso, U. Meier, and C. Bérat. Studies of mean and unsteady flow in a swirled combustor using experiments, acoustic analysis and large eddy simulations. *Combust. Flame*, 141:40–54, 2005.
- [12] T. Poinso and D. Veynante. *Theoretical and numerical combustion*. R.T. Edwards, 2nd edition., 2005.
- [13] A.H. Lefebvre. *Gas Turbines Combustion*. Taylor & Francis, 1999.
- [14] C. Weber and Z. Angrew. The decomposition of a liquid jet. *Math. Mech.*, 11:136–154, 1931.
- [15] S. Nukiyama and Y. Tanasawa. Experiments in on the atomization of liquids in air stream. report 3 : on the droplet-size distribution in an atomized jet. *Trans. Soc. Mech. Eng. Japan*, 5:62–67, 1939.
- [16] R. D. Reitz and F. V. Bracco. Mechanism of atomization of a liquid jet. *Physics of Fluids*, 25(10):1730–1742, 1982.
- [17] Z. Han, S. Parrish, P.V. Farrell, and D. Reitz. Modeling atomization processes of pressure-swirl hollow-cone fuel sprays. *Atomization and Sprays*, (6):663–684, 1997.

- [18] J.C. Lasheras and E.J. Hopfinger. Liquid jet instability and atomisation in a coaxial gas stream. *Ann. Rev. Fluid. Mech.*, 32:275–308, 2000.
- [19] S.V. Apte, K. Mahesh, P. Moin, and J.C. Oefelein. Large-eddy simulation of swirling particle-laden flow in a coaxial combustor. *International Journal of Multiphase Flow*, 29:1311–1331, 2003.
- [20] V.M. Alipchenkov and L.I. Zaichik. Modeling of the turbulent motion of particles in a vertical channel. *Journal of Fluid Dynamics*, 41(4):531–544, 2006.
- [21] M. Boivin, K. Squires, and O. Simonin. On the prediction of gas-solid flows with two-way coupling using large eddy simulation. *Phys. Fluids*, 12(8), 2000.
- [22] B. Oesterlé and L.I. Zaichik. On lagrangian time scales and particle dispersion modeling in equilibrium turbulent shear flows. *Physics of Fluids*, 16(9):3374–3384, 2004.
- [23] C. Marchioli, M. Picciotto, and A. Soldati. Particle dispersion and wall-dependent turbulent flow scales: implications for local equilibrium models. *Journal of Turbulence*, 7(60):1–12, 2006.
- [24] M. Benson, T. Tanaka, and J.K. Eaton. Effects of wall roughness on particle velocities in a turbulent channel flow. *Journal of Fluids Engineering*, 127(2):250–256, 2005.
- [25] M. Sommerfeld and J. Kussin. Analysis of collision effects for turbulent gas-particle flow in a horizontal channel. Part (ii). integral properties and validation. *International Journal of Multiphase Flow*, 29(4):701–718, 2003.

- [26] I. Gökalp, C. Chauveau, C. Morin, B. Vieille, and M. Birouk. Improving dropelt breakup and vapoization models by including high pressure and turbulence effects. *Atomiztion and Sprays*, 10:475–510, 2000.
- [27] V. Sankaran and S. Menon. Les of spray combustion in swirling flows. *J. of Turbulence*, 3:011, 2002.
- [28] K. Mahesh, G. Constantinescu, S. Apte, G. Iaccarino, F. Ham, and P. Moin. Progress towards large-eddy simulation of turbulent reacting and non-reacting flows in complex geometries. In *Annual Research Briefs*, pages 115–142. Center for Turbulence Research, NASA Ames/Stanford Univ., 2002.
- [29] S. V. Apte, M. Gorokhovski, and P. Moin. Large-eddy simulation of atomizing spray with stochastic modeling of secondary breakup. In *ASME Turbo Expo 2003 - Power for Land, Sea and Air*, Atlanta, Georgia, USA, 2003.
- [30] F. Ham, S. V. Apte, G. Iaccarino, X. Wu, M. Herrmann, G. Constantinescu, K. Mahesh, and P. Moin. Unstructured les of reacting multiphase flows in realistic gas turbine combustors. In *Annual Research Briefs*. Center for Turbulence Research, 2003.
- [31] H. Enwald, E. Peirano, and A.-E. Almstedt. Eulerian two-phase flow theory applied to fluidization. *Int. J. Multiphase Flow*, 22:21–66, 1996.
- [32] E. Peirano and B. Leckner. Fundamentals of turbulent gas-solid flows applied to circulating fluidized bed combustion. *Prog. Energy Comb. Sci.* , 24:259–296, 1998.
- [33] J. Gao, C. Xu, S. Lin, and G. Yang. Simulations of gas-liquid-solid 3-phase flow and reaction in FCC riser reactors. *AIChE Journal*, 47(3):677–692, 2001.

- [34] A.K. Das. *Computational fluid dynamics simulation of gas-solid risers : reactive flow modelling*. PhD thesis, Universiteit Gent, 2002.
- [35] A. Gobin, H. Neau, O. Simonin, J.-R. Linas, V. Reiling, and J.-L. Sélo. Fluid dynamic numerical simulation of a gas phase polymerization reactor. *Int. J. of Numerical Methods in Fluids*, 43:1199–1220, 2003.
- [36] P. Moin. Large eddy simulation of multi-phase turbulent flows in realistic combustors. *Prog. in Computational Fluid Dynamics*, 4:237–240, 2004.
- [37] A Kaufmann. *Vers la simulation des grandes échelles en formulation Euler/Euler des écoulements réactifs diphasiques*. PhD thesis, INPT, 2004.
- [38] P. Février, O. Simonin, and K. Squires. Partitioning of particle velocities in gas-solid turbulent flows into a continuous field and a spatially uncorrelated random distribution: Theoretical formalism and numerical study. *J. Fluid Mech.*, 533:1–46, 2005.
- [39] J.B. Mossa. *Extension polydisperse pour la description Euler/Euler des écoulements diphasiques réactifs*. PhD thesis, INP Toulouse, 2005.
- [40] E. Riber. *Développement de la méthode de simulation aux grandes échelles pour les écoulements diphasiques turbulents*.
- [41] P. Fede and O. Simonin. Numerical study of the subgrid fluid turbulence effects on the statistics of heavy colliding particles. *Phys. Fluids* , 18(045103), 2006.
- [42] P. Fede, P. Villedieu, O. Simonin, and K.D. Squires. Stochastic modeling of the subgrid fluid velocity fluctuations seen by inertial particles. In *Proc of the Summer Program*. Center for Turbulence Research, NASA Ames/Stanford Univ., 2006.

- [43] M. Moreau, B. Bedat, and O. Simonin. From euler-lagrange to euler-euler large eddy simulation approaches for gas-particle turbulent flows. In *ASME Fluids Engineering Summer Conference*. ASME FED, 2005.
- [44] E. Riber, M. Moreau, O. Simonin, and B. Cuenot. Towards large eddy simulation of non-homogeneous particle laden turbulent gas flows using euler-euler approach. In *11th Workshop on Two-Phase Flow Predictions*, Merseburg, Germany, 2005.
- [45] O.A. Druzhinin and S. Elghobashi. On the decay rate of isotropic turbulence laden with microparticles. *Phys. Fluids* , 11(3), 1999.
- [46] S. Chapman and T.G. Cowling. *The Mathematical Theory of Non-Uniform Gases*. Cambridge University Press, cambridge mathematical library edition, 1939 (digital reprint 1999).
- [47] E. Riber, M. García, V. Moureau, H. Pitsch, O. Simonin, and T. Poinsot. Evaluation of numerical strategies for LES of two-phase reacting flows. In *CTR Summer Program*, Center for Turbulence Research, NASA AMES, Stanford University, USA, 2006.
- [48] D.B. Spalding. The combustion of liquid fuels. In *4th Symp. (Int.) on Combustion*. The Combustion Institute, Pittsburgh, 1953.
- [49] A. Kaufmann, O. Simonin, T. Poinsot, and J. Helie. Dynamics and dispersion in eulerian-eulerian DNS of two phase flow. In *Proceeding of the Summer Program*, pages 381–391, Center for Turbulence Research, NASA AMES/Stanford University, USA, 2002.
- [50] E. Riber, M. Moreau, O. Simonin, and B. Cuenot. Development of Euler-Euler LES approach for gas-particle turbulent jet flow. In *ASME - European Fluids Enigneering Summer Meeting*, 2006.

- [51] F. Nicoud and F. Ducros. Subgrid-scale stress modelling based on the square of the velocity gradient. *Flow Turb. and Combustion* , 62(3):183–200, 1999.
- [52] J.-Ph. L egier, T. Poinso, and D. Veynante. Dynamically thickened flame large eddy simulation model for premixed and non-premixed turbulent combustion. In *Summer Program 2000*, pages 157–168, Center for Turbulence Research, Stanford, USA, 2000.
- [53] C. Martin, L. Benoit, Y. Sommerer, F. Nicoud, and T. Poinso. Les and acoustic analysis of combustion instability in a staged turbulent swirled combustor. *AIAA Journal* , 44(4):741–750, 2006.
- [54] P. Schmitt, T.J. Poinso, B. Schuermans, and K. Geigle. Large-eddy simulation and experimental study of heat transfer, nitric oxide emissions and combustion instability in a swirled turbulent high pressure burner.
- [55] A. Sengissen, A. Giauque, G. Staffelbach, M. Porta, W. Krebs, P. Kaufmann, and T. Poinso. Large eddy simulation of piloting effects on turbulent swirling flames. In *Proc. of the Combustion Institute*, 31, 2007.
- [56] P. Moin, K. Squires, W. Cabot, and S. Lee. A dynamic subgrid-scale model for compressible turbulence and scalar transport. *Phys. Fluids* , A 3(11):2746–2757, 1991.
- [57] B. Vreman, B. Geurts, and H. Kuerten. Subgrid modeling in LES of compressible flow. *Appl. Sci. Res.*, 54:191–203, 1995.
- [58] A. Yoshizawa. Statistical theory for compressible turbulent shear flows, with the application to subgrid modeling. *Phys. Fluids* , 29(7):2152–2164, 1986.
- [59] M. Moreau, B. Bedat, and O. Simonin. A priori testing of subgrid stress models for euler-euler two-phase LES from euler-lagrange simulations of

- gas-particle turbulent flow. In *18th Ann. Conf. on Liquid Atomization and Spray Systems*. ILASS Americas, 2005.
- [60] C. Hirsch. *Numerical Computation of internal and external flows*. John Wiley, New York, 1988.
- [61] O. Colin and M. Rudgyard. Development of high-order Taylor-Galerkin schemes for unsteady calculations. *J. Comput. Phys.*, 162(2):338–371, 2000.
- [62] T. Poinso and S. Lele. Boundary conditions for direct simulations of compressible viscous flows. *J. Comput. Phys.*, 101(1):104–129, 1992.
- [63] T. H. Lin, C. K. Law, and S. H. Chung. Theory of laminar flame propagation in off-stoichiometric dilute sprays. *Int. J. of Heat and Mass transfer*, 31:1023–1034, 1988.
- [64] T. H. Lin and Y. Y. Sheu. Theory of laminar flame propagation in near-stoichiometric dilute sprays. *Int. J. of Heat and Mass transfer*, 84:333–342, 1991.
- [65] C. Martin. Eporck user guide v1.8. Technical report, CERFACS, 2004.
- [66] S.C. Li, B. Varatharajan, and F.A. Williams. Chemistry of jp-10 ignition. *AIAA Journal*, 39(12):2351–2356, 2001.
- [67] K. Hishida, K. Takemoto, and M. Maeda. Turbulent characteristics of gas-solids two-phase confined jet. *Japanese Journal of Multiphase Flow*, 1(1):56–69, 1987.
- [68] K. Squires and J. Eaton. Measurements of particle dispersion obtained from direct numerical simulations of isotropic turbulence. *J. Fluid Mech.*, 226:1–35, 1991.

- [69] J. S. Vames and T. J. Hanratty. Turbulent dispersion of droplets for air flow in a pipe. *Experiments in Fluids*, 6(2):94–104, 2004.
- [70] S. V. Apte, K. Mahesh, and T. Lundgren. A eulerian-lagrangian model to simulate two-phase/particulate flows. In *Annual Research Briefs*. Center for Turbulence Research, 2003.
- [71] L. Selle, F. Nicoud, and T. Poinsot. The actual impedance of non-reflecting boundary conditions: implications for the computation of resonators. *AIAA Journal* , 42(5):958–964, 2004.
- [72] H. Yamashita, M. Shimada, and T Takeno. A numerical study on flame stability at the transition point of jet diffusion flame. In *26th Symp. (Int.) on Combustion*, pages 27 – 34. The Combustion Institute, Pittsburgh, 1996.
- [73] O. Lucca-Negro and T. O’Doherty. Vortex breakdown: a review. *Prog. Energy Comb. Sci.* , 27:431–481, 2001.
- [74] L. Selle. *Simulation aux grandes échelles des couplages acoustique / combustion dans les turbines á gaz*. Phd thesis, INP Toulouse, 2004.

List of Figures

1	Sketch of the 1D-flame test case: top - homogeneous flame, bottom - heterogeneous flame.	17
2	Flame speed and maximum flame temperature obtained with the one-step chemistry (lines) and compared with the reference complex chemistry curves (circles).	18
3	One-dimensional two-phase flame: comparison between the analytical solution and the calculation. (a) Gas temperature (b) Mass fractions.	18

4	One-dimensional two-phase flame: comparison between the analytical solution and the calculation. (a) Liquid volume fraction (b) Diameter (c) Mass transfer (d) Heat transfer	19
5	Computational domain and mesh of the Sommerfeld configuration.	22
6	View of the instantaneous two-phase flow in the Sommerfeld configuration: vertical plane: liquid axial velocity; horizontal plane: gas axial velocity; isolines: droplet number density.	22
7	Mean axial velocity profiles for the gas phase.	23
8	Mean tangential velocity profiles for the gas phase.	23
9	RMS axial velocity profiles for the gas phase.	24
10	RMS tangential velocity profiles for the gas phase.	24
11	Mean axial velocity profiles for the liquid phase. Numerical simulations use $45 \mu m$ monodisperse droplets.	26
12	Mean tangential velocity profiles for the liquid phase. Numerical simulations use $45 \mu m$ monodisperse droplets.	26
13	RMS axial velocity profiles for the liquid phase. Numerical simulations use $45 \mu m$ monodisperse droplets.	27
14	RMS tangential velocity profiles for the liquid phase. Numerical simulations use $45 \mu m$ monodisperse droplets.	27
15	Axial liquid mass flux. Numerical simulations use $45 \mu m$ monodisperse droplets.	28
16	Normal, radial and tangential injection velocity profiles for the burner configuration: $r^* = r/R_0$ and $u^* = u/U_0$ where R_0 and U_0 are respectively the SI radius and the bulk velocity.	31
17	Geometry sketch : side view	31
18	Geometry sketch : top view	31
19	Chamber geometry	31

20	Mesh view on central plane	31
21	Instantaneous field of volume fraction in the central cutting plane of the chamber, with zero-velocity lines and $n_l = 2n_{inj}$ isoline. . .	32
22	Instantaneous field of droplet diameter in the central cutting plane of the chamber, with equivalence ratio isolines for the values 1 and 10.	32
23	Flame front	34
24	Flame structure visualized by the indexed reaction rate. Black zones correspond to premixed flames and white zones to diffusion flames.	34
25	Precessing Vortex Core.	35
26	Backflow line : transverse cut in plane P1 (Fig 19).	35
27	PVC influence on evaporation and combustion (left). Fields of temperature and isolines of fuel vapor (white lines) and reaction rate (black lines) (right).	35
28	Total (spatially integrated) source term $\dot{\omega}_{spark}$, total heat release $\dot{\omega}_T$, and spatially averaged temperature.	36
29	Flame front propagation on fuel mass fraction field (white: 0 → black: 0.35)	39

List of Tables

1	Set of (6+N) conservation equations, where N is the number of chemical species.	15
2	Flow conditions for the Sommerfeld configuration.	21
3	Flow conditions for the gas turbine configuration.	30

INSTITUT NATIONAL POLYTECHNIQUE DE TOULOUSE

Doctorat d'Université, spécialité *Dynamique des Fluides*

10 octobre 2007

Matthieu BOILEAU

Simulation aux grandes échelles de l'allumage diphasique des foyers aéronautiques

L'allumage ou le rallumage d'une turbine à gaz dans une atmosphère froide et raréfiée est un problème crucial pour les constructeurs aéronautiques. Le but de cette thèse est de développer une méthode de simulation aux grandes échelles (LES) pour étudier la combustion et l'allumage dans les géométries réalistes de foyers aéronautiques. L'approche théorique instationnaire prend en compte les caractéristiques essentielles de ces phénomènes en réalisant le couplage entre les modèles de turbulence, de dispersion du spray de carburant et de combustion. L'outil LES est validé dans des cas académiques puis appliqué à une configuration réaliste de foyer d'hélicoptère comportant 18 secteurs identiques. Le régime stationnaire et la séquence d'allumage d'un secteur isolé sont d'abord analysés. Grâce au calcul massivement parallèle, l'étude est ensuite étendue à l'allumage complet des 18 secteurs, apportant un éclairage nouveau sur la physique du phénomène.

Mots clefs : combustion, turbulence, écoulements diphasiques, allumage, simulation aux grandes échelles, approche Euler-Euler

Centre Européen de Recherche et de Formation Avancée en Calcul Scientifique (CERFACS)
42 avenue Gaspard Coriolis
31057 Toulouse Cedex 1

Large eddy simulation of two-phase ignition in aeronautical combustors

Ignition or re-ignition of a gas turbine engine in a cold and rarified atmosphere is a critical issue for aircraft manufacturers. The objective of this thesis is to develop a large eddy simulation (LES) method to study combustion and ignition in realistic aeronautical combustors. The unsteady theoretical approach includes the main features of these phenomena by coupling models for turbulence, fuel spray dispersion and combustion. The LES tool is validated in academic cases and applied to a realistic helicopter combustor configuration featuring 18 identical sectors. The steady regime and the ignition sequence of a single sector are first analysed. Thanks to massively parallel computing, the study is then extended to the full ignition of the 18 sectors, bringing new insight into the physics of this phenomena.

Keywords : combustion, turbulence, two-phase flows, ignition, large eddy simulation, Euler-Euler approach

Centre Européen de Recherche et de Formation Avancée en Calcul Scientifique (CERFACS)
42 avenue Gaspard Coriolis
31057 Toulouse Cedex 1
France