



**HAL**  
open science

# Simulation et modélisation de la combustion turbulente des écoulements diphasiques

Julien Reveillon

► **To cite this version:**

Julien Reveillon. Simulation et modélisation de la combustion turbulente des écoulements diphasiques. Energie électrique. Université de Rouen, 2004. tel-00475530v2

**HAL Id: tel-00475530**

**<https://theses.hal.science/tel-00475530v2>**

Submitted on 22 Apr 2010

**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.

UNIVERSITE DE ROUEN

Faculté des Sciences - Département de Physique - CORIA - INSA

**HABILITATION A DIRIGER DES RECHERCHES**

présentée par

**Julien Réveillon**

**Maître de Conférences**

**Simulation et modélisation  
de la  
combustion turbulente des écoulements diphasiques**

14 Octobre 2004

*Membres du jury*

Rapporteurs :

M. Champion

Directeur de Recherche CNRS, LCD Poitiers

F. Lacas

Chargé de Recherche CNRS, EM2C Paris

M. Lance

Professeur des Universités, LMFA Lyon

Examineurs :

A. Boukhalfa

Professeur des Universités, INSA Rouen

K.N.C.Bray

Professeur Emérite, Cambridge R.U.

L. Vervisch

Professeur des Universités , INSA Rouen

# Merci . . .

à Michel Champion, François Lacas et Michel Lance pour avoir accepté d'être les rapporteurs de ce travail et aussi à Ken Bray, Mourad Boukhalfa et Luc Vervisch pour avoir participé au jury de soutenance.

aux présents du LMFN : Luc Vervisch, aux cotés de qui j'ai beaucoup appris et compris ; Pascale Domingo, pour nos collaborations, discussions et . . . sa voiture ; Cécile Pera pour son énergie 'revitalisante' ; Abdellah Hadjadj pour être un voisin de bureau si calme et avoir des devises simples : 'mektoub' ; Isabelle qui subit tout ce petit monde, moi compris.

aux anciens du LMFN avec qui j'ai pu collaborer de près ou de loin : Joan Boulanger, Karine Cannevière et Raphal Hauguel. Je leur souhaite bonne chance pour la suite.

à Marc Massot, ancien Lyonnais (MAPLY) et futur Parisien (EM2C) qui mérite bien un paragraphe à lui tout seul pour me donner régulièrement la certitude déprimante qu'il y a bien plus de problèmes amusant à explorer que de temps pour le faire . . .

à Luminita Danaila, F.X. Demoulin, Bruno Renou du CORIA pour nos collaborations en cours et à venir, nos discussions et nos moments de détente. Je me dois aussi d'inclure tous les autres membres du CORIA que je côtoie avec plaisir depuis une dizaine d'années.

à Francine Battaglia (de l'ISU), Corrine Canton-Desmeuze (du CEA), Sébastien Ducruix et Daniel Durox (de EM2C, ECP), Rodney Fox (de l'ISU), Anup Gokarn (de l'ISU), Ronnie Knikker (du CETHIL), Frédérique Laurent (de EM2C, ECP) pour nos collaborations et interactions.

*Ce travail ne serait pas ce qu'il est sans l'aide et le soutien de ma famille et de mes amis. Je tiens particulièrement à remercier ma femme Emmanuelle et mes enfants Elsa et William qui me permettent une remise à zéro des compteurs très régulièrement 'ctrl+alt+supp'. Je n'oublie pas tout le reste de ma famille. Je souhaite aussi que Marc, Marie-Laure, Ysé mais aussi Hervé, Ken et Shirley sachent à quel point leur présence m'est précieuse.*

# Table des matières

<b>I</b>	<b>Introduction</b>	<b>1</b>
I.1	Présentation générale de la thématique . . . . .	1
I.2	Axes de recherche et positionnement de ce travail . . . . .	2
I.3	Les outils numériques . . . . .	5
I.4	Organisation du mémoire . . . . .	7
<b>II</b>	<b>Thèmes de recherche</b>	<b>8</b>
II.1	Introduction . . . . .	8
II.2	Dispersion et évaporation de sprays turbulents . . . . .	9
II.2.1	Description Lagrangienne et Eulérienne des sprays turbulents . . . . .	9
II.2.2	Couplage du spray avec la phase porteuse, topologie de la fraction de mélange . . . . .	21
II.3	Ecoulements diphasiques et transferts de chaleur . . . . .	29
II.3.1	Introduction Générale . . . . .	29
II.3.2	Influence de la dispersion de particules sur les transferts de chaleur . . . . .	30
II.3.3	Impact de l'apparition d'ejecta sur les transferts de chaleurs . . . . .	35
II.4	Ecoulements réactifs . . . . .	38
II.4.1	Richesse de combustion . . . . .	39
II.4.2	Combustion diphasique laminaire prémélangée . . . . .	39
II.4.3	Elaboration d'un diagramme de combustion . . . . .	44
II.4.4	Instabilités de combustion . . . . .	56
II.4.5	Accrochage d'une flamme de diffusion - écoulement gazeux . . . . .	63
II.5	Développement de méthodes et outils numériques . . . . .	68
II.5.1	Schéma de forçage, solveur spectral . . . . .	68
II.5.2	Tabulation de la chimie, application à une oxy-flamme hydrogène-soufre . . . . .	73
II.5.3	Cas particulier: Evaluation d'algorithmes de PIV grâce à la DNS de sprays turbulents . . . . .	77
II.6	Conclusions et perspectives . . . . .	82
II.6.1	Préambule: rappel des travaux de thèse et de post-doctorat . . . . .	82
II.6.2	Conclusion . . . . .	82
II.6.3	Perspectives . . . . .	83
<b>III</b>	<b>Curriculum Vitae, bibliographie, enseignement</b>	<b>89</b>
III.1	Etat civil et cursus . . . . .	89
III.2	Résumé des activités d'enseignement et d'encadrement . . . . .	91
III.3	Interactions avec des laboratoires et organismes extérieurs . . . . .	93
III.4	Activités contractuelles . . . . .	94
III.5	Publications et conférences . . . . .	95



# Curriculum : résumé

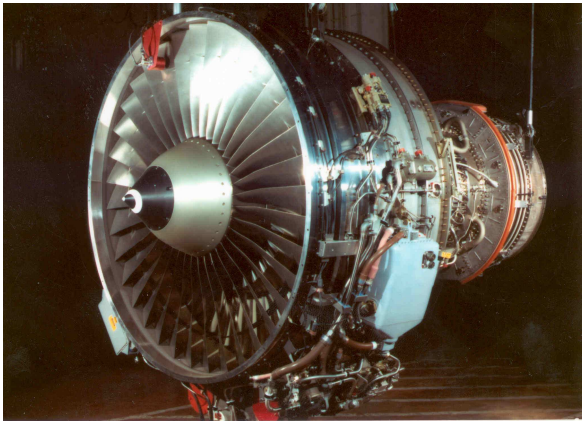
- **Etat Civil et cursus (p. 89).**
  - Statut actuel : Maître de Conférences, 4ème échelon.
  - Date de titularisation : le 1er septembre 1999.
- **Activités de recherche (p. 8).**
  - Dispersion et évaporation de brouillards de gouttes
  - Combustion turbulente mono- et di-phasique
  - Modélisation des écoulements turbulents
  - Développement de méthodes et d'outils numériques
- **Activités d'enseignement (p. 91).**
  - Analyse numérique, mécanique des fluides, modélisation de la turbulence, mécanique générale, transferts de chaleur, formation à des logiciels commerciaux (Fluent, Matlab).
  - Entre 195 h et 205 h (équivalent TD) par an.
- **Activités d'encadrement, de développement et de gestion contractuelle (p. 92).**
  - 6 Encadrements (ou co-encadrement) de thèse et post-doc.
  - 5 Encadrements de DEA
  - 10 Interactions/Collaborations avec des laboratoires et organismes extérieurs
  - 10 Contrats : Gestion et participation
- **Travaux et publications (Page 95).**
  - 13 Publications dans des journaux (+ 2 soumises)
  - 7 Publications dans des ouvrages collectifs dont 4 avec numéros ISBN
  - 28 Colloques avec acte et comité de lecture
  - 6 Colloques sans acte
  - 8 Lectures invitées

# Chapitre I

## Introduction

### I.1 Présentation générale de la thématique

Les systèmes industriels impliquant des phénomènes de combustion (fours, moteurs automobiles ou aéronautiques, turbines à gaz...) sont soumis à des contraintes de plus en plus importantes, tant sur le plan économique (réduction des coûts, amélioration des performances,...) que sur le plan environnemental (réduction des émissions de polluants, des émissions sonores,...). L'ensemble de ces considérations motive de nombreux travaux de recherche liés à la combustion turbulente. En effet, la compréhension, la modélisation et éventuellement le contrôle des phénomènes physiques interagissant au sein d'une chambre de combustion permettent non seulement l'amélioration des systèmes actuels mais aussi le développement de nouvelles technologies performantes et propres.



Dans la majeure partie des cas, ces systèmes sont basés sur la combustion turbulente d'un carburant qui est stocké sous forme liquide puis injecté soit dans une chambre de prévaporisation, soit directement dans

la chambre de combustion. Le combustible liquide est alors dispersé sous la forme d'un nuage de gouttelettes (ou spray) tout en s'évaporant. En fonction des systèmes concernés, la combustion aura lieu soit au milieu du spray soit ultérieurement, au sein de la vapeur de combustible. Suivant les caractéristiques de l'injection (distribution en taille des gouttes, nature du combustible, ...) et celles de la dispersion des gouttes et du mélange de la vapeur du fait de l'environnement turbulent, les propriétés cruciales des phénomènes de combustion (régimes, stabilité, longueur de flamme, hauteur d'accrochage,...) peuvent être très différentes.

L'objectif à long terme des chercheurs est d'être à même de comprendre, de prédire et de contrôler l'ensemble de ces phénomènes. Pour cela, deux voies principales peuvent être explorées : la mesure expérimentale et la modélisation numérique, toutes deux associées au calcul analytique.

Le coût et les difficultés de mesure de certains écoulements ont conduit la communauté scientifique à utiliser la modélisation numérique comme un outil majeur de recherche et de développement. Cependant, si les problèmes de modélisation de la combustion turbulente au sein d'un milieu purement gazeux commencent à être bien connus et, pour la majeure partie d'entre eux, maîtrisés, ce n'est plus du tout le cas lorsqu'une phase liquide évolue au sein de la chambre. L'apparition de termes sources de masse directement liés à la présence de gouttelettes de combustible en cours d'évaporation modifie totalement la topologie de la vapeur de combustible amenée à être brûlée. Contrairement à un écoulement gazeux où un certain équilibre

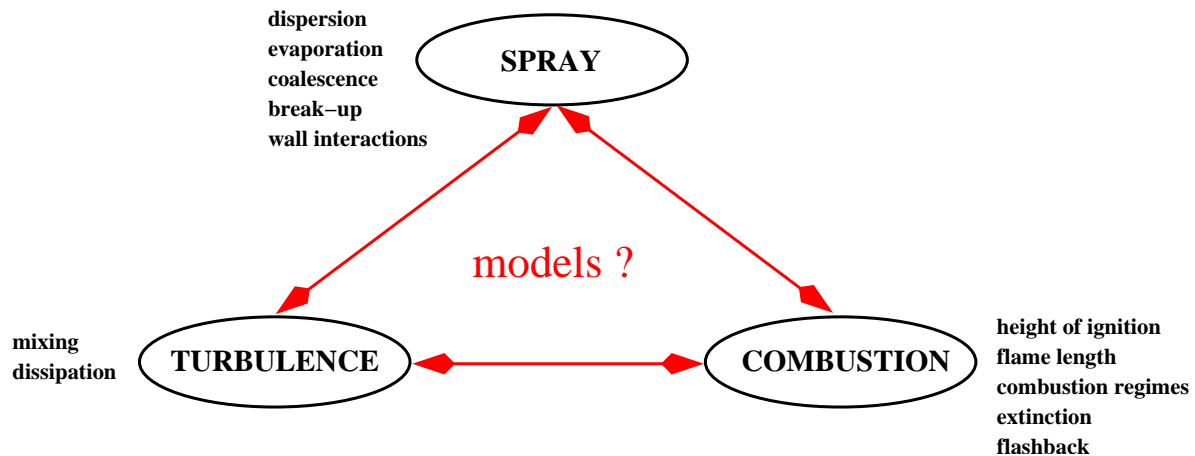


FIG. I.1 – Résumé des interactions spray/combustion/turbulence.

s'établit entre la dissipation scalaire et la création locale de fluctuations à cause des gradients moyens, de nouveaux termes sources non négligeables et très localisés apparaissent [1]. Non seulement ces nouveaux termes nécessitent des fermetures afin d'être correctement pris en compte dans les chambres de combustion mais, de plus, ils modifient sensiblement les termes 'classiques' de production-dissipation, et de distribution au sein de la phase gazeuse nécessitant ainsi le développement de nouveaux modèles.

De même, la présence du spray peut fortement modifier l'écoulement lui-même en augmentant ou en diminuant localement l'énergie cinétique de la turbulence, par exemple, en créant des structures secondaires dans le sillage des gouttes (ou des paquets de gouttes)

ou encore en supprimant certaines gammes de tourbillons [2]. Ces quelques exemples montrent que l'inclusion d'une nouvelle phase liquide au sein d'un gaz modifie considérablement la physique de l'ensemble des écoulements concernés. Les modèles de turbulence, de mélange, de combustion existant peuvent ne plus s'appliquer et, de même, de nouveaux termes apparaissent nécessitant des fermetures. Pour cela, il est nécessaire de comprendre la physique des différents phénomènes, qui ont été résumés dans la figure I.1. Ensuite, il sera possible de déterminer si les modèles existant pour les écoulements gazeux peuvent être étendus aux écoulements diphasiques. Dans le cas contraire, il faudra en développer de nouveaux.

## I.2 Axes de recherche et positionnement de ce travail

Le thème principal de mon travail de recherche porte sur la simulation numérique de la combustion turbulente des écoulements diphasiques. Cependant, j'ai aussi travaillé sur des sujets associés à cette thématique au fur et à mesure des progrès effectués et des difficultés rencontrées. Dans cette partie, un aperçu très général du positionnement de ce travail par rapport aux recherches en cours est présenté. Le détail bibliographique n'est pas donné ici afin de rester succinct mais il pourra être trouvé dans les articles en annexe ou dans le chapitre "Thèmes de recherche" (page 8).

Comme énoncé dans la présentation générale, il est crucial de comprendre et de contrôler l'ensemble des processus physiques se déroulant depuis l'injection du liquide jusqu'aux phénomènes de combustion. Le schéma présenté figure I.2 résume la majeure partie des phénomènes en présence, grâce à quatre intitulés principaux: spray, évaporation, mélange et combustion. Ces thèmes sont à présent exposés avec une description très générale de l'état d'avancement des recherches les concernant et du positionnement du travail présenté dans ce manuscrit. Pour une description bibliographique

plus précise, le lecteur peut se référer à la description des thèmes de recherche du chapitre suivant et aux articles proposés en annexe.

#### Spray :

Afin de simplifier le diagramme, la phase de pulvérisation du liquide n'est pas abordée en détail. Dans un premier temps, il s'agit donc d'être à même de caractériser les propriétés du spray à la fois au niveau de l'injection (distribution de la taille, de la vitesse, de la température du liquide) mais aussi au sein de l'écoulement (interaction gouttes/parois, gouttes/gouttes, etc.). De plus, la taille des gouttes variant au cours de leur existence, leur dynamique au sein de l'écoulement se modifie sensiblement.

#### *Positionnement du travail :*

L'étude de l'évolution d'une phase dispersée au sein d'un écoulement turbulent est un thème de recherche très développé tant au niveau académique qu'au niveau industriel. Cependant, si au niveau industriel, des modèles assez précis de suivi Lagrangien sont généralement utilisés, ces derniers deviennent très vite problématiques dans le cadre d'écoulements instationnaires qui sont de plus en plus abordés avec la simulation des grandes structures. Le coût prohibitif de ces méthodes Lagrangiennes associés aux difficultés de couplage avec une phase porteuse Eulérienne font que de nombreux chercheurs se sont tournés vers le développement d'une description Eulérienne des sprays à partir de l'équation de base développée par Williams [3]. Cependant, la majorité des travaux qui ont été effectués sont, à ce jour, principalement consacrés à la problématique fondamentale de la caractérisation de la dispersion turbulente de sprays mono- ou poly-dispersés constitués de particules solides. Si des modèles efficaces commencent à apparaître, peu d'analyses similaires concernant les sprays en cours d'évaporation ont été effectuées.

Au cours de ce travail, nous avons donc abordé les problèmes de dispersion de gouttes non pas comme une finalité en soit mais sous l'angle de la combustion ultérieure de la vapeur issue du spray. Une description précise de leur position est donc nécessaire afin de capturer la topologie du champ de fraction de mélange. Les gouttes de combustible dispersées par la turbulence ont un diamètre qui diminue et donc une dynamique totalement différente en fonction de leur temps de séjour dans la chambre. Cet aspect, s'il est correctement capturé par les modèles Lagrangiens coûteux en temps, n'a été que très peu abordé avec une vision Eulérienne du spray qui serait particulièrement adéquate pour une mise en œuvre

industrielle des modèles.

Une partie de ce travail se positionne donc particulièrement sur la visualisation Eulérienne de la dispersion de sprays en cours d'évaporation. Ce thème est amont à la phase de combustion, mais absolument indispensable pour une caractérisation complète des chambres de combustion. (voir "Dispersion et évaporation de sprays turbulents", page 9)

#### Evaporation :

Les phénomènes d'évaporation peuvent s'avérer très différents en fonction des propriétés de la phase porteuse. En effet, si le spray est injecté dans une chambre où règnent une température et une pression relativement uniformes, alors les gouttelettes atteindront très vite leur niveau de saturation et s'évaporeront en suivant une loi relativement simple. En revanche, si de fortes variations de la température ou de la pression sont présentes dans la chambre, alors, les lois d'évaporation sont plus complexes et sont propres à chaque goutte de l'écoulement.

#### *Positionnement du travail :*

Une description précise de l'évaporation de gouttelettes de combustible ne génère pas de difficulté particulière. En fonction du degré de précision désiré, soit une loi de réduction linéaire de la surface de la goutte est employée (loi du  $d^2$ ), soit le taux d'évaporation dépend des caractéristiques locales de l'écoulement (pression, température, fraction massique de vapeur) grâce à la loi de saturation de Clausius-Clapeyron. Cette dernière nécessite un plus grand nombre de données, rendant difficile une description Eulérienne du spray car le nombre de dimension de l'espace des phases augmente d'autant. C'est pourquoi, dans nos considérations Eulériennes du spray la loi du  $d^2$  a été employée (voir "Dispersion et évaporation de sprays turbulents", page 9). Cette loi donne de très bons résultats si les gouttes sont injectées dans un milieu où la température demeure uniforme. En revanche dans les simulations impliquant la propagation de flammes dans un spray, nous avons utilisé la loi de saturation à cause des très fortes variations des propriétés locales de la phase porteuse (voir "Ecoulements réactifs", page 38). Cependant, il s'avère que la combustion de sprays dilués, à pression constante, mène à de faibles niveaux de fraction massique de vapeur. C'est pourquoi nous développons actuellement une loi d'évaporation intermédiaire qui ne dépendrait que de la température. Cette loi de saturation simplifiée pourra ainsi être utilisée à la fois par les modèles Lagrangiens et Eulériens pour la combustion de sprays dans des milieux à pression relativement uniforme.

#### Mélange :

Un des phénomènes essentiels au sein de ces chambres de combustion concerne, bien sûr, la turbulence qui agit à tous les niveaux : dispersion du spray, le micro-mélange turbulent, le mélange aux grandes échelles de la vapeur de combustible avec l'oxydant et enfin, le mélange éventuel des gaz brûlés au sein du spray influençant ainsi fortement les phénomènes d'évaporation et d'allumage.

*Positionnement du travail :*

La modélisation du mélange turbulent est l'un des thèmes majeurs de la recherche en combustion mais aussi dans les domaines du génie-chimique ou des procédés. A nouveau, si de nombreuses avancées ont été effectuées au cours des dernières années dans le cadre des écoulements gazeux, très peu de travaux ont été consacrés au mélange d'un combustible gazeux issu de l'évaporation d'un spray avec un oxydant. En effet, le problème se complique fortement du fait de la présence de la phase liquide qui, non seulement s'évapore avec des temps caractéristiques différents en fonction des propriétés locales de l'écoulement mais, de plus, peut modifier les propriétés de la turbulence. Dans ce cadre, la DNS, qui est capable de prendre en compte toutes les structures de l'écoulement est un outil précieux. Les interactions entre le spray et la turbulence ne sont pas prises en compte de nos jours dans les calculs industriels ou expérimentaux d'écoulements diphasiques. Du point de vue de la recherche, seuls un ou deux modèles ont été développés récemment mais ils ne donnaient guère satisfaction. Nous nous sommes donc consacrés dans un premier temps à caractériser l'ordre de grandeur de l'influence de la présence du spray sur le mélange pour réaliser que l'on ne pouvait pas envisager d'utiliser les modèles développés pour les écoulements gazeux sans commettre des erreurs importantes. Dans un deuxième temps, nous avons évalué les modèles de mélange existants et proposé une nouvelle formulation qui donne entière satisfaction. (voir "Couplage du spray avec la phase porteuse, topologie de la fraction de mélange", page 9)

Combustion :

La combustion a lieu avec des propriétés totalement dépendantes des phénomènes présentés ci-dessus. Tous les régimes de combustion (prémélangés, non-prémélangés, partiellement prémélangés) peuvent se rencontrer au sein de la chambre. De plus les problèmes d'extinction ou encore de retour de flamme (ou flashback) au cœur du spray peuvent apparaître. Les interactions entre le spray, les flammes et les ondes acoustiques qui se propagent au sein des chambres de com-

bustion font aussi partie des thèmes inexplorés que nous commençons à étudier.

*Positionnement du travail :*

Tout comme pour le mélange turbulent, la modélisation de la combustion turbulente est un domaine qui a donné lieu à de très nombreuses études depuis quelques dizaines d'années, tout d'abord avec des modèles dédiés à la combustion turbulente prémélangée et non-prémélangée dans les solveurs de type "moyenne de Reynolds" (ou RANS). Ces dernières années ont vu beaucoup d'efforts se porter sur la modélisation de la combustion grâce à des codes de simulation des grandes structures. De plus, de nombreuses avancées ont été effectuées concernant la modélisation de la combustion partiellement prémélangée. Des progrès sont encore nécessaires avant d'obtenir une modélisation correcte de la combustion turbulente mais les problèmes sont, dans leur ensemble, bien connus et un certain nombre de modèles efficaces ont déjà été développés et validés avec succès.

Parallèlement, très peu de travaux ont été consacrés à l'analyse et à la modélisation de la combustion turbulente diphasique. Les difficultés rencontrées rendent la tâche particulièrement ardue tant du point de vue expérimental que numérique. Cependant, certains facteurs montrent qu'il s'agit là de l'un des sujets de recherche qui va être le plus sollicité au niveau industriel (cette thématique apparaît de plus en plus au niveau des projets de recherche en Europe ou aux Etats-Unis). Jusqu'à présent, la modélisation de chambres de combustion impliquant un combustible liquide s'effectuait sous la forme d'un couplage faible où l'aspect spray était dissocié de l'aspect réactif. Un des premiers objectifs des travaux présentés ici a été de montrer que même si les phénomènes réactifs ont lieu après une évaporation totale la phase liquide, la topologie du champ de vapeur de combustible est très différente de celle issue d'une injection gazeuse initiale. Des structures de flamme très particulières peuvent alors apparaître menant à des régimes, et donc à des niveaux moyens de température et de pollution, très spécifiques aux flammes diphasiques.

Pour commencer, nous avons donc travaillé sur un sujet qui n'avait jamais été abordé jusqu'à présent: la structure et le mécanisme de propagation des flammes diphasiques turbulentes (voir "Ecoulements réactifs", page 38). Il s'agit d'une première étape nous permettant d'évaluer les caractéristiques des modèles devant être mis en œuvre afin de capturer toutes les propriétés de base de la combustion de spray. Parallèlement à ce travail, d'autres membres de notre équipe (P. Domingo

*et al.* [4]) ont développé une procédure permettant une modélisation dynamique de la combustion partiellement prémélangée applicable aux flammes dont les régimes de combustion peuvent être localement très variables comme lors de la combustion de sprays. Ce modèle permet de mettre en œuvre, pour les écoulements mul-

tiphases, des calculs réactifs optimisés. L'association des travaux présentés dans ce manuscrit et de ceux développés par P. Domingo permet d'envisager, dans un très proche avenir, la modélisation de la combustion d'écoulements diphasiques complexes.

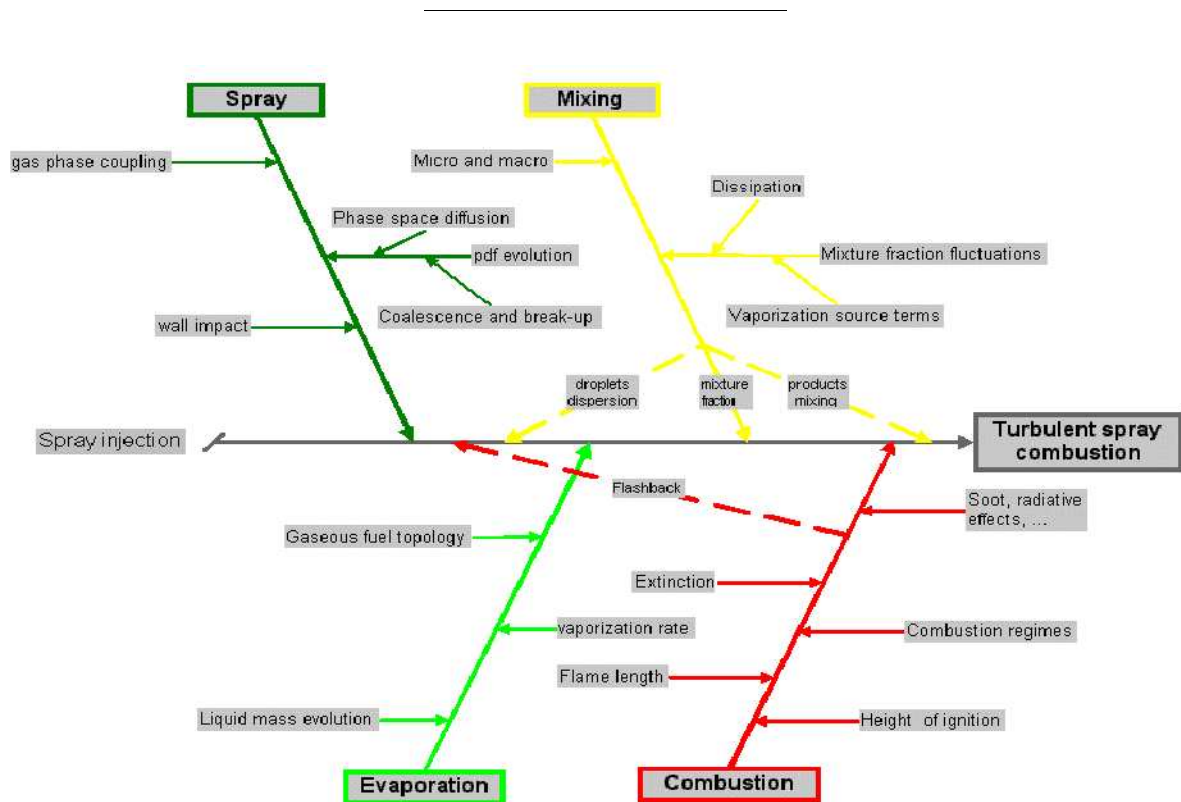


FIG. I.2 – Schéma représentant les étapes d'injection, de dispersion, d'évaporation et de combustion d'un spray dans une chambre de combustion.

### I.3 Les outils numériques

L'objectif de ce manuscrit étant d'aborder la problématique de la combustion des écoulements diphasiques sous un aspect physique plutôt que numérique, le travail de développement d'outils numériques n'est abordé que de manière partielle dans ce manuscrit. En effet, seules les procédures originales, développées spécifiquement pour l'étude de la dispersion et la combustion des sprays sont présentées dans le chapitre "Développement de méthodes et outils numériques",

page 68.

Dans les publications fournies en Annexe certains détails sont précisés. Cependant, il peut être utile de résumer ici les codes et procédures employées. J'ai développé l'ensemble de ces outils au cours de ces dernières années. Pour certains d'entre eux, ce développement rentrait dans le cadre de collaborations avec d'autres équipes de recherche, dans ce cas, leur finalité est mentionnée.

- Dans un premier temps, au cours de mon travail de thèse, j’ai écrit un code de simulation numérique directe à partir des travaux classiques de l’université de Stanford et de ceux de L. Guichard [5]. Le schéma numérique est très précis: un schéma de type PADE d’ordre 6 en espace est associé à un schéma de Runge-Kutta [6] d’ordre 3 en temps afin de résoudre les équations compressibles de Navier-Stokes. Le traitement des conditions aux limites est issu des travaux de Poinso et Lele [7] et, plus récemment de ceux de Baum *et al.* [8] pour les écoulements multi-composants.
- Un code de simulation des grandes échelles pour les écoulements compressibles a été associé à cette structure. Le modèle est basé sur un calcul dynamique (Germano [9], Lilly [10] et Meneveau [11]) des flux énergétiques de sous-maille. Conservant l’intégration en temps de type Runge-Kutta, la dérivée spatiale peut être effectuée à l’ordre 6 ou à l’ordre 2 pour les calculs plus appliqués.
- Ensuite, lors de mon post-doc à l’Université de Cambridge, et au cours de mes premières années en tant que Maître de Conférences, j’ai développé l’ensemble du couplage entre le code de DNS et un solveur Lagrangien permettant la description précise de la dispersion et de l’évaporation d’une phase dispersée. C’est au cours de cette période que j’ai développé la procédure de cinétique chimique à une étape présentée au chapitre “Développement de méthodes et outils numériques”, page 68 afin de pouvoir envisager des calculs “physiques” de propagation de flammes sur toute la gamme de rapport d’équivalence sans que cela ne soit trop prohibitif en temps. Du point de vue du spray, une description classique a été employée avec plusieurs niveaux de couplage possible allant du “one-way” au “two-way” complet: soit les gouttes suivent la dynamique du gaz mais ne l’influencent en rien, soit trois niveaux de couplages et donc d’interactions sont possibles: couplage “vitesse”, “vitesse-masse” ou encore “vitesse-masse-température”. Toutes les propriétés de la phase gazeuse sont interpolées au niveau de la phase dispersée grâce à une méthode d’ordre 3. Chaque goutte est sphérique et indéformable. La température du liquide est uniforme mais variable en temps en fonction du niveau de saturation local. Le taux d’évaporation peut être déterminé avec une loi en  $d^2$  ou, de manière plus précise, avec le calcul de la saturation locale dépendant de la pression, température et fraction massique de vapeur du gaz environnant.
- Plus récemment, j’ai eu l’occasion d’intégrer au solveur la possibilité de résoudre de manière Eulérienne l’évolution de la phase dispersée. Même si dans le cadre de la DNS, cela n’apporte aucune précision supplémentaire, il est ainsi possible de comparer sur des configurations et des calculs identiques des modèles Eulériens avec une résolution Lagrangienne plus précise. Dans le cadre de la combustion de spray, le comportement des modèles Eulériens est encore mal connu et une implémentation dans un solveur DNS ou LES permet une évaluation plus précise des difficultés.
- Il s’est avéré particulièrement difficile de trouver des configurations d’écoulements réactifs mono ou diphasique statistiquement stationnaires. C’est pourquoi, avec Laurent Guichard, au cours de son travail de thèse, nous avons développé une procédure permettant le calcul “propre” d’une turbulence spatialement décroissante. Le détail de la procédure est présenté dans le chapitre “Développement de méthodes et outils numériques”, page 68.
- Un développement plus récent de notre code a été effectué récemment. En effet, dans le cadre des perspectives proches de ce travail, des simulations dynamiques des grandes structures d’écoulements diphasiques sont prévues. Ces calculs doivent avoir lieu dans des géométries de grandes dimensions afin de pouvoir effectuer des comparaisons avec des résultats expérimentaux. Pour cela, une formulation de type “Bas Nombre de Mach” a été développée dans un nouveau solveur. Ce code parallèle est actuellement utilisé par Anup Gokarn, étudiant en thèse de l’Université de l’Iowa dans le cadre d’une collaboration NSF/CNRS. Il est aussi utilisé par Ronnie Knikker et Marc Massot du laboratoire MAPLY de l’Université Lyon-1 pour des calculs de dispersion de sprays dans des jets tri-dimensionnels.
- Pour terminer, Cécile Pera, étudiante en thèse de notre laboratoire est actuellement en train de coupler ce code avec le solveur chimique CHEMKIN afin que l’on puisse effectuer des calculs de combustion diphasique avec une cinétique complexe

dans le cas des configurations les plus rapides à calculer.

## I.4 Organisation du mémoire

Ce mémoire d'habilitation est organisé comme suit. Dans le deuxième chapitre, j'expose en détail les activités de recherche auxquelles je me consacre depuis ma nomination en tant que Maître de Conférences à l'Université de Rouen. Ensuite, dans le troisième chapitre, mon curriculum vitae est présenté : les informations concernant les activités d'enseignement, et d'encadrement y sont résumées. La liste des publications

et conférences est aussi proposée ainsi que les activités contractuelles auxquelles j'ai pu participer.

Dans l'annexe (manuscrit séparé) de ce document, un certain nombre de publications en cours d'évaluation ou déjà publiées sont proposées afin d'illustrer plus en détail certains aspects des activités de recherche présentées dans ce rapport.



## Chapitre II

# Thèmes de recherche

### II.1 Introduction

Comme énoncé dans l'introduction générale, le thème principal de mon travail de recherche porte sur la simulation numérique de la combustion turbulente des écoulements diphasiques. Cependant, j'ai aussi travaillé sur des sujets associés à cette thématique au fur et à mesure des progrès effectués et des difficultés rencontrées.

Ce chapitre se décompose en quatre sections qui résument mes activités concernant les écoulements diphasiques et monophasiques. Dans une première partie, dédiée aux sprays en évaporation au sein d'écoulements turbulents non réactifs, j'aborde les problèmes de la caractérisation et de la modélisation de la dispersion des sprays. Le couplage entre les gouttelettes en évaporation

et l'oxydant porteur est aussi détaillé. Dans la section suivante, les aspects réactifs sont abordés. Le très fort couplage entre les propriétés des gouttes et les flammes issues de leur évaporation est ensuite démontré. Dans ce but, un diagramme permettant de décrire les régimes de combustion des sprays est développé. Le travail portant sur l'ensemble de ces thèmes ne pourrait avoir lieu sans le développement de procédures et de méthodes numériques adaptées. Certaines d'entre elles sont proposées à la fin de ce manuscrit. Le détail des équations et modèles numériques utilisés pourra être retrouvé dans les articles qui sont proposés en annexe.

## II.2 Dispersion et évaporation de sprays turbulents

### II.2.1 Description Lagrangienne et Eulérienne des sprays turbulents

*Les résultats présentés dans cette partie ont été obtenus dans le cadre d'un financement, toujours en cours, du Ministère de la Recherche : le troisième appel d'offre du Comité d'Orientation Supersonique. Il s'agit d'une partie du travail de thèse de Cécile Pera, INSA de ROUEN. De plus, Marc Massot, CNRS (MAPLY, Univ. Lyon I) et Ronnie Knikker (INSA de Lyon) participent au projet. Une partie de ce travail a été effectuée à l'Université de Stanford, Californie. Un premier article a été publié et un autre est en préparation. Le deuxième article cité concerne les méthodes numériques employées pour mener à bien cette étude.*

- REVEILLON J., PÉRA C., MASSOT, M., KNIKKER R., 2004, *Eulerian analysis of the dispersion of evaporating polydispersed sprays in a statistically stationary turbulent flow*, *Journal of Turbulence*, 1, pp 1-27.  
**En annexe de ce document**
- GUICHARD, L., REVEILLON J., HAUGUEL R., 2004, *Direct numerical simulation of statistically stationary one- and two-phase turbulent combustion: a turbulent injection procedure*, *Flow, Turbulence and Combustion*, *Accepté, sous presse.*  
**En annexe de ce document**
- REVEILLON, J., MASSOT, M., PERA, C., 2002, *Analysis and modeling of the dispersion of vaporizing polydispersed sprays in turbulent flows*, *Studying turbulence by using numerical simulation databases IX*, Eds Center for Turbulence Research, Stanford

Dans cette partie, nous nous intéressons aux propriétés d'une phase liquide dispersée au sein d'un oxydant gazeux turbulent et aux problèmes liés à la modélisation mathématique de l'évolution de ce spray.

#### II.2.1.1 Introduction

Une partie de la problématique liée aux écoulements diphasiques peut être visualisée figure II.1 où l'on peut voir un spray issu d'un injecteur. Près de l'injecteur,

nous sommes dans les zones où la densité de liquide est très importante. Puis, au fur et à mesure que les gouttes s'éloignent, elles se dispersent tout en entraînant de l'air ambiant. Très généralement, les travaux dédiés aux écoulements diphasiques se divisent en plusieurs catégories distinctes : les études concernant les nappes liquides, les sprays denses ou encore les travaux se consacrant à la phase liquide loin de l'injecteur lorsqu'elle est dispersée. Cette classification est liée aux très fortes différences dans les phénomènes physiques mis en jeu et, par conséquent, aux techniques de mesure et de calcul. Le travail résumé dans ce rapport d'habilitation est principalement dédié à l'étude de la combustion dans les milieux diphasiques. Or, de manière générale, les phénomènes réactifs apparaissent principalement dans les zones où le spray est déjà dispersé tout en ayant entraîné suffisamment d'oxydant pour une combustion efficace. Il est de même fréquent que la combustion de la vapeur de combustible ait lieu après la disparition de toutes les gouttelettes, loin de l'injecteur. C'est pourquoi, les études décrites au travers de ce manuscrit ont toutes été effectuées dans le cadre de sprays dispersés.

Une des difficultés majeure de la modélisation d'une phase polydispersée (particules de taille variable) est la quantité importante de gouttes et de degrés de libertés pour chacune d'entre elles. Plusieurs descriptions sont envisageables. Initialement, elles se basent toutes sur les caractéristiques suivantes des gouttes : leur position  $x$  (3 degrés de liberté (DL)), leur vitesse  $v$  (3 DL), leur surface  $s$  (1 DL) et leur température  $T$  (1 DL). Capturer le plus précisément possible ces 8 paramètres est nécessaire si l'on veut déterminer correctement l'évolution de la phase liquide ainsi que la topologie du champ de fraction de mélange résultant de l'évaporation. Chacune des millions de gouttes qui forment un spray possède donc ses propriétés propres qui doivent être correctement déterminées. Classiquement, deux formulations sont possibles pour décrire ces sprays. D'une part, les formulations 'Lagrangiennes' suivent l'évolution de chacun de ces huit paramètres ( $x, v, s, T$ ) pour chaque goutte ou groupe de gouttes avec des caractéristiques similaires [12, 13, 14]. D'autre part, les formulations dites 'Eulériennes' sont basées sur la description locale continue d'un second fluide dont

les statistiques représentent celles du spray dispersé. Il s'avère que chaque formulation a ses avantages et inconvénients que nous allons résumer ici. Il est possible de trouver dans [15] une comparaison plus précise.

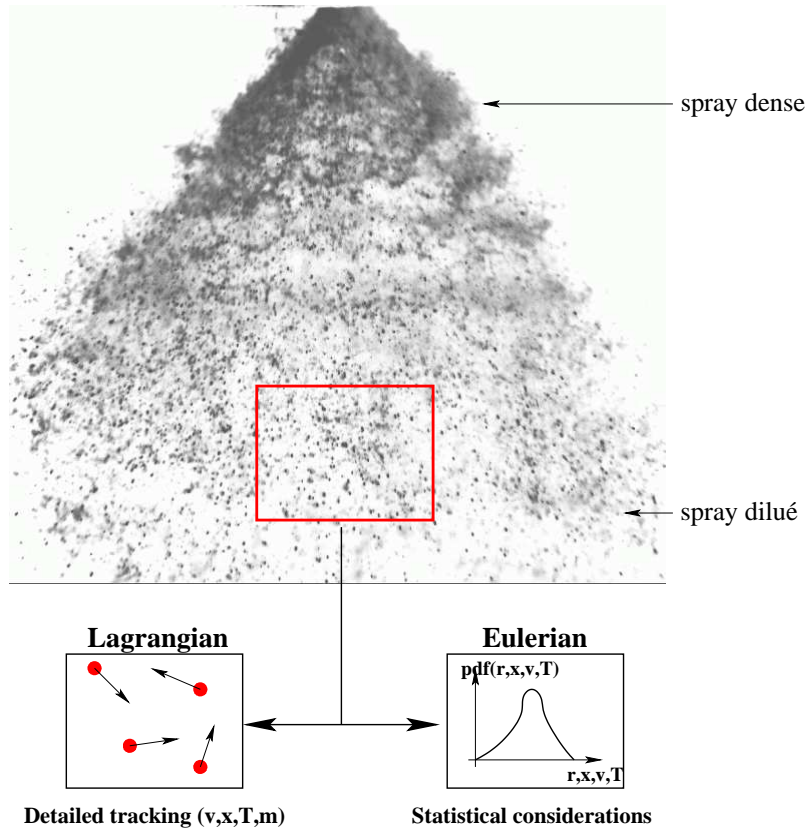


FIG. II.1 – Exemple de la formation d'un spray à la sortie d'un injecteur. Les propriétés du sprays peuvent être suivies grâce à une formulation Lagrangienne ou bien Eulerienne.

Comme nous l'avons évoqué précédemment, la phase liquide peut être dispersée ou dense. Dans le premier cas, l'évolution du spray est contrôlée par les interactions entre les gouttes et la phase porteuse. Dans ce cadre, un modèle Lagrangien basé sur 'la méthode des trajectoires' peut être utilisé afin de d'écrire l'évolution du liquide. Du fait de sa précision, c'est la méthode principale que nous avons retenu dans le cadre de nos simulations numériques directes malgré son coût élevé. Pour chaque goutte, les équations d'évolution suivantes pour la vitesse  $\mathbf{v}$ , la position  $\mathbf{x}$ , la température  $T$  et la masse

$m$  sont donc résolues:

$$\begin{aligned} \frac{d\mathbf{v}}{dt} &= \frac{\mathbf{F}}{m} , \\ \frac{d\mathbf{x}}{dt} &= \mathbf{v} , \\ \frac{dT}{dt} &= \dot{Q} , \\ \frac{dm}{dt} &= -\dot{m} , \end{aligned}$$

avec  $\mathbf{F}$  les forces (principalement la traînée) appliquées à la goutte,  $\dot{Q}$  les transferts de chaleur goutte/phase porteuse,  $L_v$  la chaleur latente d'évaporation et enfin  $\dot{m}$  le

taux massique d'évaporation. Ces équations, simples à résoudre du point de vue numérique sont à multiplier par le nombre de particules suivies.

Si la phase dispersée s'avère être dense, c'est à dire si le temps cinétique (ou temps de réponse) caractéristique des particules est supérieur au temps caractéristique de collision inter-particules, alors les trajectoires des particules seront déterminées plus généralement par une 'méthode des éléments discrets' où chaque élément ou 'paquet' suivi dans l'espace et le temps représente une quantité assez importante de particules 'physiques'. Des équations, assez proches de celles présentées précédemment, doivent être résolues. Cependant les interactions inter-particules doivent aussi être prises en compte.

Ces méthodes Lagrangiennes sont actuellement les plus couramment employées, à la fois pour les études fondamentales, en les associant à des codes de simulation numérique directe [16, 17, 18] et pour les simulations de type expérimentales ou industrielles [19]. En effet, elles ont l'avantage d'être précises et relativement simples à implémenter. Cependant, un certain nombre d'inconvénients qui peuvent parfois être très rédhibitoires existent. Tout d'abord, le coût calcul peut être très important. En effet, par unité de volume, la quantité de particules dans un écoulement diphasique peut facilement atteindre  $10^7 - 10^9$ . D'un point de vue technique, lié aux capacités actuelles des supercalculateurs, il devient très difficile de suivre l'ensemble des échantillons nécessaire à une bonne représentation de l'écoulement. Une autre difficulté provient de la dichotomie entre la représentation Eulérienne de la phase porteuse et le suivi Lagrangien de la phase liquide. En effet, des approximations sont nécessaires afin de pouvoir coupler les deux phases et bien souvent une dispersion numérique apparaîtra du fait de l'utilisation de modèles pour caractériser les phénomènes au niveau de la sous-maille Eulérienne voire de leur non-prise en compte [1]. Une autre difficulté d'ordre technique apparaît lorsque l'on désire effectuer des simulations sur des calculateurs parallèles qui représentent, fort probablement, le futur du calcul numérique. En effet, de manière générale, la géométrie étudiée est décomposée en sous-domaines affectés à chacun des processeurs du calculateur. Chaque processeur a la charge d'effectuer l'avancement en temps du sous-domaine qui lui est propre tout en communiquant l'état de ses frontières avec ses voisins. Dans le cadre de la simulation Lagrangienne d'une phase liquide, la charge en parallèle de chacun des processeurs peut s'avérer très non-homogène surtout pour

les écoulements instationnaires alors qu'il peut être difficile de prévoir les fluctuations de densité locale de particules. Dans ce cas, une forte concentration, même très provisoire, de gouttes sur un petit groupe de processeurs réduira fortement les performances du calcul. Une grande partie des difficultés évoquées ici peut être évitée en utilisant une représentation Eulérienne de la phase liquide.

Williams[3] a écrit l'équation généralisée de la fonction de distribution  $f(t, v, x, T, m)$  décrivant la densité volumique de gouttes dans l'espace des phases à tout instant  $t$ :

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \nabla_x \cdot (\mathbf{v}f) + \frac{\partial \dot{m}f}{\partial m} + \nabla_v \cdot (\mathbf{F}f) + \frac{\partial \dot{Q}f}{\partial T} = \Gamma \quad , \quad (\text{II.1})$$

avec  $\Gamma$ , l'opérateur intégral de collision permettant la prise en compte de la coalescence ou de la fragmentation ([20] et références citées). Cette équation représente l'évolution de paramètres dans un espace à huit dimensions. Techniquement, elle ne peut être résolue de manière directe [13] en suivant un schéma Eulérien classique car le coût calcul et l'espace mémoire qui seraient nécessaires dépassent largement les capacités des super-calculateurs actuels. Il est donc nécessaire de réduire les dimensions de l'espace des phases avant de pouvoir envisager sa résolution numérique. Pour cela les méthodes de moments ont été développées et deux grandes familles peuvent être différenciées. La méthode la plus classique est nommée méthode 'bi-fluides'. Elle consiste à réduire, dans l'espace des phases, la description complète du spray donnée par l'équation II.1 selon les directions décrivant la vitesse, la masse et la température des gouttes afin de retrouver un système de description de la phase liquide uniquement selon les trois directions de l'espace physique, similaires à la description Eulérienne de la phase porteuse à laquelle elle sera couplée. Les informations de vitesse, de taille et de température qui ont ainsi été supprimées de la description générale seront estimées par l'intermédiaire d'une modélisation de leurs moments d'ordre 1 et 2. Cette méthode permet d'obtenir un système Eulérien à trois dimensions décrivant l'évolution d'un fluide. Du point de vue numérique sa mise en œuvre est classique avec un très fort potentiel d'optimisation et une grande rapidité d'exécution. Cependant, du point de vue de la combustion des sprays, la disparition d'un certain nombre d'informations telles la description précise de la dynamique des gouttes en fonction de leur taille ainsi que leur taux d'évaporation en fonction des ca-

ractéristiques locales de la phase porteuse peut faire craindre une mauvaise évaluation de la topologie du champ de fraction de mélange issue de l'évaporation du spray et ultérieurement une mauvaise estimation des taux et des régimes de combustion. Une seconde méthode, plus récente, a la capacité de prendre en compte la dynamique des particules en fonction de leur taille. Il s'agit de la méthode 'multi-fluide' [21] qui

est une évolution de la méthode sectionnelle développée par Greenberg [22]. A la base, cette méthode consiste aussi à intégrer un certain nombre d'informations de l'espace des phases. Cependant, l'information concernant la géométrie des particules (masse ou surface, etc.) est préservée. Cette direction de l'espace des phases est alors discrétisée. La résolution de l'équation du spray s'effectue alors dans un espace à 4 dimensions:  $(x, m)$ .

---

Comme nous venons de l'évoquer, pour un coût élevé, les modèles Lagrangiens sont les plus à même de décrire avec précision la dispersion et l'évaporation de sprays dans les écoulements turbulents. Couplé avec un code Eulérien de simulation numérique directe pour décrire la phase porteuse, nous avons alors l'outil plus précis possible nous permettant de décrire les

écoulements diphasiques turbulents, dans la limite, bien sûr, des capacités numériques des deux solveurs.

Ce couplage DNS/modèle Lagrangien, que nous avons développé au cours des dernières années va nous permettre, dans un premier temps, d'évaluer la capacité des descriptions Eulériennes à capturer les propriétés dynamiques fondamentales des gouttes en évaporation.

### II.2.1.2 Configuration de l'étude

De nombreux travaux ont été consacrés au développement d'outils pour l'analyse Eulérienne de la dispersion turbulente de particules ayant à la fois une taille fixée et des scalaires passifs, avec tout d'abord le papier clef de Taylor [23], et les références [24, 25, 26, 27, 28, 29]. Le lecteur peut se référer au récent article de Mashayek [30] qui a passé en revue le domaine. Le problème a également été abordé numériquement dans de nombreux articles (voir par exemple [30, 31, 32] et leurs références), cependant, peu d'articles [33, 17] ont été consacrés à l'évaporation de sprays polydispersés et presque aucun aux écoulements turbulents non-uniformes [28]. Du point de vue de la DNS, quelques simulations complexes avec des modèles de sprays détaillés prenant en compte l'évaporation et même la combustion ont déjà été réalisées dans des écoulements soit homogènes [18, 1] ou cisailés [34, 35, 36]. Cependant, analyser les champs résultants d'un point de vue Eulérien n'était pas le but de ces articles.

Cette vue Eulérienne est le sujet de ce travail. Toutefois, un problème important est le choix d'une configuration, qui soit assez proche de quelques cas réalistes pour imiter leur comportement tout en restant relativement simple, et, de plus, qui soit favorable aux simulations numériques directes, à l'analyse et à la modélisation. Dans cette étude, nous avons choisi une

configuration de turbulence de grille ou "Turbulence Spatialement Décroissante" (TSD) pour la phase porteuse gazeuse. Plusieurs sprays monodispersés (quatre nombres de Stokes initiaux différents) sont injectés en "équilibre thermique" avec l'écoulement environnant. Un couplage one-way est utilisé dans ce travail donc le gaz ne subit pas la traînée des particules. Du fait de l'interaction entre l'évaporation et la turbulence, le spray devient polydispersé selon la direction longitudinale.

Cette configuration a été choisie pour trois raisons. Tout d'abord, elle est non-homogène dans la direction longitudinale, ce qui permet une évolution spatiale des statistiques stationnaires. De plus, une analogie plus réaliste avec les écoulements expérimentaux ou industriels peut être réalisée. Deuxièmement, l'évolution d'une goutte insérée dans un écoulement turbulent peut être décomposée en deux séquences: premièrement, la goutte a besoin d'un temps pour adapter ses caractéristiques aux propriétés de l'écoulement (vitesse moyenne, température, ...) avant une étape de "transition" où elle subit les fluctuations locales de l'écoulement. Le choix a été fait de considérer les gouttes après leur période d'adaptation afin de tenir compte des seuls effets des fluctuations turbulentes de l'écoulement sur la dispersion du spray. La troisième raison, comme cela a déjà été mentionné, est de four-

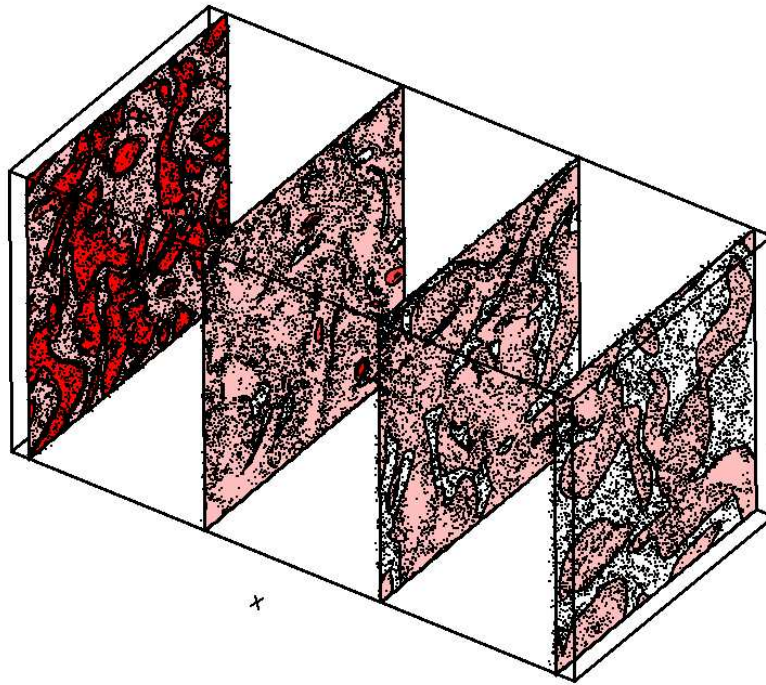


FIG. II.2 – Configuration de la turbulence spatialement décroissante. Iso-couleurs: vorticité, points: gouttelettes.

nir un bon cas test où les propriétés Eulérienne du spray sont extraites, afin d'indiquer quel type de modèle Eulérien devrait être utilisé. Nous avons donc décidé de nous concentrer sur les lois simplifiées d'évaporation et le couplage one-way pour isoler les phénomènes physiques principaux devant être capturés par une description Eulérienne qui seraient, autrement, cachés par l'intrication des nombreux couplages se produisant avec des modèles plus complexes. Des écoulements inertes sont utilisés dans ce travail, ce qui conduit à une température de gaz quasiment constante dans l'ensemble du domaine. Ainsi, les gouttes injectées maintiennent leur température de saturation à un niveau constant et la loi du  $d^2$  (évolution linéaire de la surface de la goutte avec le temps) peut être utilisée pour décrire l'évolution temporelle de la surface de la goutte qui, par définition, décroît linéairement avec le temps. Généralement, la zone de forte activité chimique dans les flammes sprays

est située assez près de la zone d'injection et de vaporisation, nous ne considérons donc pas les phénomènes de coalescence et de dissolution comme dans [20], ni leur couplage avec la combustion [37, 38] pour l'instant.

Les propriétés de la phase gazeuse restent les mêmes pour toutes les simulations. En revanche, vis à vis de la phase liquide, quatre configurations ont été réalisées. Elles sont basées sur des nombres de Stokes initiaux différents :  $St = 0.03$  (**T0**),  $St = 0.14$  (**T1**),  $St = 0.39$  (**T2**) et  $St = 1.95$  (**T3**). Le temps d'évaporation moyen est le même dans les quatre cas. La vitesse moyenne de l'écoulement étant constante, il est possible de définir  $l_v$ , distance moyenne parcourue par les gouttes avant qu'elles ne s'évaporent. Ainsi, les gouttes subissent les mêmes événements liés à l'écoulement turbulent, et ce, quel que soit leur nombre de Stokes. Seule la réponse à cet événement va changer.

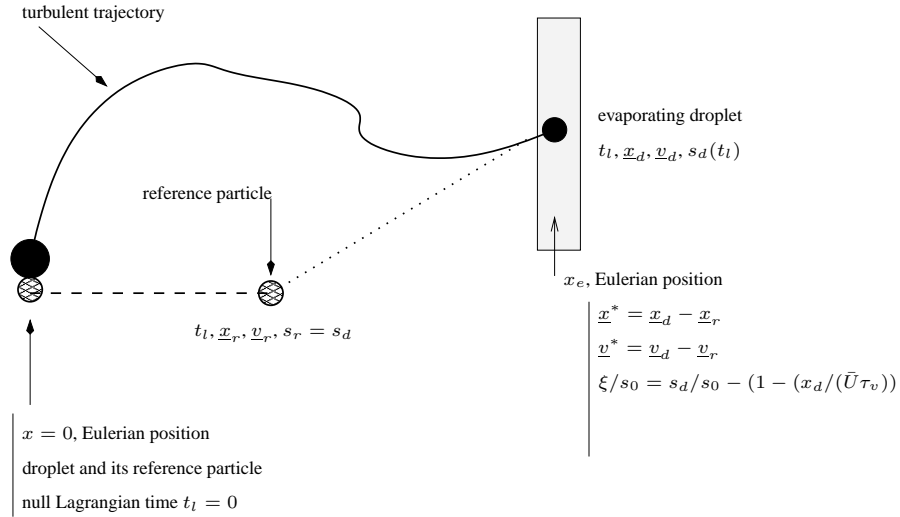


FIG. II.3 – Scénario de l'évaporation et de la dispersion d'une goutte subissant la turbulence. Cette dernière est représentée avec sa goutte de référence (qui ne voit que l'écoulement moyen) correspondante. La différence de position  $\underline{x}^*$  et de vitesse  $\underline{v}^*$  entre les deux nous permet de caractériser les effets de la dispersion. Pour étudier la diffusion de la géométrie d'une gouttelette dans l'espace des phases, la différence de surface  $\xi$  entre la goutte suivie et une goutte qui serait à la même position sans subir les effets de la turbulence est effectuée.

### II.2.1.3 Considérations statistiques

L'étude de la dispersion de gouttes dans une turbulence spatialement décroissante (TSD) nécessite de définir quelques nouveaux paramètres. D'abord, nous devons souligner la différence entre l'instant Eulerien absolu, considéré pour effectuer les simulations de la phase gazeuse, et le temps Lagrangien individuel affecté à chaque gouttelette avec une valeur initiale égale à zéro quand elle est injectée dans le domaine. Contrairement à la dispersion de spray dans une turbulence homogène isotrope où les temps Eulerien et Lagrangien sont identiques, les gouttes sont injectées régulièrement dans la TSD, ce qui conduit à un large éventail de temps Lagrangien. Par conséquent, un suivi individuel a été implémenté pour chaque goutte de l'écoulement (fig. II.3). Dès qu'une gouttelette est injectée et qu'elle commence à s'évaporer, elle est associée à une particule de référence dont les propriétés initiales (position,

diamètre, taux d'évaporation constant, temps Lagrangien nul) sont identiques. La particule de référence se déplace à la vitesse longitudinale moyenne du gaz tandis que la goutte correspondante subit les fluctuations de l'écoulement. En étudiant statistiquement la différence de position et de vitesse entre la goutte réelle et sa "référence", les effets de la turbulence sur la dispersion sont analysés. Pour chaque goutte, nous définissons donc le temps Lagrangien, la position, la vitesse et la surface ( $t_l, \underline{x}_d, \underline{v}_d, s_d(t_l)$ ) et une particule de référence ( $t_l, \underline{x}_r, \underline{v}_r, s_r = s_d$ ) qui suit la vitesse moyenne de l'écoulement. Les statistiques de la dispersion sont alors déduites des paramètres suivants :  $\underline{x}^* = \underline{x}_d - \underline{x}_r$ ,  $\underline{v}^* = \underline{v}_d - \underline{v}_r$  et  $\xi/s_0 = s_d/s_0 - (1 - x_d/(\tau_v \bar{U}))$  où  $\xi$  est la surface relative entre la goutte suivie et une goutte qui serait à la même position sans subir la turbulence.

### II.2.1.4 Polydispersion du spray

### Dispersion spatiale

La figure PII.1.a-a montre un exemple d'évolution d'une PDF jointe:  $P(x, s)$  qui décrit les statistiques couplées de la position longitudinale  $x$  et de la surface  $s$  des gouttes. Cela nous permet d'observer les effets joints de l'évaporation et de la turbulence sur le spray injecté. Les profils de  $P(x, s)$  selon la direction  $x$  pour des surfaces fixées  $s_j$  montrent (fig. PII.1.a-c) une dispersion Gaussienne symétrique des gouttes autour de la position de référence  $x_j^*/l_v = (1 - s_j/s_0)$ , correspondant à la position de la goutte avec la même surface  $s_j$  (ou même temps Lagrangien) mais qui ne subit pas la turbulence. Cette symétrie montre que, pour une taille de goutte donnée, la dispersion turbulente en amont et en aval est identique.

De la même façon, un étalement de la surface de goutte peut être observée (fig. PII.1.a-b) pour une position longitudinale donnée  $x_i$ . Cependant, dans ce cas, la dispersion n'est pas symétrique autour de la position de référence. En effet, la gamme de dispersion augmente proportionnellement avec la diminution de la surface des gouttes. Ainsi, à une position  $x_i$  donnée, selon la direction longitudinale, il est naturel de trouver une plus petite gamme de dispersion pour les grosses gouttes ( $s > s_j^*$  or  $\xi > 0$ ) dont la durée de vie dans le domaine est moins importante. Elles se sont donc moins dispersées que les petites gouttes ( $s < s_j^*$  or  $\xi < 0$ ).

### Dispersion en vitesse

Examinons la PDF  $P(v_1^*)$  (fig. PII.1.b), correspondant aux fluctuations de vitesse longitudinales

#### II.2.1.5 Statistiques conditionnées par la surface

Le spray, qui est initialement monodispersé, subit les effets de l'évaporation et du mélange turbulent des gouttes. Ces deux phénomènes conduisent à une polydispersion dans les directions  $x$  et  $s$  de l'espace des phases. Dans le cadre de sprays en évaporation il est important de capturer la dynamique des gouttes en fonction de leur taille afin d'obtenir un champ correct de fraction de mélange. Nous nous sommes donc intéressés à la dynamique des gouttes en fonction de leur taille.

La figure PII.2.b-1 montre, pour une position longitudinale donnée, la PDF jointe  $P(v_1, s)$  qui représente les statistiques couplées de la dispersion de la vitesse des gouttes et de leur surface. La forme générale de

des gouttes par rapport à la vitesse moyenne  $\bar{U}$  de l'écoulement de gaz. Comme nous le verrons par la suite, une distinction doit être faite entre la vitesse moyenne de la phase gazeuse et la vitesse moyenne de la particule. Pour commencer, les statistiques de  $v_1^*$  ont été effectuées, pour toutes les gouttes, sans distinction de taille et une dispersion de forme Gaussienne a été observée, ce qui est un résultat classique (fig. PII.1.b). Ce résultat est confirmé figure PII.1.c où les moments normalisés d'ordre 3 et 4 de la dispersion  $v_1^*$  ont été représentés en fonction de la direction longitudinale. Pour une fonction Gaussienne analytique, ces deux paramètres normalisés [39], sont exactement égaux à 0 et 3 respectivement. Dans nos simulations, ces deux moments restent près de ces valeurs analytiques. De plus, les courbes Gaussiennes sont centrées en  $v_1^* = 0$ , la vitesse moyenne des gouttes est donc égale à la vitesse moyenne de l'écoulement.

L'énergie  $\sigma$  des particules a été déterminée pour chaque position longitudinale et comparée, figure PII.2.a, à l'énergie cinétique turbulente du gaz. Comme prévu, nous observons un comportement qui dépend du nombre de Stokes des gouttes. Les gouttes les plus légères (**T0**) avec un faible nombre de Stokes suivent de très près les fluctuations de la turbulence de la phase porteuse. Dès que le nombre de Stokes initial des gouttes est grand (**T1** et **T2**), l'inertie des gouttes augmente de façon significative et elles ne capturent plus toutes les fluctuations de la phase porteuse. Cependant, quand les gouttes s'évaporent, leur taille et donc leur inertie décroissent. Par conséquent, leur énergie cinétique rejoint celle du gaz environnant.

cette PDF est similaire pour toute position longitudinale. Deux points fondamentaux ont pu être démontrés. Tout d'abord, les vitesses moyennes des gouttes dépendent de leur surface pour une position Eulérienne  $x$  donnée. Si  $\xi > 0$ , alors la surface des gouttes est plus grande que celle de référence. Ainsi, ces gouttes se déplacent plus rapidement que l'écoulement moyen. De la même manière, les gouttes telles que  $\xi < 0$  vont plus lentement.

La vitesse moyenne conditionnée étant connue, il est à présent intéressant de se focaliser sur la dispersion de la vitesse des gouttes autour de cette moyenne. Les reconstructions Gaussiennes autour de cette valeur



moyenne ont été effectuées. Les iso-contours présumés sont représentés figure PII.2.b-1 (contours en pointillés) et sont très proches voire confondus avec les niveaux de dispersion provenant de la DNS (contours en traits pleins). Il apparaît donc que même en considérant la dispersion comme une fonction de la surface des gouttes, elle suit une loi Gaussienne, ce qui est un avantage certain pour le développement de modèles. Ce comportement Gaussien a aussi été confirmé par les moments conditionnés d'ordre 3 et 4. Cependant, un point important à noter est que ce comportement Gaussien est vrai uniquement autour de la vitesse moyenne conditionnée des particules et non pas autour de la vitesse moyenne locale de l'écoulement gazeux, les deux étant distincts.

Maintenant que nous avons une idée de l'évolution générale de l'énergie des gouttes conditionnée par leur surface, il est intéressant de la comparer avec l'énergie cinétique turbulente de la phase gazeuse environnante. Ce point est un problème majeur dans le développement de modèles Eulériens pour les écoulements dispersés [29, 30]. En effet, être capable de capturer l'énergie de la phase porteuse vue par les gouttes, couplé à la connaissance du temps de corrélation associé, peut aider au développement d'une famille de modèles de dispersion Eulériens pour les sprays [29].

Sur les figures PII.2.b-(2,3), deux PDF jointes  $P(v_1, s)$  et  $P(u_s, s)$  ont été représentées pour deux configurations : **T0** et **T3**.  $P(u_s, s)du_s ds$  est la probabilité de trouver une goutte avec une surface  $s$  dont le gaz environnant est convecté à la vitesse  $u_s$ . Si, dans une configuration de gouttes légères (**T0**, fig. PII.2.b-é),  $P(v_1, s)$  et  $P(u_s, s)$  sont confondues, ce n'est pas le cas pour la configuration avec des gouttes lourdes (**T3**). En effet, dans ce cas, les deux PDF sont claire-

ment distinctes (traits pleins et pointillés, fig. PII.2.b-3. C'est essentiellement la partie du haut des deux PDF, représentant les grosses gouttes, qui sont différentes. La forme de la PDF  $P(u_s, s)$  tend à être centrée autour d'une valeur de la vitesse moyenne normalisée de la phase gazeuse qui est égale à 1 (pointillés, fig. PII.2.b). Cependant, dès que les gouttes s'évaporent, leurs vitesses atteignent les valeurs vues par la phase gazeuse environnante.

Il s'avère que si les gouttes sont trop lourdes pour suivre l'agitation du gaz, elles atteignent un niveau constant d'énergie d'agitation  $\sigma$  quelle que soit l'énergie du gaz environnant  $k_s$ . Une représentation appropriée de cette corrélation peut être déduite en traçant le rapport  $\sigma/k_s$  en fonction du nombre de Stokes. Le schéma figure PII.3.a-1 représente la forme générale de la courbe qu'il est possible de présumer. Un rapport unitaire constant est donc observé pour les faibles nombres de Stokes. Ensuite, quand  $St$  atteint une valeur limite, une décroissance du rapport  $\sigma/k_s$  est observée mais avec une pente constante comme cela est confirmé par l'exemple figure PII.3.a-2 issu de la DNS.

Grâce aux simulations DNS, nous sommes capables de déterminer une évolution générale de l'énergie cinétique des gouttes comparée à l'énergie de l'écoulement vue par les gouttes par rapport à leurs nombres de Stokes qui varient. Pour un nombre de Stokes plus petit que 0.4 les gouttes subissent la totalité de l'énergie cinétique de l'écoulement. Si  $St > 0.4$ , le rapport  $\sigma/k_s$  décroît linéairement avec l'augmentation du nombre de Stokes. Ce comportement simple peut être un avantage pour le développement de modèles Eulériens.

### II.2.1.6 Évaluation du modèle Eulérien multi-fluide

Le fait que la dispersion turbulente du spray est un phénomène conditionné par la taille des gouttes est parfaitement en accord avec les travaux de Laurent et Massot [21]. C'est pourquoi, en collaboration avec Marc Massot du laboratoire de Mathématiques appliquées de Lyon, nous avons utilisés l'ensemble des résultats de la DNS pour évaluer la capacité du modèle Eulérien multi-fluide à suivre la dynamique des gouttes en cours d'évaporation dans le cas de la configuration de turbulence spatialement décroissante présentée ci-dessus.

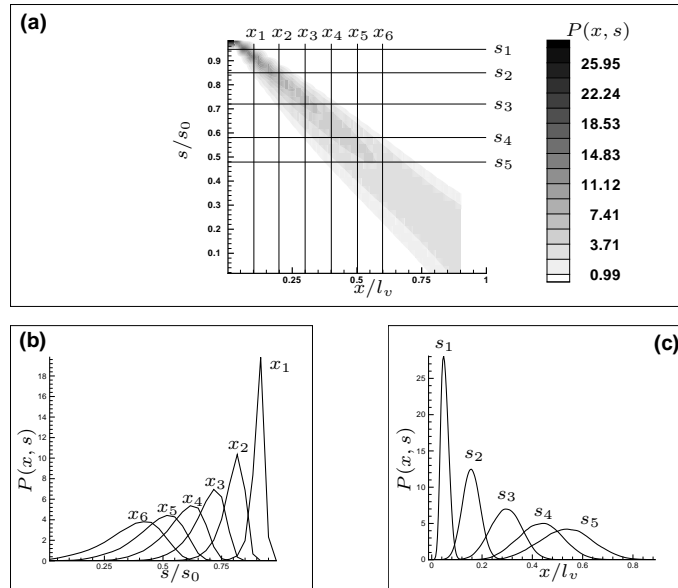
La description détaillée du modèle multi-fluide peut être trouvée dans [21] c'est pourquoi, seuls les résultats

de ce modèle comparés avec les simulations numériques directes que nous avons menées à bien sont présentés brièvement. Le suivi Eulérien de trois paramètres conditionnés par la surface a été effectué: le nombre de gouttes, leur vitesse moyenne et enfin leur énergie.

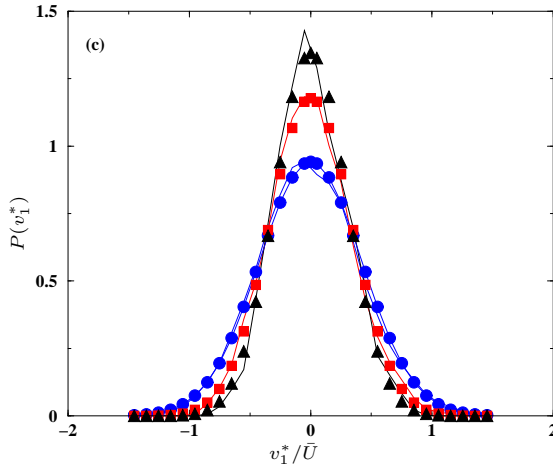
Comme le montre la figure PII.3.b, il s'avère que le modèle multi-fluide Eulérien est capable de capturer correctement l'évolution d'un spray polydispersé en cours d'évaporation. C'est un résultat très prometteur pour la modélisation de configurations complexes telles que les chambres de combustion.

**Conclusion:**

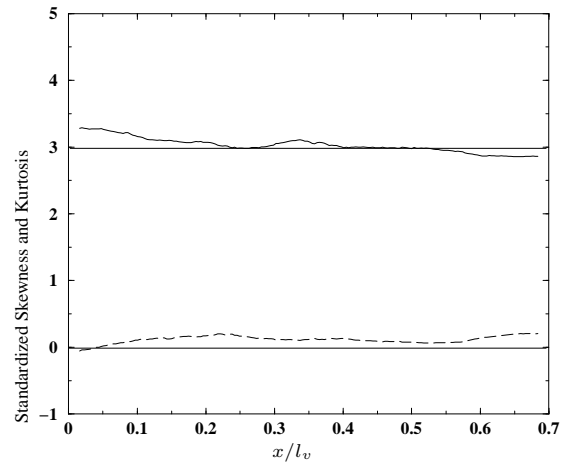
Au cours de ce travail, nous nous sommes intéressés aux processus de dispersion de spray dans une turbulence spatialement décroissante. Dans un premier temps, des résultats classiques ont été vérifiés avec, entre autres, la dépendance de l'énergie cinétique des gouttes avec leur nombre de Stokes ainsi que le comportement global de dispersion qui s'avère être Gaussien autour des propriétés moyennes de l'écoulement. Dans un deuxième temps, une analyse du comportement des gouttes en fonction de leur taille a été effectuée. Dans ce cadre, des différences significatives de comportement en fonction de la classe des gouttes ont pu être observées. Il s'avère que les gouttes, en fonction de leur taille, conservent un comportement dispersif Gaussien mais non pas autour de la vitesse moyenne de l'écoulement mais autour de la vitesse conditionnée moyenne des gouttes. Une autre série d'analyse, qui n'a pas été détaillée ici, a permis de décrire les caractéristiques du gaz vues par les gouttes. Une dépendance assez simple en fonction du nombre de Stokes a pu être établie. De même une évaluation des capacités du modèle multifluide Eulérien à capturer la cinétique des gouttes en cours d'évaporation a pu être effectuée grâce aux bases de données développées ici.



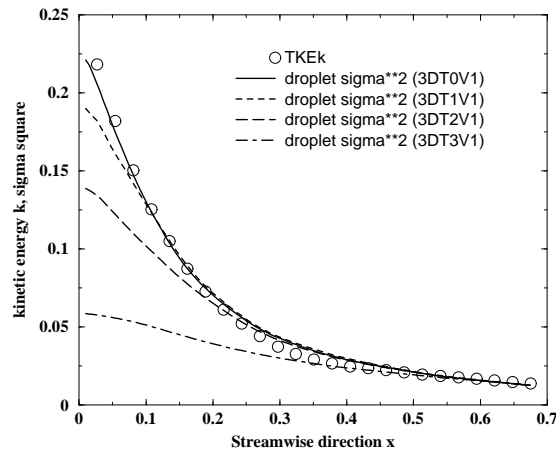
PII.1.a - Iso-contours (haut) et profils (bas, gauche et droite) de la PDF  $P(x, s)$ . Un comportement similaire est observé dans l'ensemble des simulations. Les profils sont tracés selon  $s$  (en bas à droite) et  $x$  (en bas à gauche) pour différentes positions indiquées sur la figure du haut.  $x_1/l_v = 0.09$ ,  $x_2/l_v = 0.20$ ,  $x_3/l_v = 0.30$ ,  $x_4/l_v = 0.41$ ,  $x_5/l_v = 0.52$ ,  $x_6/l_v = 0.62$ , et  $s_1/s_0 = 0.95$ ,  $s_2/s_0 = 0.85$ ,  $s_3/s_0 = 0.72$ ,  $s_4/s_0 = 0.58$ ,  $s_5/s_0 = 0.48$



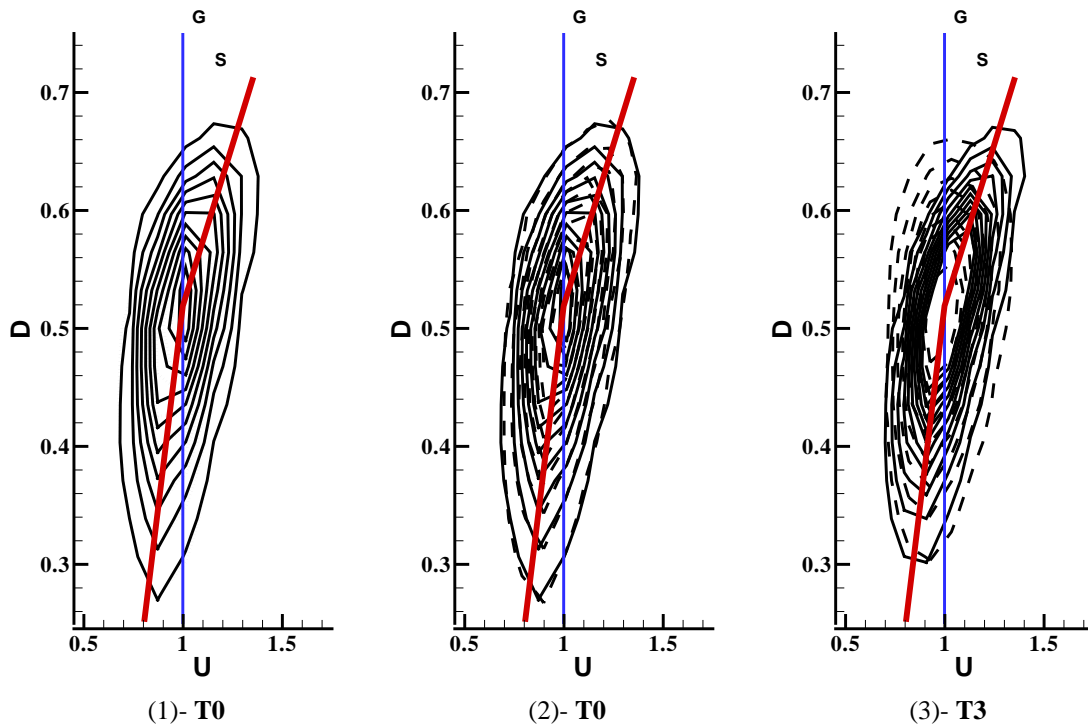
PII.1.b - Trois profils de  $P(v_1^*)$  pour trois positions longitudinales, traits : DNS, symboles : reconstruction Gaussienne correspondante. Un comportement similaire est observé dans l'ensemble des simulations. Cas **T0**.



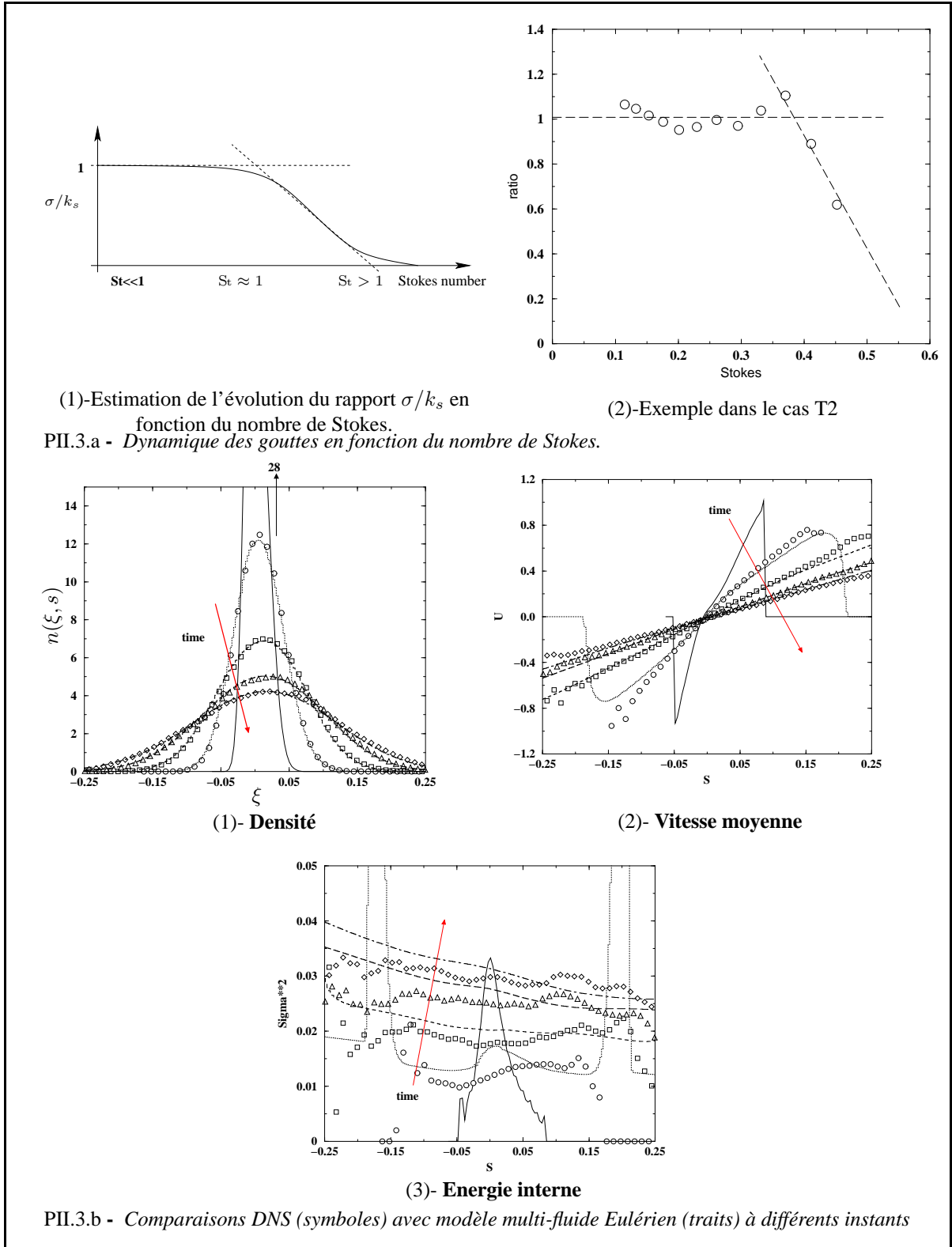
PII.1.c - Représentation des statistiques des moments normalisés d'ordre 3 (tirets) et d'ordre 4 (trait) de la vitesse relative des gouttes ( $v_1^* = v_1 - \bar{U}$ ) selon la direction longitudinale  $x$ . Cas **T0**.



PII.2.a - Comparaison de l'évolution longitudinale de l'énergie  $\sigma$  des gouttes avec l'énergie cinétique turbulente du gaz. Cercles : énergie cinétique turbulente gazeuse  $k$ .



PII.2.b - Comparaisons de la fonction de dispersion du spray  $P(v_1, s)$  (traits noirs), déterminée dans un plan transversal, avec (a) une fonction de dispersion de forme Gaussienne (pointillés) et (b,c) la fonction de dispersion  $P(u_s, s)$  de la vitesse de l'écoulement vu par les gouttes (tirets)



## II.2.2 Couplage du spray avec la phase porteuse, topologie de la fraction de mélange

Des travaux préliminaires au sujet présenté ici ont été effectués pour des modèles de type RANS dans le cadre de deux contrats pour EDF et la SNECMA. Cette étude avait été initiée au cours d'un séjour à l'Université de Stanford durant l'été 1998. Les résultats LES présentés dans cette partie ont été obtenus dans le cadre d'un contrat Européen: 'MUSCLES', toujours en cours. Il s'agit d'une partie du travail de thèse de Cécile Pera, INSA de ROUEN. De plus, Luc Vervish (CORIA, INSA de ROUEN) et Pascale Domingo (CNRS, CORIA) participent au projet. Un article est en cours de préparation pour les résultats présentés dans ce chapitre.

- REVEILLON, J., VERVISCH, L., 1998, Accounting for spray vaporization in turbulent combustion modeling, *Studying turbulence by using numerical simulation databases VII*, Eds Center for Turbulence Research, Stanford
- REVEILLON, J., VERVISCH, L., 2000, Accounting for spray vaporization in non-premixed turbulent combustion modeling: A single droplet model (sdm), *Combustion and Flame*, 121(1/2):75–90.

**En annexe de ce document**

Au delà de la recherche du meilleur modèle permettant de décrire correctement la dynamique de la dispersion des gouttes en cours d'évaporation, l'interaction locale de ces gouttes avec la phase gazeuse est en elle-même un problème particulièrement important. Et notamment le couplage dit 'massique', lorsque le spray s'évapore au sein de la phase porteuse.

$$\frac{\partial \bar{\rho} \tilde{Z}}{\partial t} + \frac{\partial \bar{\rho} \tilde{u}_i \tilde{Z}}{\partial x_i} = \frac{\partial}{\partial x_i} \left( \bar{\rho} D \frac{\partial \tilde{Z}}{\partial x_i} \right) - \frac{\partial}{\partial x_i} \left( \bar{\rho} (\tilde{u}_i \tilde{Z} - \tilde{u}_i \tilde{Z}) \right) + \bar{\rho} \tilde{W}_v \quad (\text{II.2})$$

où  $\bar{\rho} \tilde{W}_v$  est le taux d'évaporation filtré rapporté à un maillage Eulérien. La répartition des termes sources Lagrangien au niveau de la description Eulérienne de l'écoulement est un problème à part entière dans l'étude de la modélisation des sprays. En effet, il est très difficile de reconstruire l'historique du couplage au sein de la sous-maille entre l'instant où la vapeur de combustible quitte la surface de la goutte et l'instant où les positions

La modélisation de la combustion non-prémélangée ou partiellement prémélangée dans des milieux purement gazeux s'effectue généralement grâce à des scalaires conservatifs: la fraction de mélange  $Z$  et le gradient de la fraction de mélange  $|\nabla Z|$  qui permettent de paramétrer la flamme dans les études analytiques [40].  $Z$  est un scalaire inerte permettant de décrire le taux de mélange entre le fuel et l'oxydant avec  $Z = 0$  dans de l'oxydant pur et  $Z = 1$  dans le fuel pur. Dans la majeure partie des modèles, les propriétés du mélange sont décrites par  $\tilde{Z}$  la valeur filtrée (ou moyennée en RANS) de  $Z$  et pondérée par la masse telle que  $\tilde{Z} = \bar{\rho} Z / \bar{\rho}$  et par  $\tilde{Z}_v$  le taux de fluctuation (ou la variance) du mélange. Le taux de dissipation  $\bar{\rho} \chi = 2\bar{\rho} D |\nabla Z''|$  est aussi introduit afin de déterminer le temps de mélange  $\tau_Z = \tilde{Z}_v / \tilde{\chi}$  [41]. Cette démarche est identique quelle que soit l'approche utilisée: soit la résolution des équations moyennes de la mécanique des fluides (ou RANS pour Reynolds Averaged Navier-Stokes equations) soit la simulation des équations instantanées filtrées de Navier-Stokes avec l'utilisation d'un modèle pour décrire les effets des petites structures de la turbulence (ou LES pour Large Eddy Simulation) au niveau de la sous-maille.

Cependant, dans le cadre de la dispersion de sprays en cours d'évaporation, on ne peut plus raisonner en terme de scalaire inerte car des termes sources massiques apparaissent au sein des équations de transport de  $\tilde{Z}$  et  $\tilde{Z}_v$ . En considérant un formalisme de type simulation des grandes échelles ou LES, les équations d'évolution de ces deux paramètres clefs pour la modélisation des termes réactifs peuvent être développées. Pour la fraction de mélange, nous avons :

Eulériennes des nœuds reçoivent l'information. Dans le cadre des simulations DNS effectuées dans ce travail, le volume des mailles reste petit et une répartition instantanée des termes sources sur les nœuds environnants est mise en œuvre au prorata de la distance des nœuds à la goutte (méthode PSI-CELL [42]).

Concernant la variance de la fraction de mélange, il est possible de dériver l'équation d'évolution suivante:

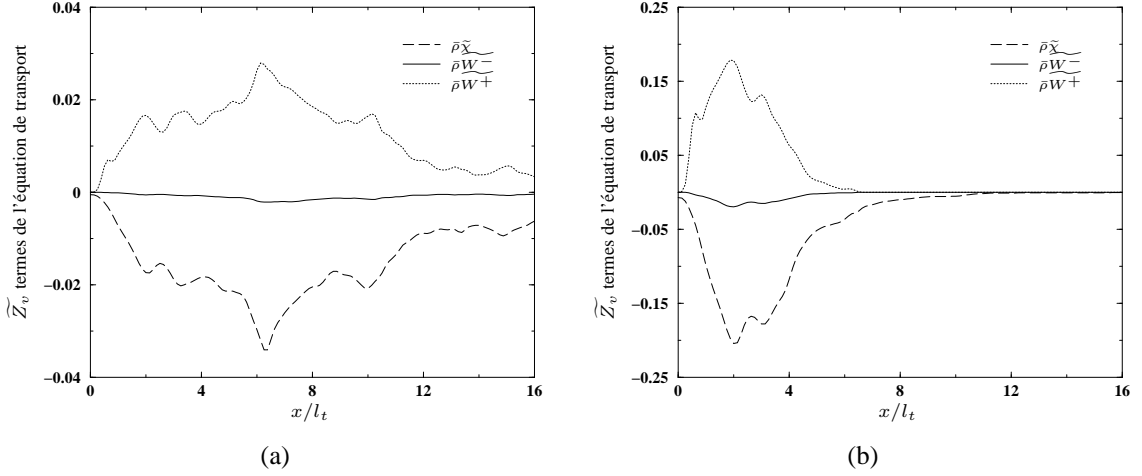


FIG. II.4 – Evolution spatiale du taux de dissipation  $\tilde{\chi}$  (tirets) et des termes sources  $\tilde{W}^+$  (ligne pointillée) et  $\tilde{W}^-$  (ligne continue). Figure (a) : évaporation lente, figure (b) : évaporation rapide.

$$\begin{aligned}
 \frac{\partial \tilde{\rho} \tilde{Z}_v}{\partial t} + \frac{\partial \tilde{\rho} \tilde{u}_i \tilde{Z}_v}{\partial x_i} &= \frac{\partial}{\partial x_i} \left( \tilde{\rho} D \frac{\partial \tilde{Z}_v}{\partial x_i} \right) + 2 \tilde{\rho} D \frac{\partial \tilde{Z}}{\partial x_i} \frac{\partial \tilde{Z}}{\partial x_i} \\
 &- \underbrace{2 \tilde{\rho} D \frac{\partial \tilde{Z}}{\partial x_i} \frac{\partial \tilde{Z}}{\partial x_i}}_{\text{dissipation } \tilde{\rho} \tilde{\chi}} - \underbrace{\frac{\partial}{\partial x_i} \left( \tilde{\rho} (\tilde{u}_i \tilde{Z}^2 - \tilde{u}_i \tilde{Z}^2) \right)}_{\text{transport (I)}} + \underbrace{2 \tilde{Z} \frac{\partial}{\partial x_i} \left( \tilde{\rho} (\tilde{u}_i \tilde{Z} - \tilde{u}_i \tilde{Z}) \right)}_{\text{transport (II)}} \\
 &+ \underbrace{2 \tilde{\rho} (\tilde{Z} \tilde{W}_v - \tilde{Z} \tilde{W}_v)}_{\text{terme source évaporation } (\tilde{\rho} \tilde{W}^+)} - \underbrace{\tilde{\rho} (\tilde{Z}^2 \tilde{W}_v - \tilde{Z}^2 \tilde{W}_v)}_{\text{terme source évaporation } (\tilde{\rho} \tilde{W}^-)},
 \end{aligned} \tag{II.3}$$

dans laquelle cinq termes non-fermés apparaissent : la partie non-résolue de la dissipation, deux termes de transports, et deux termes directement liés à l'évaporation du spray. Les termes de dissipation et de transport sont également présents pour des écoulements purement gazeux. Dans ce cadre, des fermetures ont déjà été développées. En revanche, si les nouveaux termes sources  $\tilde{W}^+$  et  $\tilde{W}^-$  apparaissant dans l'équation II.3 ne sont pas négligeables comparés aux autres termes, ils nécessiteront une fermeture.

Dans un premier temps, il s'agit donc d'évaluer, grâce à la simulation numérique directe, l'ordre de grandeur des nouveaux termes sources qui sont présents dans l'équation II.3. Une deuxième étape concerne la modélisation de cette équation : tout d'abord nous de-

vons proposer et évaluer des fermetures éventuelles des termes  $\tilde{W}^+$  et  $\tilde{W}^-$ . Cependant, hormis l'apparition de ces termes sources, les gouttes peuvent aussi influencer l'ensemble des autres phénomènes non-fermés et en particulier la dissipation qui est l'un des termes clefs de l'équation d'évolution de  $\tilde{Z}_v$ . En effet, l'évaporation de gouttes ou de groupes de gouttes provoque localement de fortes modifications du gradient de la fraction de mélange, et donc de la dissipation. Si de nombreux modèles existent déjà pour ce terme, ils ont été développés dans le cadre de mélanges monophasiques. Il faut donc évaluer les performances de ces modèles pour des écoulements diphasiques et éventuellement les adapter.

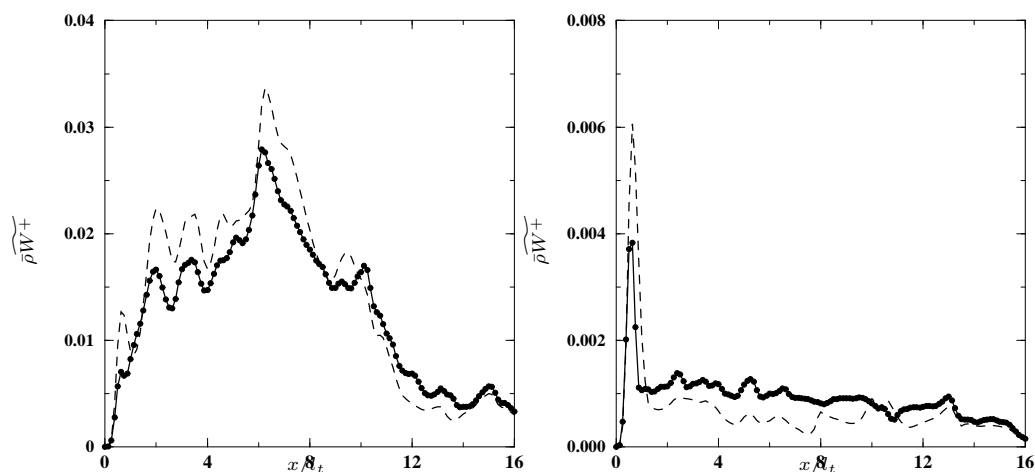


FIG. II.5 – Evaluation du modèle pour le terme source massique,  $\widetilde{W}^+$ . Symboles : données DNS, modèle : tirets. Gauche : évaporation lente, droite : évaporation rapide

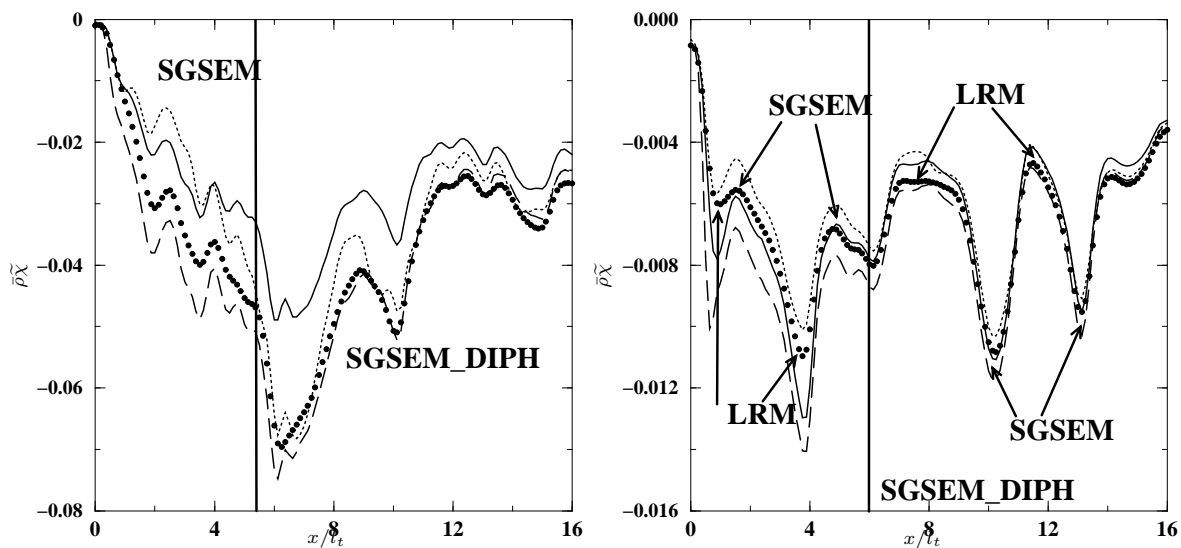


FIG. II.6 – Comparaison des modèles permettant la détermination du taux de dissipation de sous-maille:  $\widetilde{\chi}$ . Symboles : données DNS, pointillés : modèle LRM, ligne continue : SGSEM, tirets : SGSEM-DIPH. Gauche : évaporation lente, droite : gouttes légères.



### II.2.2.1 Ordre de grandeur des termes sources

Afin d'effectuer ces analyses, l'outil DNS été utilisé de nouveau. La configuration tridimensionnelle reste donc une turbulence spatialement décroissante similaire à celle utilisée lors de l'étude de la dispersion Eulerienne de spray (fig. II.2). Les résultats qui vont être présentés par la suite ont été normalisés par les paramètres de la turbulence et notamment  $l_t$ , l'échelle intégrale et  $\tau_t$ , le temps de retournement des tourbillons. Lors de cette étude, à la fois, le temps d'évaporation  $\tau_v$  des gouttes et leur temps cinétique  $\tau_p$  ont été modifiés afin de développer une base de données qui comprenne de nombreux cas physiques différents. Un résumé des principaux résultats est présenté ici.

La planche PII.4. (page 28) présente des contours des principales variables de l'écoulement et du mélange: la vorticit , le champ de fraction de m lange  $Z$ , le champ de la variance de sous-maille correspondante  $Z_v$

### II.2.2.2 Evaluation des mod les de sous-maille

Deux possibilit s s'offrent   nous afin d'estimer la variance de sous-maille de la fraction de m lange  $\widetilde{Z}_v$ . Tout d'abord, il est possible d'envisager une d termination globale des caract ristiques de la sous-maille en fonction du champ r solu: il s'agit du mod le de similarit  des  chelles. Une deuxi me solution consiste   r soudre l' quation d' volution de  $\widetilde{Z}_v$  (eq. II.3) avec les fermetures ad quates pour les termes non-ferm s. Quelle que soit la m thode employ e, il est n cessaire de d terminer le taux de dissipation. En effet,  $\chi$  est un param tre d'entr e fondamental pour tout mod le de combustion bas  sur des biblioth ques de flammelettes mais il est aussi un des termes pr pond rant de l' quation II.3.

#### Mod le de similarit  des  chelles ( $\widetilde{Z}_v$ )

Historiquement, il s'agit du premier mod le permettant de d terminer l'ordre de grandeur de la variance de sous-maille de la fraction de m lange. Il a  t  propos  par Cook et Riley en 1994 [43] qui ont adapt  le principe de similarit s des  chelles (les plus petites des  chelles r solues de la turbulence sont fortement corr l es aux plus grandes des  chelles non-r solues) au transport scalaire. La d termination de la variance de sous-maille

et enfin, la position des gouttes en cours d' vaporation. Afin de bien visualiser les effets tridimensionnels, des coupes longitudinales et transversales ont  t  effectu es. Si, du point de vue de la mod lisation, le champ filtr  de fraction de m lange  $\widetilde{Z}$  ne pose pas de difficult s particuli res, cela n'est pas le cas pour  $\widetilde{Z}_v$ .

Si l'on observe figure II.4 l'ordre de grandeur des trois termes suivants: la dissipation  $\widetilde{\chi}$ , les termes sources massiques  $\widetilde{W}^+$  et  $\widetilde{W}^-$ , il s'av re que le nouveau terme source  $\widetilde{W}^+$ , li    l' vaporation du spray au sein de la phase porteuse, est du m me ordre de grandeur que le terme de dissipation  $\widetilde{\chi}$ . Il n'est donc absolument pas n gligeable et un mod le doit  tre utilis  pour prendre en compte ses effets sur la variance de sous-maille. En revanche, dans la configuration utilis e pour cette  tude, il est possible d'observer que le terme  $\widetilde{W}^-$  reste tr s petit et peut  tre n glig .

sera effectu e gr ce   la relation :

$$\widetilde{Z}_v = \widetilde{Z}\widetilde{Z} - \widetilde{Z}\widetilde{Z} \simeq C_S \left[ \widehat{\widetilde{Z}\widetilde{Z}} - \widehat{\widetilde{Z}}\widehat{\widetilde{Z}} \right], \quad (\text{II.4})$$

o   $C_S$  est une constante non-dynamique devant  tre ajust e. Ce mod le a  t  employ  avec succ s dans le cas d' coulements monophasiques tels la turbulence homog ne isotrope [44], des flammes jets non-pr m lang es [45] ou encore des feux de nappe [46]. R cemment, Jimenez *et al* [47] ont montr  que  $C_S$  d pendait en fait : du nombre de Reynolds, du rapport de taille entre le filtre dynamique appliqu    l' coulement r solu, du filtre de sous-maille implicite d termin  par la taille du maillage LES et enfin du degr  de r solution des grandes structures par rapport   la taille du filtre de sous-maille. Les auteurs insistent sur le fait que le mod le de similarit  des  chelles doit  tre uniquement utilis  dans les cas d' coulements   fort Reynolds dont le spectre de turbulence est bien d velopp . Effectivement, il s'av re que si l'on tente d'appliquer ce mod le dans le cadre des bases de donn es diphasiques d velopp es par la DNS, les r sultats ne sont gu re encourageants. En effet, si les valeurs optimales de  $C_S$  sont connues pour les  coulements purement gazeux, ce n'est plus le cas pour les  coulements diphasiques o  des s gr gations locales de gouttes apparaissent alors que le mod le ne peut s'y adapter.

L'un des intérêts majeurs de la simulation aux grandes échelles des écoulements turbulents est la capacité d'introduire une détermination dynamique des coefficients des modèles. C'est pourquoi, Cook [48] a mené une étude afin de déterminer la constante  $C_S$  en fonction des propriétés résolues de l'écoulement. Il s'agit néanmoins d'une tâche déjà difficile dans les cas monophasiques qui nécessiterait d'être développée dans les cas diphasiques. Pierce et Moin [49] ont proposé une solution alternative qui consiste à poser :

$$\widetilde{Z}_v = C_Z \Delta^2 |\nabla \widetilde{Z}|^2, \quad (\text{II.5})$$

avec  $\Delta$  la taille du filtre de sous-maille et  $C_Z$  une constante dynamique déterminée de manière classique avec des tenseurs résolus [50, 51]. Dans le cas d'un écoulement diphasique avec présence de termes sources, la relation suivante est proposée :

$$\widetilde{Z}_v = C_{zs} \left( C_Z \Delta^2 |\nabla \widetilde{Z}|^2 + \frac{\widetilde{W}}{C_s |\widetilde{S}|} \right), \quad (\text{II.6})$$

avec  $C_s$ , le coefficient de Smagorinsky,  $|\widetilde{S}|$  le terme de cisaillement résolu [50, 51] et un nouveau coefficient dynamique  $C_{zs}$ . La présence des gouttes en cours d'évaporation se traduit par le terme  $\widetilde{W} = \widetilde{W}^+ + \widetilde{W}^-$ , directement issu de l'équation de transport II.3.

L'évaluation de ces modèles ne donne pas de bons résultats. En effet, les modèles de similarité des échelles ne parviennent pas à capturer les particularités des écoulements diphasiques. De plus, la correction suggérée par [49] permettant d'inclure les termes sources chimiques n'est pas suffisante et une erreur d'un facteur 2 à 3 peut être obtenue sur la détermination de  $\widetilde{Z}_v$ .

Ces difficultés à utiliser les modèles de similarité des échelles pour les écoulements diphasiques sont certainement intrinsèques au principe du modèle. En effet, ces modèles se basent uniquement sur les propriétés locales de la turbulence sans prendre réellement en compte la présence de la phase liquide qui peut, pour un même écoulement turbulent, modifier du tout au tout la topologie de la fraction de mélange en fonction de la taille et de la densité des gouttes. La solution idéale pour calculer  $\widetilde{Z}_v$  semble être de s'élever à un degré supérieur de description en résolvant son équation de transport II.3. Pour cela, deux termes principaux doivent être fermés: le terme source majoritaire  $\widetilde{W}^+$  lié à l'évaporation des gouttes et le terme de dissipation  $\widetilde{\chi}$ .

### Fermeture du terme source: $\widetilde{W}^+$

Comme nous l'avons vu figure II.4, il est nécessaire de trouver une fermeture pour le terme  $\rho \widetilde{W}^+$ . La difficulté est de réussir à exprimer le terme de corrélation de sous maille entre la fraction de mélange et le taux d'évaporation:  $\widetilde{Z} \widetilde{W}_v$  comme nous pouvons le voir dans l'équation II.3. Ces deux variables sont liées à la dispersion des gouttes mais de manière différente. En effet,  $\widetilde{W}_v$  traduit directement le taux d'évaporation local des gouttes qui est réparti dans la phase gazeuse. La fraction de mélange  $Z$  en est issu. Cependant, le mélange turbulent, d'une part, et l'inertie des gouttes, d'autre part, peuvent modifier fortement les corrélations entre les deux paramètres. Le terme  $\widetilde{Z} \widetilde{W}_v$  est donc une conséquence directe des effets de croisement de trajectoire entre le fluide porteur et les gouttes. Des gouttes très légères qui suivent toutes les fluctuations de vitesse de l'écoulement mèneront à une forte corrélation entre  $Z$  et  $\widetilde{W}_v$ . Cependant, si le nombre de Stokes des gouttes devient important, ce ne sera plus le cas.

Nous avons développé une première fermeture ce terme appelée SDM pour Single Droplet Modeling. Ce modèle est présenté dans le papier appelé "*Spray Vaporization in Nonpremixed Turbulent Combustion Modeling: A Single Droplet Model*" et présenté en annexe de ce manuscrit. Cependant le modèle SDM, pour fonctionner de manière adéquate, nécessite la présence initiale d'une petite quantité de combustible gazeux ce qui n'est pas le cas dans la configuration détaillée ici. Un nouveau modèle inspiré d'un papier de Hollman et Gutheil [52] a donc été développé. Nous proposons de décomposer le terme  $\widetilde{Z} \widetilde{W}_v$  en un terme pleinement corrélé et un terme décorrélé. Il s'agit ensuite d'ajuster le taux de corrélation entre les deux. Nous avons donc :

$$\widetilde{Z} \widetilde{W}_v = \underbrace{\alpha_c \widetilde{W}_v \frac{\widetilde{Z}^2}{\widetilde{Z}}}_{\text{terme correle}} + \underbrace{(1 - \alpha_c) (\widetilde{Z} \widetilde{W}_v)}_{\text{terme non-correle}} \quad (\text{II.7})$$

Si  $Z$  et  $\widetilde{W}_v$  sont totalement indépendants l'un de l'autre alors le coefficient de corrélation est nul  $\alpha_c = 0$  et  $\widetilde{Z} \widetilde{W}_v = \widetilde{Z} \widetilde{W}_v$ . Dans le cas contraire,  $\alpha_c$  est supérieur à 0 et un terme de corrélation intervient. Il est possible de déterminer dynamiquement le coefficient de corrélation  $\alpha_c$  afin de rendre le modèle compatible avec les caractéristiques locales de l'écoulement.

La figure II.5 (page 23) montre une bonne évaluation du terme source de masse de l'équation pour la variance

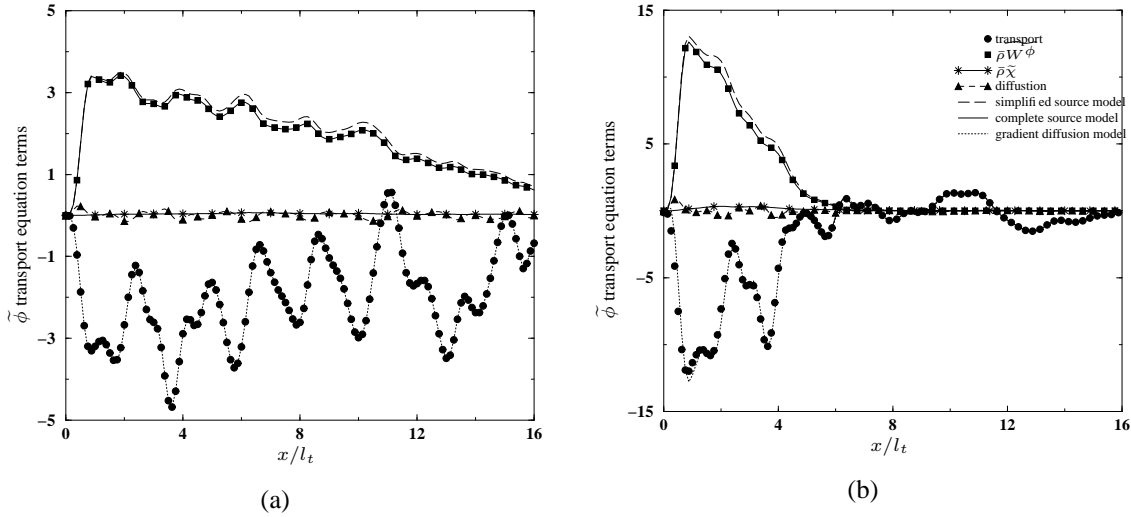


FIG. II.7 – Evolution spatiale des différents termes de l'équation d'évolution de  $\tilde{\Phi} = \tilde{Z}(1 - \tilde{Z})$ . Symboles: DNS, lignes: modèles. figure (a): évaporation lente, figure (b): évaporation rapide.

de la fraction de mélange. Et ce, à la fois pour les gouttes inertielles ou non. Cette fermeture, associée à une estimation correcte du taux de dissipation de sous-maille nous permet de résoudre complètement l'équation de transport pour la variance de sous-maille  $Z_v$  en utilisant des fermetures classiques pour les termes de transports locaux.

#### Estimation du taux de dissipation: $\chi$

Dans un premier temps, il est possible d'envisager d'adapter un modèle très classique dans le cadre de simulations RANS. Il s'agit du modèle de relaxation linéaire (LRM) qui permet d'estimer le taux de dissipation à partir du temps de mélange local grâce à la relation:

$$\tilde{\chi} = \tilde{Z}_v / \tilde{\tau}_Z \quad (\text{II.8})$$

Jimenez *et al* [53] ont suggéré de considérer  $\tilde{\tau}_Z$  proportionnel à  $\tilde{k}/\tilde{\varepsilon}$  et d'utiliser le modèle dynamique de Smagorinsky associé à celui de Yoshizawa [54] pour la détermination de l'énergie cinétique de sous-maille dans un écoulement compressible.

Une seconde possibilité proposée par Pierce et Moin [49] consiste à supposer que les échelles de sous-maille sont en équilibre local avec les grandes échelles. Ainsi,

la production et la dissipation au sein de la maille seront considérées comme égales. Dans ce cas, à partir de l'équation II.3 il est possible de dériver le modèle d'équilibre de sous-maille (SGSEM) dans le cas d'un écoulement monophasique :

$$\bar{\rho}\tilde{\chi} = 2\bar{\rho}D|\nabla\tilde{Z}|^2 = 2\bar{\rho}(D + D_T)|\nabla\tilde{Z}|^2, \quad (\text{II.9})$$

ou le modèle (SGSEM-DIPH) dans le cas diphasique:

$$\bar{\rho}\tilde{\chi} = 2\bar{\rho}(D + D_T)|\nabla\tilde{Z}|^2 + \bar{\rho}\tilde{W}. \quad (\text{II.10})$$

avec  $D$  et  $D_T$  les coefficients de diffusion laminaire et turbulent.  $D_T$  est déterminé par une méthode dynamique classique [50, 51].

Grâce aux simulations DNS que nous avons effectuées, il est possible d'estimer de manière a-priori les qualités de ces différents modèles. La figure II.6 montre deux exemples d'évaluation des modèles avec pour chacun des deux cas, un temps d'évaporation identique mais une inertie différente pour les gouttes. Il s'avère que sur l'ensemble de l'étude qui a été effectuée, le modèle de Pierce et Moin [49] étendu au cas diphasique: SGSEM-DIP est celui qui donne les meilleurs résultats.

#### II.2.2.3 Nouvelle piste: le facteur de mélange

L'équation d'évolution de  $\widetilde{Z}_v$  implique de nombreux termes non-fermés qu'il peut parfois être difficiles de modéliser. De plus même si chaque modèle se comporte très bien individuellement, les accumulations d'erreur ne garantissent pas forcément de meilleurs résultats que l'hypothèse de similarité des échelles même si nous avons montré que dans le cas de sprays en évaporation elle n'est guère performante. Une solution simple et performante existe. Elle consiste à résoudre l'équation d'évolution du facteur de mélange  $\widetilde{\phi}$  plutôt que celle de

$\widetilde{Z}_v$ . Ce facteur de mélange est défini par :

$$\widetilde{\phi} = \widetilde{Z(1-Z)} \quad , \quad (\text{II.11})$$

et permet de déterminer  $\widetilde{Z}_v$  grâce à la relation

$$\widetilde{Z}_v = \widetilde{Z\dot{Z}} - \widetilde{\dot{Z}Z} = \widetilde{Z(1-\dot{Z})} - \widetilde{\dot{\phi}} \quad . \quad (\text{II.12})$$

Son équation d'évolution s'écrit, dans le cadre d'une formulation LES :

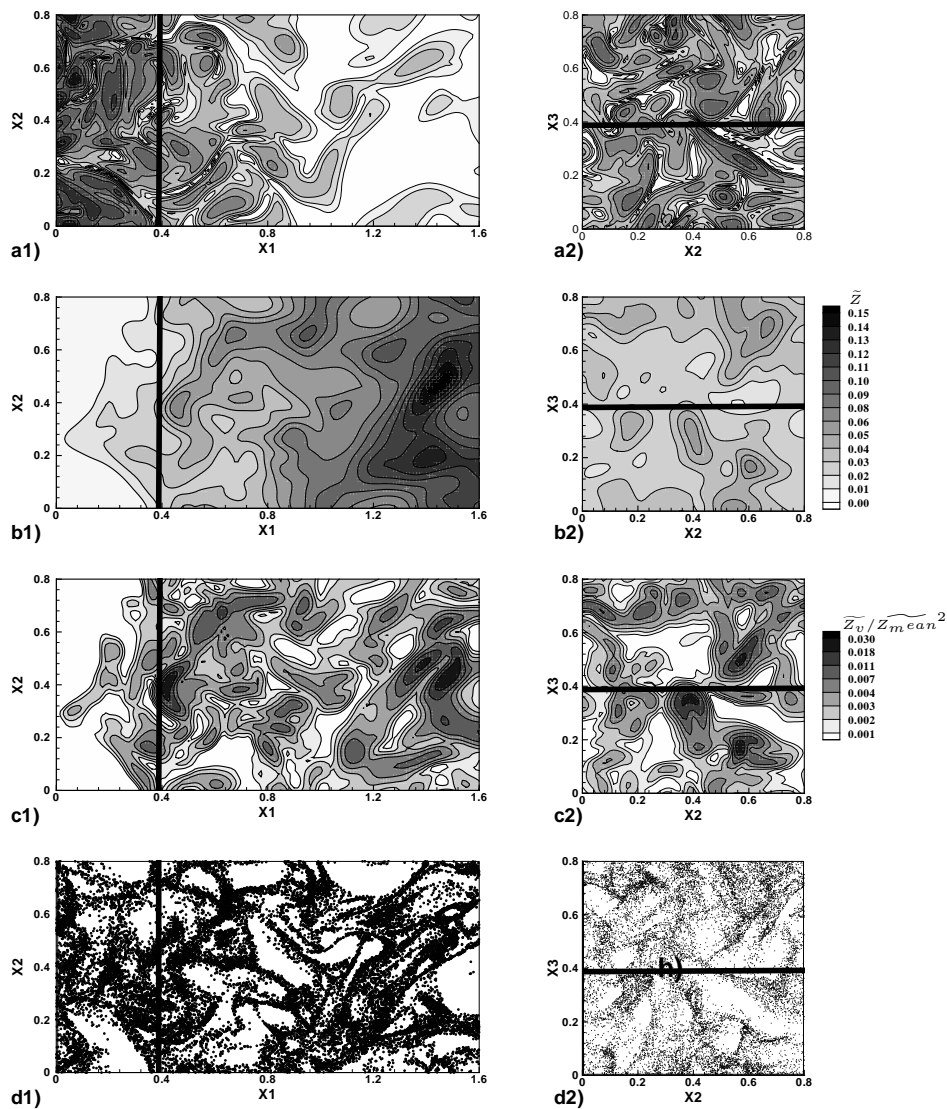
$$\frac{\partial \widetilde{\rho\phi}}{\partial t} + \frac{\partial \widetilde{\rho\tilde{u}_i\phi}}{\partial x_i} = \frac{\partial}{\partial x_i} \left[ \widetilde{\rho(D + D_\phi)} \frac{\partial \widetilde{\phi}}{\partial x_i} \right] + \underbrace{2\widetilde{\rho D} \frac{\partial \widetilde{Z}}{\partial x_i} \frac{\partial \widetilde{Z}}{\partial x_i}}_{\widetilde{\rho\chi}} + \underbrace{\widetilde{\rho\dot{W}_v(1-Z)}}_{\widetilde{\rho\dot{W}^\phi}} \quad . \quad (\text{II.13})$$

Il est possible de voir immédiatement l'avantage que l'on a à résoudre cette équation où seuls deux termes sont non-fermés: la dissipation et le terme lié à l'évaporation du spray. Les modèles développés

précédemment peuvent être employés pour fermer ces termes. Les résultats très encourageants des fermetures sont présentés figure II.7.

#### Conclusion:

Nous avons pu montrer la forte influence de la phase liquide sur la topologie de la phase gazeuse et notamment sur la fraction de mélange  $Z$ , ses fluctuations  $Z_v$  et la dissipation  $\chi$  de celles-ci. En effet, il apparaît que les termes sources de fluctuations de  $Z$  liés à l'évaporation du spray sont du même ordre de grandeur que les termes de dissipation et ne sont absolument pas négligeables. De plus, le phénomène de dissipation dépend des gradients locaux de fraction de mélange et sa modélisation doit aussi prendre en compte la présence des gouttes. C'est pourquoi nous avons effectué une évaluation complète des fermetures existantes et nous en avons développé de nouvelles lorsque cela s'avérait nécessaire. Il apparaît que la meilleure solution afin de déterminer la variance  $\widetilde{Z}_v$  de sous maille de la fraction de mélange consiste à introduire une nouvelle variable appelée facteur de mélange  $\widetilde{\Phi}$  définie par  $\widetilde{\Phi} = \widetilde{Z(1-Z)}$ . L'équation d'évolution de  $\widetilde{\Phi}$  est simple à écrire, avec peu de termes non-fermés et dont les modèles ont été développés. Une détermination dynamique de  $\widetilde{Z}_v$  et donc des taux de réactions chimiques est alors obtenue.



PII.4. - Coupes de la DNS 3D de l'évaporation d'un spray dans une turbulence spatialement décroissante. Gauche: coupe longitudinale, à droite: coupe transversale. (a): iso-vorticité, (b): fraction de mélange  $Z$ , (c) variance  $Z_v$  et (d) position des gouttes.

## II.3 Écoulements diphasiques et transferts de chaleur

### II.3.1 Introduction Générale

Les configurations de jets impactants sont très utilisées afin d'étudier les interactions turbulence/paroi et plus particulièrement les transferts de chaleur qui peuvent avoir lieu dans de nombreux écoulements expérimentaux ou industriels tels que les inverseurs de poussée, les chambres de combustion ou les échangeurs de chaleur. Parmi ces écoulements, certains sont diphasiques et transportent des particules ou des gouttelettes. La présence de cette phase dispersée peut mener à d'importantes modifications des caractéristiques locales de l'écoulement et des couches limites. Les particules jouent alors un grand rôle dans la modification des transferts de moment et de chaleur entre le fluide et la paroi.

L'objectif de ce travail, un peu en marge de la combustion des écoulements diphasiques, est d'utiliser la simulation numérique directe afin de décrire l'influence de la phase dispersée sur le développement des structures turbulentes ainsi et ses conséquences sur les transferts fluides/paroi. De nombreuses études expérimentales et numériques concernant les écoulements impactants ont déjà été effectuées [55, 56, 57, 58], nous permettant d'avoir une connaissance plus précise des mécanismes de transfert de chaleur. Cependant, très peu d'études ont été consacrées aux écoulements diphasiques. Un travail expérimental mené par Yoshida *et al* [59] montre que les transferts de chaleur augmentent de manière significative au niveau du point de stagnation. Cette propriété a été observée dans la deuxième étude présentée ici dans le cadre de l'impaction d'un jet non-préchauffé. Il est possible de citer Kaftori *et al* [2] ou encore Yokomine *et al* [60] qui ont aussi travaillé sur ce problème. Ces derniers ont montré qu'en fonction de la nature de la phase dispersée, les transferts de chaleur pouvaient soit

diminuer soit augmenter par rapport à un écoulement monophasique. Les mécanismes provoquant une variation dans un sens ou un autre ne sont pas encore très bien connus. C'est pourquoi, la DNS peut être un outil précieux afin de les caractériser.

D'un point de vue purement gazeux, quelques paramètres très spécifiques induisent des modifications des transferts de chaleur entre le fluide et le mur: le Reynolds de jet, la distance entre le mur et l'injecteur et les propriétés intrinsèques du mur et du fluide [55, 56, 57, 58]. Cependant, dans le cas diphasique, il nous faut aussi prendre en compte les études classiques concernant les interactions entre écoulements turbulents et particules [59, 2, 61, 62, 63, 64, 65, 66]. Quatre paramètres principaux permettent la description de ces interactions: le rapport entre le diamètre moyen des particules et l'échelle intégrale de la turbulence, le nombre de Reynolds de l'écoulement et le nombre de Stokes des particules et enfin, la charge en particules. En fonction de ces paramètres, des phénomènes très différents peuvent apparaître telle une augmentation ou une diminution de l'énergie de la turbulence, une forte variation de la taille des structures turbulentes, etc.

Ces deux points, étudiés jusqu'à présent de manières très distinctes: turbulence/paroi et turbulence/particules, peuvent être associés, d'un point de vue numérique, afin d'avoir une description des phénomènes turbulence/paroi/particules. Cet aspect n'a été que très peu étudié jusqu'à présent et le travail préliminaire présenté ici permet d'évaluer l'opportunité d'utiliser un solveur de DNS couplé à un modèle Lagrangien pour avancer sur ce sujet.

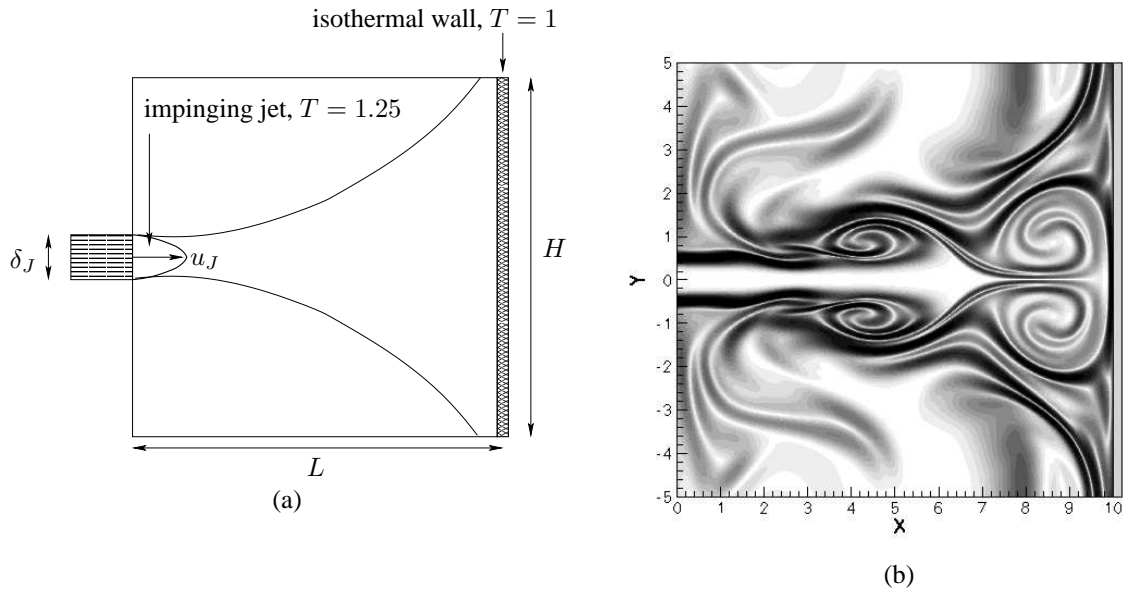


FIG. II.8 – (a): géométrie et domaine de calcul, (b): gradient de température, cas gazeux

## II.3.2 Influence de la dispersion de particules sur les transferts de chaleur

### II.3.2.1 Problématique et configuration

Les résultats présentés dans cette partie ont été obtenus dans le cadre du stage de recherche de Jessica Lebertois. Il s'agit d'un travail préliminaire à une étude qui sera effectuée en trois parties: (1) analyse de l'impact des particules sur les transferts de chaleur entre un jet impactant et une paroi, (2) étude de l'évaporation et du mélange d'un spray de combustible en zone de proche paroi et (3) étude de l'allumage d'un spray de combustible près d'une paroi chaude.

- LEBERTOIS, J., RÉVEILLON J., 2004, *Direct Numerical simulation of two-phase impinging jets*, *Proceedings of the International Conference on Multiphase flow, ICMF2004, Yokohama, May 31 - June 3, Japan*

Dans cette étude, l'effet important des particules sur la naissance et le développement des structures tourbillonnaires du jet est montré. La configuration est classique, il s'agit d'un jet impactant montré figure II.8. Toutes les données du calcul sont normalisées par les paramètres d'injection: largeur du jet  $\delta_J$  et vitesse maxi-

male  $u_J$ . Le domaine de calcul est carré, de côté  $10\delta_J$ . Dans les calculs présentés ici, le paramètre variable est le Reynolds de jet défini par  $Re_J = u_J\delta_J/\nu$ .  $Re_J$  varie entre 450 et 1350. La température de référence du mur est égale à  $T_w = 1$  et le jet est préchauffé à  $T_J = 1.25$ . Le profil d'injection est initialement laminaire et il est défini à partir d'une tangente hyperbolique [67]. L'épaisseur du gradient est égale à 1/20ème de la largeur du jet. Du fait du fort cisaillement, des structures tourbillonnaires se développent et impactent le mur en modifiant fortement les gradients de température (fig. II.8-b).

Une première configuration monophasique (ST0) sert de référence. Ensuite, des particules monodisperses sont injectées au sein du jet. Deux nombres de Stokes différents sont montrés ici:  $St = 0.02$  pour le cas ST1 et  $St = 0.4$  pour le cas ST2. Le nombre de Stokes est défini à partir du ratio du temps cinétique des particules avec le temps de jet. Dans le premier cas, les particules sont si légères qu'elles s'adaptent à toute modification locale de la vitesse du gaz porteur. Dans le second cas, des effets inertiels importants apparaissent. Seul un couplage entre le moment des particules et le gaz est ef-

fectué via la force de traînée. Les particules sont donc considérées comme adiabatiques.

### II.3.2.2 Résultats

Trois simulations purement gazeuses ont tout d'abord été effectuées avec trois différents nombres de Reynolds:  $Re_J = 450$  (cas ST0-RE1),  $Re_J = 900$  (cas ST0-RE2),  $Re_J = 1350$  (cas ST0-RE3). La figure II.8-(b) montre un champ instantané des gradients de température dans le cas ST0-RE3. Il est possible de voir le développement naturel des structures avant leur impact. Ces gradients peuvent être caractérisés par le nombre de Nusselt défini par  $Nu = h\delta_J/k$  où  $h$  est le coefficient de transfert de chaleur  $h = k(dT/dx)/(T_J - T_w)$  et  $k$  la conductivité thermique. Ces définitions nous permettent de définir le nombre de Nusselt instantané le long de la paroi :

$$Nu(y) = \frac{\delta_J}{T_J - T_w} \left( \frac{\partial T}{\partial x} \right)_{x=L,y}$$

Le Nusselt du point de stagnation est tel que  $Nu_s = Nu(0)$ . La moyenne temporelle du nombre de Nusselt le long de la paroi  $\overline{Nu}(y)$  est tracée planche PII.5.a, page 33. Une comparaison avec les résultats expérimentaux normalisés de Sparrow et Wong [68] montre la très bonne estimation des transferts de chaleur par la DNS. De manière classique, le nombre de Nusselt moyen est maximum au niveau du point de stagnation ( $y = 0$ ) et les transferts de chaleur augmentent avec le nombre de Reynolds du jet. Il a été vérifié que, selon la théorie, la relation  $\overline{Nu}_s \propto \sqrt{Re_J}$  était vérifiée. Ce point, associé à la validation par l'expérience, nous assure que les transferts de chaleurs sont correctement estimés pour tous les nombres de Reynolds. Il est possible de suivre planche PII.5.b l'évolution temporelle du nombre de Nusselt le long de la paroi. Quel que soit le temps considéré, de fortes variations peuvent être observées le long de la ligne de stagnation. En fait une variation périodique de  $Nu_s(t)$  peut être détectée. Afin d'identifier les périodes d'impaction principales des structures tourbillonnaires, une transformée de Fourier du signal  $Nu_s(t)$  a été effectuée sur  $180\tau_J$  et tracée figure PII.5.c pour les deux cas ST0-RE2 et ST0-RE3. La transformée est exprimée en terme de période temporelle. Ces graphes nous permettent de différencier les deux configurations qui, au premier abord, semblaient très similaires.

Pour les deux cas ST0-RE2 et ST0-RE3, la période principale de déstabilisation est égale à  $T_1 = 11.1\tau_J$ .

Cependant, des comportements périodiques secondaires peuvent être détectés. La figure PII.5.c montre bien l'apparition d'une période  $T_4$  telle que  $T_4 = T_1/2$ . Cette élévation locale du Nusselt est directement liée à la présence de structures secondaires avant et après l'impact de la structure principale. Si le nombre de Reynolds augmente, il apparaît que le nombre de structures impactionnant la paroi augmente aussi. Notamment, un impact ayant lieu tous les  $T_2 = 2T_1$  montre un comportement alterné des structures tourbillonnaires principales tous les deux impacts. Deux autres structures secondaires peuvent aussi être détectées ( $T_3$  et  $T_4$ ) du fait des plus faibles tourbillons.

Dans un deuxième temps, une phase solide dispersée a été injectée avec l'écoulement principal (pl. PII.6.a). La vitesse initiale de glissement est nulle. Cependant, dès que les structures turbulentes apparaissent, les effets de l'inertie des gouttes deviennent visibles. Comme précisé en introduction, deux nombres de Stokes différents ont été considérés ( $St = 0.02$  et  $St = 0.4$ ) en modifiant la masse des particules injectées. Dans ce résumé, seul le cas où le Reynolds du jet est maximal ( $Re_J = 1350$ ) a été retenue du point de vue de la phase porteuse. Cependant, des conclusions similaires peuvent être trouvées pour le cas  $Re_J = 900$ .

Il s'avère que la formation des structures turbulentes est fortement affectée par la présence des particules. En fait, si l'on considère le cas des particules légères, ST1-RE3, des structures similaires à celles observées dans le cas gazeux mais à plus faible nombre Reynolds apparaissent. De manière générale, les particules freinent le développement des structures tourbillonnaires ce qui mène à une diminution des transferts de chaleur par rapport au cas purement gazeux de référence. Si la valeur moyenne du Nusselt est tracée planche PII.6.b, il est possible de voir la décroissance moyenne de ces transferts. Dans le cas limite (dans cette configuration) où le nombre de Stokes est égal à  $St = 0.4$  alors une chute brutale du nombre de Nusselt moyen est visible. En fait, ce résultat n'est plus comparable avec un écoulement de référence. En effet, la masse des particules est si importante que les forces de traînée empêchent complètement la formation de structures tourbillonnaires à partir du gradient moyen de vitesse (fig. PII.6.a). De ce fait le jet impacte avec une très forte énergie la paroi et se



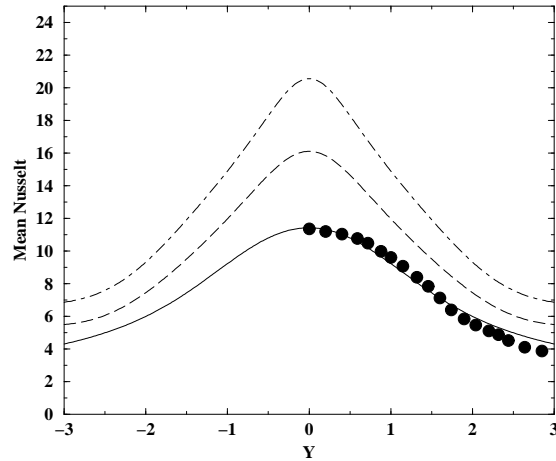
déstabilise complètement dans un mouvement général d'oscillation de haut en bas qui lui permet alors de générer des structures tourbillonnaires et de disperser l'énergie. Dans ce cas, le champ de température subit un très fort mélange selon toute la direction transversale au jet et les gradients sont alors beaucoup plus faible d'où un petit nombre de Nusselt.

Si nous restons dans un domaine où le nombre de Stokes est suffisamment petit pour ne pas déstabiliser le jet alors, du point de vue moyen, l'écoulement est similaire à un écoulement gazeux avec un plus faible nombre de Reynolds. Il est intéressant de noter que la similitude peut être étendue aux propriétés instationnaires du jet.

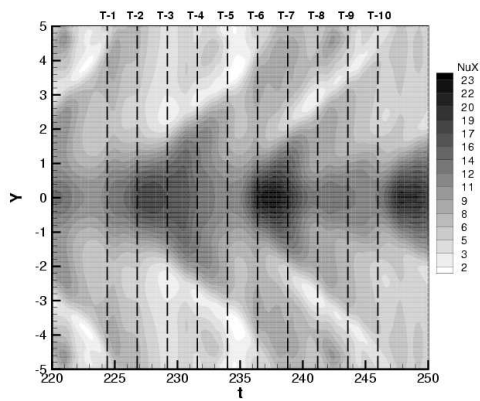
Il est possible de voir à nouveau sur la figure PII.6.c la transformée de Fourier du signal  $Nu_s(t)$ . Dans le cas où  $St = 0.4$  (fig. PII.6.c-bas) ce signal n'a plus guère de signification car le comportement périodique du jet a disparu. En revanche, la planche PII.6.c-haut montre que même les gouttes très légères  $St = 0.02$  ont modifié les structures turbulentes impactant la paroi. En effet il n'y a plus que deux périodes d'impaction principales contre quatre dans le cas gazeux (fig. PII.5.c-haut). Ce résultat est comparable avec la planche PII.5.c-bas où seules deux périodes sont visibles. Ce cas correspondant à un écoulement gazeux avec un nombre de Reynolds égal à 900.

**Conclusion:**

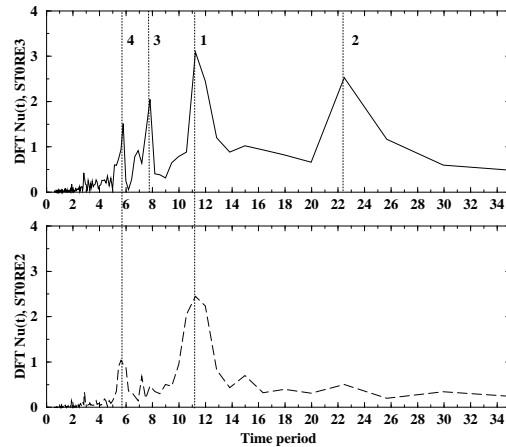
De manière générale, la présence des particules modifie artificiellement le Reynolds du jet de gaz. Une étude similaire a été effectuée sur les coefficients de frottement au niveau de la paroi et mène à des conclusions identiques. Notre prochain développement va consister en trois points: tout d'abord, établir une table de correspondance entre la diminution du Reynolds apparent du jet et le nombre de Stokes des particules dans le cas où ces dernières restent petites. Cette partie nous permettra ainsi, en fonction des caractéristiques de la phase dispersée d'utiliser les estimations de transferts de chaleur pour les écoulements purement gazeux en appliquant une loi de transformation du Reynolds dépendante du Stokes et de la charge en particule. Dans un deuxième temps, en variant le nombre de Reynolds du jet diphasique, il s'agit de vérifier si la loi  $\overline{Nu}_s \propto \sqrt{Re_J}$  est toujours valable afin de pouvoir balayer tous les cas de figure tant en nombre de Reynolds qu'en nombre de Stokes. Le dernier point à définir est la zone de stabilité du jet en fonction du nombre de Reynolds de ce dernier et du nombre de Stokes des particules. Pour cela, un diagramme doit être développé. Incluant en outre la limite de déstabilisation du jet, la nature des structures impactantes périodiques sera aussi déterminée.



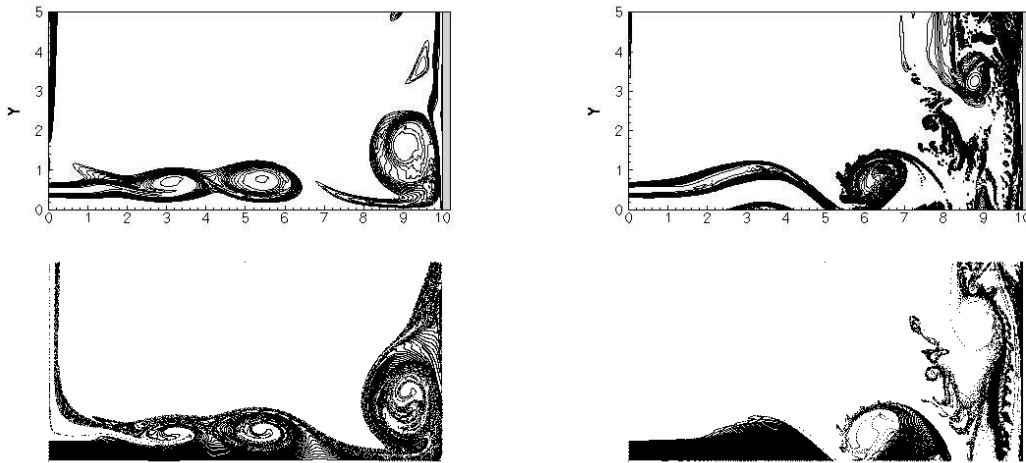
PII.5.a - Nombre de Nusselt moyen le long de la paroi  $\overline{Nu}(y)$ . Ligne continue :  $Re_J = 450$  (ST0-RE1), tirets :  $Re_J = 900$  (ST0-RE1) et tirets-points :  $Re_J = 1350$  (ST0-RE3), symboles : expérience [68] ( $Re_J = 450$ ).



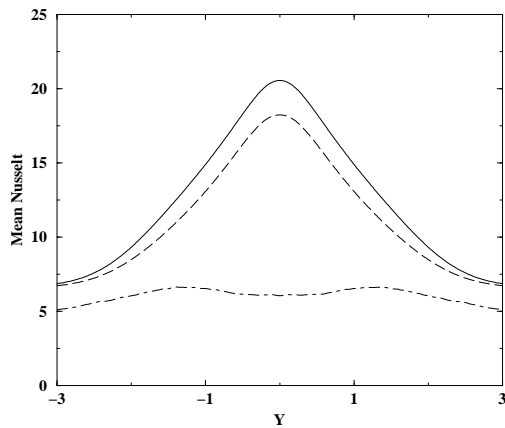
PII.5.b - Evolution temporelle du nombre de Nusselt  $Nu(y)$  le long de la paroi, cas ST0-RE2.



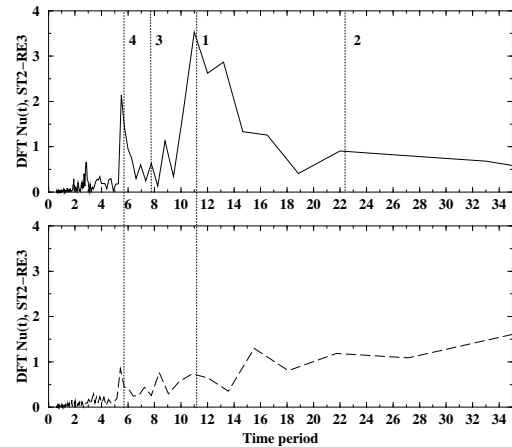
PII.5.c - Transformée de Fourier discrète du signal de transfert de chaleur exprimé en terme de période de temps de jet. Haut:  $Re_J = 1350$  (ST0-RE3) et bas:  $Re_J = 900$  (ST0-RE2).



PII.6.a - Structures turbulentes (haut) et particules (bas), gauche : ST1-RE3, droite : ST2-RE3.



PII.6.b - Nombre de Nusselt moyen le long de la paroi  $\overline{Nu}(y)$ . Ligne continue : ST0-RE3, tirets : ST1-RE1 et tirets-points : ST2-RE3



PII.6.c - Transformée de Fourier discrète du signal de transfert de chaleur exprimé en terme de période de temps de jet. Haut:  $Re_J = 1350$  (ST2-RE3) et bas:  $Re_J = 1350$  (ST2-RE2).

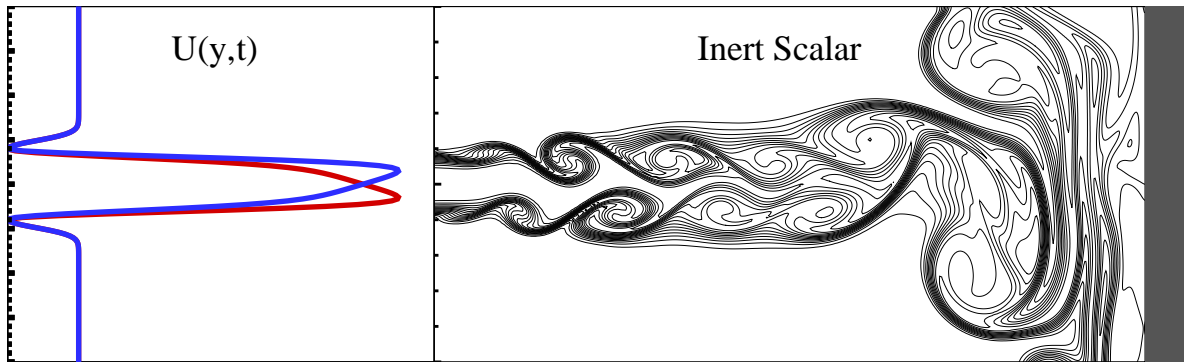


FIG. II.9 – Configuration du jet en impaction. Gauche: profil de vitesse, droite: traceur inerte

### II.3.3 Impact de l'apparition d'éjecta sur les transferts de chaleurs

#### II.3.3.1 Problématique et configuration

Les résultats présentés dans cette partie ont été obtenus dans le cadre d'un financement par le C.E.A. Il s'agit d'une partie du travail de D.E.A. de Karine Kannevière, INSA de ROUEN. Corrine Canton-Desmeuzes, du C.E.A. a participé au projet.

- REVEILLON, J, CANNEVIÈRE, K, 2002, *Visualization of the effects of dispersed particles on heat transfers from an impinging jet*, *Journal of Flow Visualization and Image Processing*, Vol. 9, Number 1, 11–24

Cette étude a été initiée afin d'analyser les problèmes d'augmentation des transferts thermiques au niveau de la paroi des corps de rentrée. Cependant les problèmes de transferts de chaleur entre un écoulement turbulent diphasique et les parois existent aussi au sein des chambres de combustion. C'est pourquoi nous continuons à développer cette thématique dans le cadre de l'étude de la combustion diphasique.

Lorsque des corps de rentrée volants à grande vitesse traversent des nuages composés de particules d'eau ou de glace, ces dernières, en impactant sur la paroi, provoquent l'apparition d'éjecta issus de la micro-érosion de la surface extérieure. Des études expérimentales[69] ont montré que les transferts ther-

miques entre l'écoulement turbulent et les parois sont modifiés de manière significative du fait de la présence des particules et des éjecta. L'objectif de cette étude est d'analyser, grâce la simulation numérique directe, l'effet de la présence des éjecta en proche paroi sur les propriétés de l'écoulement et les transferts de chaleur.

Une configuration classique de jet impactant a été utilisée dans cette étude. Dans notre cas, il s'agit d'un jet plan initialement laminaire auquel des oscillations sinusoïdales antisymétriques sont surimposées afin d'accélérer sa déstabilisation et la création de structures turbulentes. La période de déstabilisation du jet a été basée sur un nombre de Strouhal tel que  $S_t = 0.4$  correspondant à la fréquence de déstabilisation optimale de l'écoulement. Les résultats ont été normalisés par le diamètre d'injection du jet  $\delta_J$ , sa vitesse centrale maximale  $u_J$  et le temps caractéristique  $\tau_J = \delta_J/u_J$ .

Trois familles de simulations sont présentées :

- un jet sans particule qui servira de référence (BASE).
- des jets avec des particules incidentes de concentration différente mais pas d'éjecta (INCID).
- des jets avec de rares particules qui provoquent l'apparition d'éjecta (EJECTA).

Les résultats principaux de cette étude vont être évoqués à présent.

#### II.3.3.2 Resultats

L'objectif principal de ce travail est d'étudier le flux de chaleur pariétal en fonction du temps. Dans un premier temps, la simulation de référence BASE est étudiée.

Les calculs sont effectués avec des oscillations antisymétriques du profil d'entrée (fig. II.9-gauche). Les effets de ces oscillations antisymétriques sont clairement visibles sur le champ représentant le traceur inerte (fig. II.9-droite) injecté avec l'écoulement principal. La déstabilisation du jet est due à un fort gradient de vitesse au niveau de l'injection. Les oscillations antisymétriques supplémentaires permettent une formation plus rapide et un contrôle plus aisé des structures tourbillonnaires. L'impact des structures turbulentes sur la paroi provoque un écrasement de ces dernières et une modification de la vorticit  et de la temp rature du fluide en proche paroi.

Dans le cas d'un  coulement monophasique, les flux de chaleur   la paroi sont d j  fortement modifi s du fait de la succession d'impacts des structures turbulentes qui modifient les gradients de temp rature (planche PII.7.a). Le flux thermique peut s'exprimer par l'interm diaire du nombre de Nusselt. Dans la configuration base, la valeur moyenne du nombre de Nusselt au niveau du point de stagnation, a  t  utilis e afin d'adimensionner l'ensemble des flux thermiques pr sent s.

Notre objectif principal est de d terminer si la pr sence de particules, de part les modifications qu'elles vont apporter au fluide, modifie de mani re fondamentale ces flux de chaleur. Cette modification peut avoir lieu de deux fa ons diff rentes : la force de tra n e des particules modifie sensiblement la quantit  de mouvement du fluide en aval de la paroi mais aussi dans la zone de couche limite. Afin de pouvoir diff rencier les ph nom nes physiques en jeu, les transferts thermiques particules/gaz ne sont pas mod lis s. Seule l'action de la tra n e des particules sur le gaz porteur est donc prise en compte.

Observons   pr sent, l'effet de l'injection simul-

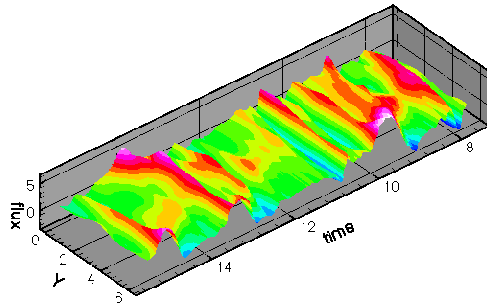
tan e de particules avec le fluide. Toutes les simulations diphasiques sont issues d'un temps  $t_0 = 7.72$  donn  de la simulation inerte (BASE). Des particules sont alors inject es dans le fluide en fonction des param tres du calcul. Apr s quatre temps de jet, les particules impactent sur la paroi. La figure PII.7.b montrent les flux de temp rature au niveau de la paroi entre l'instant o  les particules commencent    tre inject es ( $t = 7.72$ ) et l'instant  $t = 15.4$  dans le cas o  des particules incidentes ont  t  ins r es dans le jet. L'effet de ces particules est clairement visible figure PII.7.b o  l'on peut voir,   titre purement qualitatif, une forte variation de la valeur absolue des flux de temp rature   la paroi.

Dans le second cas, les particules incidentes, plus rares, ne modifient pas sensiblement l' coulement. Par contre, l'apparition d' jecta avec une forte vitesse de glissement au niveau de la paroi va modifier la structure de l' coulement.

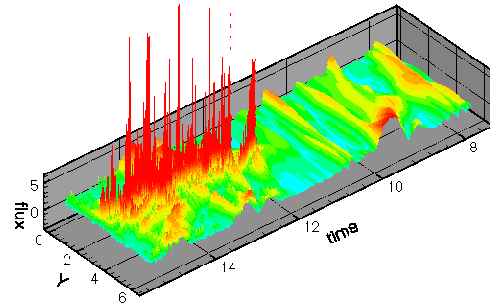
La valeur moyenne des transferts de chaleur entre le fluide et la paroi est trac e figure PII.7.c pour les trois cas BASE, INCID, EJECTA. Il s'av re que le jet contenant des particules incidentes transf re au moins deux fois plus de chaleur que le jet inerte. C'est un r sultat standard d j  observ  par Kaftori *et al* [2]. Un autre  l ment int ressant de la figure PII.7.c concerne les flux de chaleur lorsque des  jecta sont  mis depuis la surface. Dans ce cas, au niveau du point de stagnation, une forte diminution des gradients de temp rature provoque une chute des flux thermiques. La cause de la modification des gradients de temp rature peut  tre vue figure PII.7.d. En effet, l' mission de microparticules de carbone dans la zone de couche limite provoque l'apparition de petites structures tourbillonnaires qui vont augmenter tr s fortement le m lange et diminuer le niveau de temp rature en zone de proche paroi. Au del  de ce point de stagnation, le long de la paroi, les transferts de chaleur sont deux fois plus importants que dans le cas gazeux.

#### Conclusion:

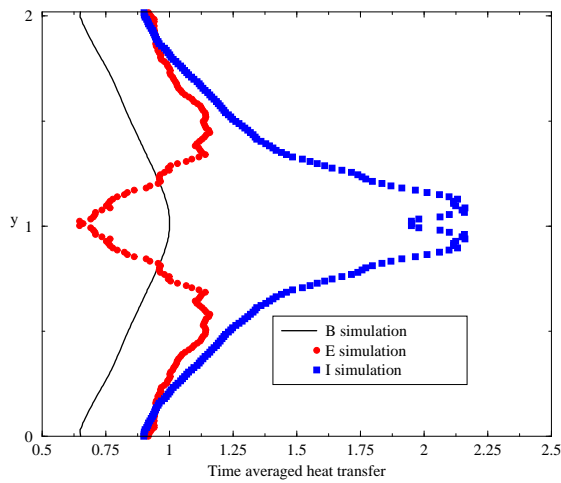
Dans ce travail, il a  t  montr  qu'une phase dispers e de particules solides peut modifier de mani re importante les transferts de chaleur entre un  coulement fluide et une paroi. La dispersion des particules induit un certain nombre d'effets et principalement la modification de la turbulence en amont de la paroi qui augmente les transferts de chaleur. En revanche, la pr sence possible d' jecta dans la zone de proche paroi peut diminuer ces transferts dans la zone du point de stagnation du fait de l'apparition d'un fort m lange turbulent lors de l'apparition des  jecta.



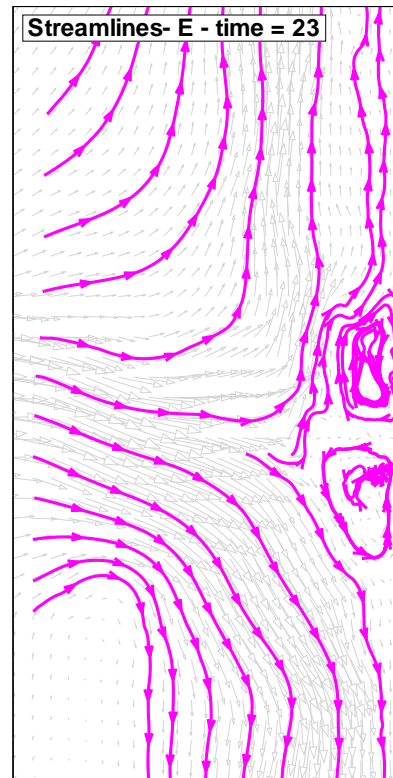
PII.7.a - Flux de chaleur instantané, simulation monophasique BASE



PII.7.b - Flux de chaleur instantané, simulation diphasique INCID



PII.7.c - Profil du nombre de Nusselt le long de la paroi. Normalisé par le maximum du Nusselt monophasique. Ligne: monophasique BASE, carrés rouges: diphasique EJECTA, carrés bleus: diphasique INCID



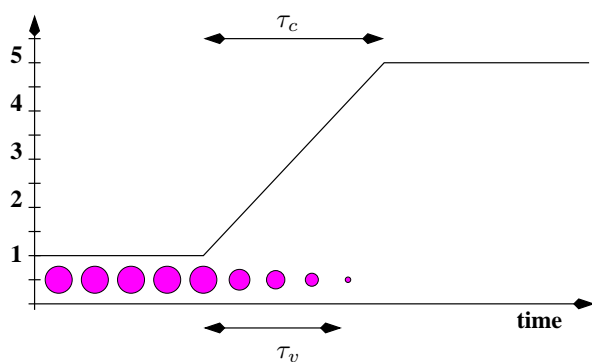
PII.7.d - Cas EJECTA: les micro-particules provoque l'apparition de tourbillons au niveau du point de stagnation et le gradient de température diminue.

## II.4 Ecoulements réactifs

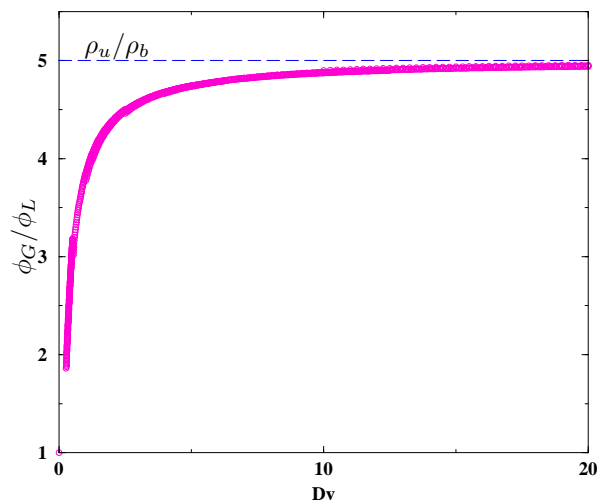
Comme nous l'avons évoqué dans l'introduction générale, une description précise de la dispersion et de l'évaporation du spray associée à des modèles dédiés au micro-mélange de la vapeur est nécessaire afin de modéliser correctement les phénomènes de combustion au sein de la chambre. En fonction des caractéristiques du système étudié, la combustion peut avoir lieu soit après l'évaporation complète du combustible, soit au sein du spray en cours d'évaporation. Dans le premier cas, même si l'utilisation des modèles de combustion développés dans le cadre d'écoulements purement gazeux est envisageable, la topologie de la fraction de mélange issue de l'évaporation peut être très différente d'une injection gazeuse classique et de nombreuses zones partiellement prémélangées peuvent apparaître [17]. Si des flammes se propagent dans le milieu alors que le spray n'est pas encore totalement évaporé, des interactions très complexes apparaissent entre le spray et son évaporation, la turbulence et les phénomènes de combustion (fig. I.1, page 2). En effet, le spray modifie localement les transferts de chaleur et de quantité de mouvement ainsi que la fraction de mélange et le taux

de dissipation. Tous ces facteurs affectent la structure de la flamme mais aussi les caractéristiques de la turbulence. Il devient particulièrement complexe d'isoler les phénomènes afin de les caractériser avec précision.

L'objectif principal du travail que nous avons effectué a été de rechercher, point par point, les propriétés de l'écoulement qui pouvaient modifier de manière cruciale les phénomènes de combustion. Le travail présenté par la suite s'articule donc suivant trois axes principaux: tout d'abord, nous avons étudié l'impact sur la richesse gazeuse locale de l'évaporation d'une goutte au sein d'un oxydant en cours de dilatation. En effet, l'approche d'une flamme va provoquer une expansion de la phase porteuse et l'évaporation du spray au sein de cette phase. En fonction de la vitesse d'évaporation comparée à celle de l'expansion, la richesse gazeuse, et donc la flamme, peuvent être modifiées du tout au tout. Ensuite, nous avons étudié la propagation d'une flamme laminaire au sein d'un spray afin de définir les propriétés de référence de la combustion diphasique. Nous avons ensuite ébauché un premier diagramme de combustion pour les jets diphasiques turbulents.



(a)- Schéma du problème modèle: une goutte est dans un écoulement au repos, une élévation de la température de l'oxydant va (1) dilater ce dernier et (2) évaporer la goutte.



(b)- Evolution du rapport entre la richesse gazeuse finale et la richesse liquide initiale en fonction de  $D_v = \tau_v/\tau_c$ .

FIG. II.10 – Analyse de la dynamique d'évaporation des gouttes sur la richesse.

## II.4.1 Richesse de combustion

*Les résultats qui suivent font partis du travail de thèse de Karine Kannevière, INSA de ROUEN qui vient d'être soutenue. Ce sont des travaux préliminaires à un article qui sera soumis prochainement*

Si l'on étudie la combustion des écoulements purement gazeux, la définition de la richesse locale du mélange (et donc de la fraction de mélange) ne pose pas de difficulté quel que soit le régime de combustion prémélangé ou partiellement prémélangé. En fonction de la topologie du champ de fraction de mélange, il est possible de prévoir avec une assez grande précision le régime local de combustion et le taux de réaction en fonction de la quantité de combustible injecté dans la chambre. En revanche, dans le cadre de la combustion diphasique, connaître le flux massique de combustible injecté dans la chambre n'est pas suffisant pour la détermination des richesses locales de combustion. En effet, après sa pulvérisation, le combustible liquide se déplace au sein de l'oxydant et peut traverser des zones dont les propriétés de température et de pression vont influencer sur (1) le taux d'évaporation des gouttes (2) la densité locale d'oxydant. Ce même phénomène se rencontre lorsque les gouttelettes s'approchent d'un front de flamme. Lors de calculs préliminaires, nous avons pu observer un comportement étrange de certaines flammes qui brûlaient faiblement, alors que l'injection en combustible liquide s'effectuait à la stœchiométrie. Ce phénomène nous a amené à étudier d'un point de vue analytique l'effet des variations de température au sein d'un écoulement inerte diphasique.

Considérons une goutte isolée dans un volume de contrôle  $\mathcal{V}$  contenant de l'oxydant gazeux. Le diamètre de cette goutte détermine la richesse liquide initiale du problème par rapport à la quantité d'oxydant au

sein du volume  $\mathcal{V}$ . L'oxydant entourant la goutte subit une élévation de température d'un facteur 5 ce qui correspond à un ratio classique: température gaz brûlé / température gaz frais (fig. II.10-(a)). Deux paramètres entrent en jeu dans cette analyse: les temps caractéristiques d'évaporation  $\tau_v$  de la goutte et d'élévation de la température ou temps de chauffage  $\tau_c$ . Le domaine  $\mathcal{V}$  n'étant pas fermé, la pression demeure égale à la pression atmosphérique et une augmentation de la température du mélange d'oxydant et de combustible évaporé provoquera son expansion. De ce fait, la quantité d'oxydant au sein du volume de contrôle diminuera. Pendant ce temps, la goutte s'évapore dans ce volume  $\mathcal{V}$ . Il s'avère donc que la richesse gazeuse finale dépend du paramètre  $D_v$  qui est le rapport entre le temps d'évaporation  $\tau_v$  et le temps de chauffage  $\tau_c$ :  $D_v = \tau_v/\tau_c$ . En effet, un temps d'évaporation très bref ( $D_v$  très petit) provoque la disparition de la gouttelette avant la diminution de la masse d'oxydant et la richesse gazeuse est très proche de la richesse liquide initiale. En revanche, si  $D_v$  est grand, la perte de masse d'oxydant implique une forte augmentation de la richesse gazeuse locale. Ce phénomène est résumé figure II.10-(b) ou l'on peut voir le rapport de la richesse gazeuse finale avec la richesse liquide initiale. Le ratio maximal théorique de richesse peut donc atteindre le ratio de température gaz brûlés/gaz frais. D'un point de vue pratique le paramètre  $D_v$  reste petit ce qui correspond néanmoins à la zone de forte variation du rapport de richesse. Cette étude analytique a été simplifiée au maximum et de nombreux effets de voisinage ont été négligés, cependant nous avons une idée assez précise à présent de la nécessité de différencier les définitions de richesse liquide d'injection et de richesse locale gazeuse de combustion. En effet, le paramètre  $D_v$  doit intervenir dans l'estimation du taux de réaction global au sein de la chambre afin d'optimiser la combustion.

### Conclusion:

Dans cette partie préliminaire, un point basique mais fondamental pour la combustion de spray a été mis en exergue: le régime de combustion au sein d'un spray n'est pas uniquement déterminé par la richesse d'injection de la phase liquide mais aussi par les caractéristiques des gouttelettes qui composent ce spray et notamment leur vitesse d'évaporation lorsqu'elles atteignent le front de flamme.

## II.4.2 Combustion diphasique laminaire prémélangée

### II.4.2.1 Introduction



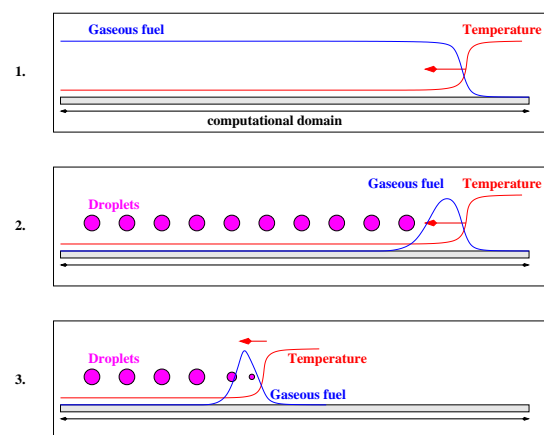
Les résultats qui suivent font partie du travail de thèse de Karine Kannevière, INSA de ROUEN qui vient d'être soutenue.

La seconde étape préliminaire à l'étude de la combustion diphasique est l'analyse de la propagation et de la structure des flammes prémélangées diphasiques dans un écoulement compressible. De nombreux auteurs ont travaillé sur le sujet. L'un des premiers fut Williams [70] qui a dérivé des solutions analytiques pour deux cas bien distincts : soient toutes les gouttes s'évaporent avant d'atteindre le front de flamme, soit chaque goutte brûle avec une flamme de diffusion autour d'elle. Par la suite, de nombreuses études ont été consacrées aux cas monodispersés ou polydispersés [71, 72, 73, 74] mais très souvent avec une présence initiale de vapeur de combustible et des gouttes qui modifient faiblement la richesse locale. Polymeropoulos [75] et Greenberg *et al* [76, 77] ont travaillé plus particulièrement sur la dérivation d'une expression pour la vitesse de flamme monodimensionnelle dans un spray et l'étude de sa structure. Cependant, dans ces études analytiques, la dilatation des gaz n'est pas prise en compte or nous avons pu voir que cette dilatation peut provoquer de fortes modifications des propriétés locales du mélange combustible/oxydant et donc de la structure et de la vitesse de propagation des flammes.

Grâce à la simulation numérique directe, il est possible d'effectuer une étude de base concernant la propagation des flammes diphasiques monodimensionnelles au sein d'un écoulement compressible. Ce travail est en cours de réalisation mais quelques résultats peuvent être évoqués dès à présent. Une première configuration simple a été mise en œuvre : des gouttes monodispersées sont régulièrement positionnées dans notre domaine de calcul au sein d'un écoulement initialement au repos. Pour l'instant ces gouttes sont fixées dans le domaine. Elle peuvent donc, d'un point de vue analytique être considérées comme une source locale de masse de combustible qui dépend de la température des gaz environnants. Dans ce rapport, nous présentons un exemple de

l'analyse de la flamme se propageant au sein de ce milieu, lorsque la richesse liquide initiale  $\Phi_{L0}$  est importante ( $\Phi_{L0} = 1.48$ ).

La présence des gouttes rend très difficile les changements de repère Galiléen du domaine, ordinairement utilisés pour l'étude des flammes gazeuses laminaires, consistant à injecter face à la flamme un débit de combustible égal au taux consommation de la réaction. C'est pourquoi, nous avons utilisé une méthode plus classique consistant à suivre la flamme se propageant dans un long domaine jusqu'à ce que sa vitesse et ses autres propriétés soient stabilisées. Le domaine est défini par l'axe  $x$  et la flamme se propage de droite à gauche. Le schéma de la configuration est le suivant :



L'initialisation du calcul s'effectue grâce à une flamme laminaire gazeuse prémélangée (1). Le combustible gazeux en amont de cette flamme est supprimé pour être remplacé par un champ de gouttelettes (2). Après quelques temps nécessaires à l'adaptation du calcul initialement monophasique à la présence de la phase liquide, un état stable est atteint (3). Le nombre de Lewis de la simulation est égal à 1. Cette configuration dans un cas purement gazeux est parfaitement stationnaire. Les résultats ont été normalisés par les propriétés de la flamme gazeuse à la stœchiométrie (taux de réaction maximum, épaisseur de flamme, temps caractéristique).

#### II.4.2.2 Définition de l'index de flamme

Afin de pouvoir différencier le dégagement de chaleur d'une combustion non-prémélangée par rapport à une combustion prémélangée, Takeno *et al* [78] ont proposé d'utiliser un index de flamme basé sur le produit scalaire des gradients de fraction de mélange de com-

buscible et d'oxydant. Cet index de flamme a par la suite été utilisé par Mizobuchi *et al* [79] pour l'analyse d'une flamme décrochée d'hydrogène ainsi que par Favier et Vervisch [80] pour l'étude de l'impact de la formation de trous dans les flammes de diffusion. Très récemment

Domingo *et al* [4] ont étendu le concept à un index de flamme de sous-maille afin de pouvoir développer un modèle de combustion pour la simulation des grandes structures.

L'index de flamme de Takeno,  $G_{FO}$ , s'écrit:

$$G_{FO} = \nabla Y_F \cdot \nabla Y_O \quad (\text{II.14})$$

Il est positif pour une flamme prémélangée et négatif pour une flamme non-prémélangée. A partir de cette

définition de base, un index de flamme normalisé  $\xi_p$  peut être défini tel qu'il soit unitaire pour une combustion purement prémélangée et nulle pour une combustion non-prémélangée.

$$\xi_p = \frac{1}{2} \left( 1 + \frac{G_{FO}}{|G_{FO}|} \right) \quad (\text{II.15})$$

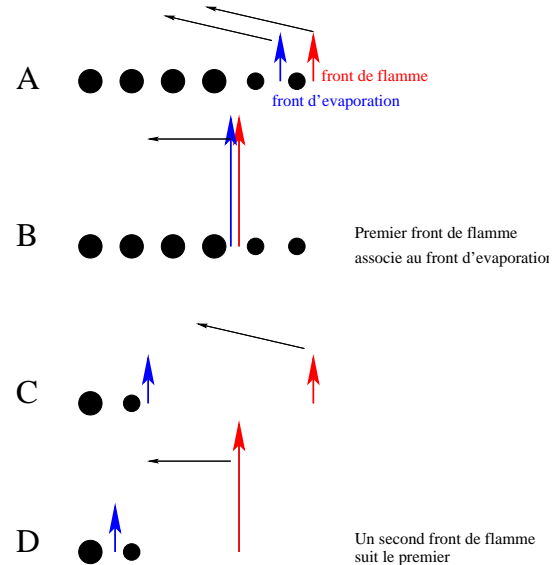
Bien sur, la détermination du régime de combustion n'a lieu qu'aux points où le taux de réaction est non-nul.

### II.4.2.3 Dynamique et structure de la flamme

L'évolution temporelle du maximum du taux de réaction est tracé planche PII.8.-(a) (page 43). Il s'avère que la flamme suit un régime pulsé périodique, avec deux pics maximum de réaction sur une période de 8 temps de flamme. Le premier point à préciser est que, de par la nature de la simulation, plusieurs gouttes (6 à 10) sont contenues dans une épaisseur de flamme formant ainsi un champ quasiment continu. Ces pulsations ne proviennent donc pas de l'évaporation goutte à goutte de la phase liquide du domaine mais d'une dynamique plus générale de la flamme. L'intensité du taux de réaction pour les deux pics est très proche de l'unité ce qui correspond au taux de réaction maximal de la flamme stœchiométrique gazeuse. Afin de mieux comprendre ce qu'il se passe au sein de la flamme cinq positions A, B, C, D et E (équivalente à A) ont été repérées dans la période de double pulsation (planche PII.8.-(a)).

L'évolution du maximum du taux d'évaporation au cours du temps a été tracé figure PII.8.-(b). Il s'avère que cette donnée est maximale pour la position B correspondant au premier pic de taux de réaction et, si l'on regarde la position de ces deux maxima (taux de réaction, taux d'évaporation), qui ont été tracés planche PII.8.-(c), on peut remarquer que pour le repère B, ils sont confondus. Notons que sur cette figure, une diminution de la position indiquée en abscisse correspond à une progression de la flamme, celle-ci se propageant selon la direction inverse de l'axe  $x$ . Le premier pic de taux de réaction correspond bien à la combustion de la vapeur en cours d'émission par un groupe de gouttes. En revanche, pour le second pic de réaction (position D, planche PII.8.-(a)) l'évaporation est inexistante (planche PII.8.-(b)) et le maximum du taux de réaction se repositionne en aval (planche PII.8.-(c)). Il s'avère que la combustion locale d'un groupe de gouttes s'effectue en deux étapes

résumées dans la figure qui suit:



ou encore dans la planche PII.8.-(d) représentant une trajectoire périodique dans l'espace des taux de réaction. Partons du point A, un moment où la flamme brûle très faiblement et l'évaporation commence à s'intensifier du fait de la diffusion de la chaleur vers les gouttes. Dès que des conditions idéales de mélange sont atteintes, la flamme se développe fortement (instant B) et progresse rapidement, entraînant devant elle un intense front d'évaporation. Cependant les temps caractéristiques de la flamme sont plus courts que le temps caractéristique d'évaporation et lorsque tout le combustible issu du premier front d'évaporation est consommé, la flamme s'éteint presque (instant C). Cependant, en aval de ce premier front de flamme, le combustible liquide a fini de s'évaporer. Lorsque l'oxydant qui diffuse depuis les gaz frais est à nouveau mélangé avec la vapeur de combustible résultant du passage du premier front de flamme, une deuxième flamme prémélangée,

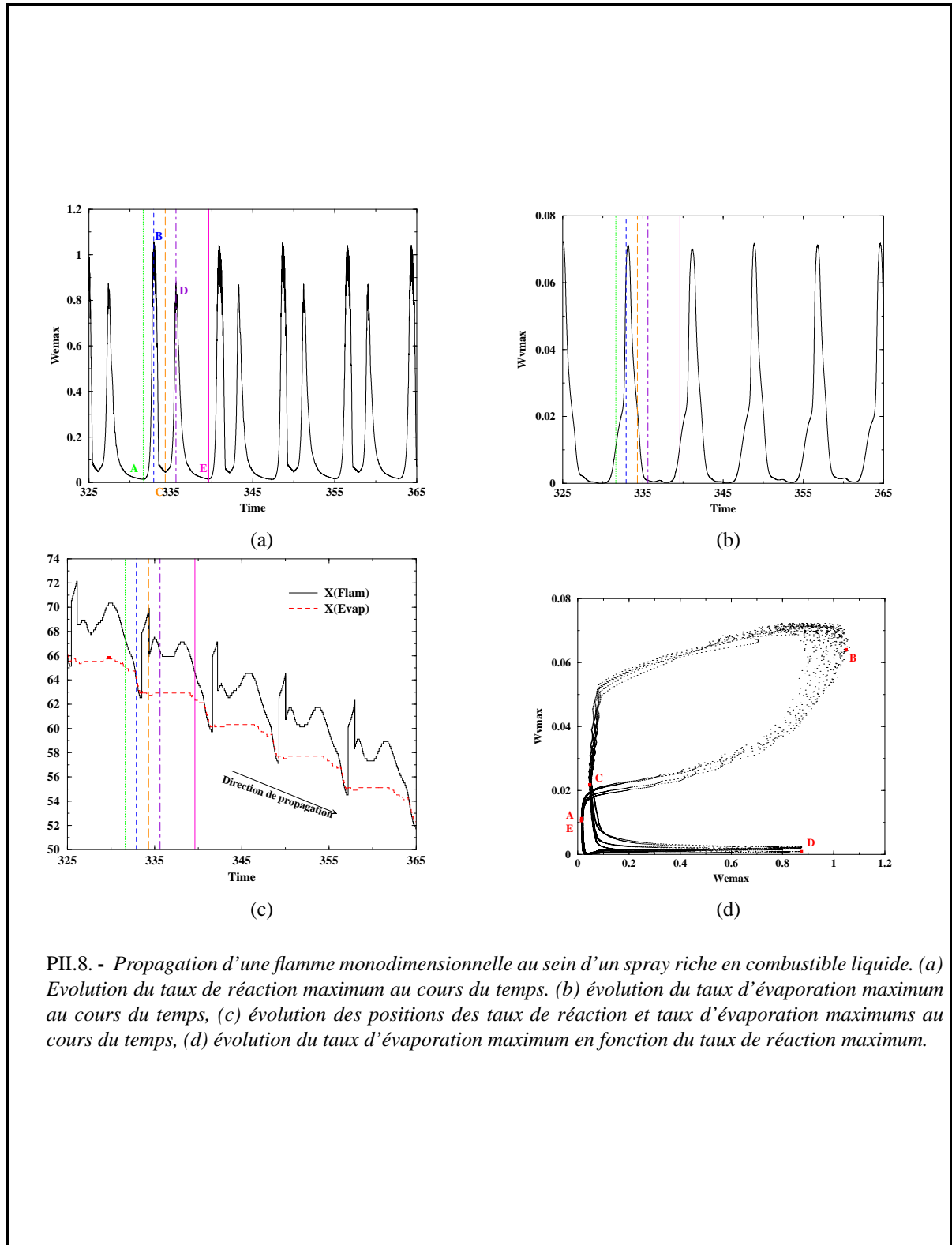
suit les traces de la première pour rejoindre à nouveau le front d'évaporation au niveau des gaz frais (instant D). Le processus étant périodique, nous nous retrouvons alors à nouveau dans la situation du point A.

De la même manière, nous avons pu observer des

comportements totalement différents en modifiant la richesse liquide initiale ou les temps caractéristiques d'évaporation du spray. Cette étude est en cours de réalisation et de nombreux points doivent encore être éclaircis.

**Conclusion:**

Ces résultats sont pour l'instant très préliminaires et nous travaillons actuellement sur cet axe de recherche qui apparaît fondamental pour la compréhension de la dynamique des flammes diphasiques. En collaboration avec le laboratoire EM2C de l'Ecole Centrale Paris (F. Laurent) et le MAPLY de Lyon (M. Massot), une double étude asymptotique/numérique va être mise en œuvre. Les instabilités qui sont apparues lors de la propagation de la flamme montrent une compétition entre plusieurs phénomènes dont les temps caractéristiques peuvent différer les uns par rapport aux autres: la vitesse de propagation de la flamme, la vitesse d'évaporation des gouttes mais aussi, et c'est un facteur qui n'a jamais été pris en compte jusqu'à présent, la vitesse d'expansion des gaz autour des gouttes en cours d'évaporation. La conjonction de ces trois paramètres implique des structures de flamme et des dynamiques de propagation totalement différentes de celles des flammes gazeuses.



PII.8. - Propagation d'une flamme monodimensionnelle au sein d'un spray riche en combustible liquide. (a) Evolution du taux de réaction maximum au cours du temps, (b) évolution du taux d'évaporation maximum au cours du temps, (c) évolution des positions des taux de réaction et taux d'évaporation maximums au cours du temps, (d) évolution du taux d'évaporation maximum en fonction du taux de réaction maximum.

### II.4.3 Elaboration d'un diagramme de combustion

*Le travail présenté dans cette partie a fait l'objet d'un financement contractuel avec le Ministère de la Recherche dans le cadre du Comité d'Orientation Supersonique (COS). Un article concernant une partie ce travail a été soumis à Journal of Fluid Mechanics très récemment. Notre objectif, outre l'analyse de la propagation des flammes au sein de brouillards de gouttes est le test et la validation de modèles capables de détecter le régime local de combustion et d'appliquer le modèle de prémélange ou de diffusion adéquat.*

#### II.4.3.1 Historique laminaire

Les premiers jalons concernant la classification de flammes sprays ont été posés par deux équipes de chercheurs. Un premier diagramme développé par Chiu et ses collègues [81, 82, 83, 84] consiste à déterminer la structure des flammes (planche PII.9.a, page 49) se propageant à travers un nuage de gouttelettes plongé dans un combustible préchauffé au repos. Les régimes de combustion ont ainsi été classifiés en fonction d'un nombre de groupe dénoté  $G$ . Ce nombre sans dimension peut être vu comme le rapport entre la vitesse caractéristique d'évaporation et la vitesse de diffusion de la température au sein du nuage. Candel *et al* [85] ont montré que, la relation  $G \approx 5N^{2/3}/S$  pouvait être appliquée entre le nombre de groupe  $G$ , le nombre total  $N$  de gouttes dans le nuage et le paramètre de séparation  $S$ . Ce dernier est en fait le rapport  $S = \delta_s/\delta_{r_f}$  entre la distance moyenne intergoutte  $\delta_s$  et le rayon  $\delta_{r_f}$  de la flamme de diffusion qui entourerait une unique goutte ayant les propriétés moyennes des gouttes du nuage. De ce fait, lorsque le nombre de séparation décroît, il existe un point où la topologie de la flamme passe d'un régime de combustion individuel à un régime de groupe. En fixant  $S$  et en faisant varier  $N$ , deux modes principaux pour la combustion de spray peuvent être identifiés (fig. PII.9.a). Dans le premier cas, si  $G \gg 1$ , les gouttes sont trop proches les unes des autres pour permettre la diffusion de température au sein du nuage et seule une couche externe de liquide est évaporée. La flamme reste donc à une distance fixe du bord du nuage. Dans le second cas, si  $G \ll 1$ , les gouttes sont suffisamment éloignées les unes des autres pour que les gaz chauds pénètrent dans le nuage. Alors un processus in-

dividuel d'évaporation et de combustion a lieu autour de chaque goutte. Le premier mode est qualifié d'externe, le second mode d'interne. Une transition régulière entre ces deux modes a été décrite par Chiu *et al* [84] qui ont introduit des régimes intermédiaires de combustion (fig. PII.9.a).

Dans un deuxième temps, Chang puis Borghi ([86, 87, 88, 89]) ont ajouté à cette analyse la possibilité de prendre en compte les propriétés des flammes. Ils ont donc introduit l'épaisseur de flamme  $\delta_f$  et son temps caractéristique  $\tau_f$  qu'ils ont associés au temps d'évaporation moyen  $\tau_v$  des gouttes. D'après le diagramme qu'ils ont pu dériver (planche PII.9.b), lorsque  $\tau_v \ll \tau_f$ , les gouttes s'évaporent très rapidement et une combustion de type prémélangée a lieu quelles que soient la distance intergouttes ou l'épaisseur de flamme. Si le temps d'évaporation est plus important, pour  $\delta_f > \delta_s$ , les gouttes pénètrent dans les zones de réaction/diffusion car la flamme est plus épaisse que l'espace inter-goutte  $\delta_s$ . Cette situation mène rapidement à un épaississement de la flamme. Après le passage d'un premier front partiellement prémélangé, des zones secondaires de réaction peuvent demeurer. La topologie de cette zone secondaire dépendra du paramètre  $S$ . Pour les petites valeurs de  $S$ , les gouttes brûlent individuellement ou alors sont amalgamées en petits groupes (ou clusters) entourés par une flamme. Il s'agit du "régime de combustion de groupe". Lorsque la valeur du paramètre  $S$  augmente, Borghi *et al.* ont aussi discerné l'apparition d'un régime de percolation et d'un régime de poches (planche PII.9.b).

A la fois Chiu *et al* et Borghi *et al* ont défini ces structures de flamme avec deux restrictions majeures: (1) l'écoulement est initialement au repos et (2) la notion de richesse fuel/oxydant n'a pas été abordé. Pourtant, dans un système de combustion de spray cette richesse est un point clef capable d'influencer les structures de flamme, la stabilité de combustion ainsi que l'ensemble des phénomènes physiques prenant place au sein de la chambre. C'est pourquoi, nous avons travaillé sur l'extension de ce diagramme afin de prendre en compte les variations de richesse d'injection et une phase porteuse turbulente. Une flamme en V turbulente ainsi que une flamme jet faiblement turbulente associée à un écoulement d'entraînement préchauffé ont été mises en œuvre avec, comme paramètres d'études, la richesse d'injection, le temps caractéristique d'évaporation et la densité de gouttes.

### II.4.3.2 Combustion diphasique prémélangée

D'après Borghi, le diagramme proposé planche PII.9.b, pour un cas purement laminaire où les gaz frais sont au repos, peut être étendu au cas turbulent avec une modification des limites de régime. Cependant, les structures de flammes de type groupe, percolation, etc. doivent pouvoir être retrouvées sachant que la turbulence va principalement modifier les données de distance inter-gouttelettes et provoquer des variations locales de densité de gouttes. Nous supposons, dans un premier temps, que la turbulence est assez intense pour modifier la topologie du spray et plisser la flamme mais pas suffisamment pour provoquer des extinctions locales dues aux étirements.

Afin, entre autres, de confirmer que les structures de flammes décrites par Borghi sont identiques dans un cas turbulent, nous avons développé une première configuration permettant d'analyser les flammes spray initialement prémélangées. Il s'agit d'une configuration de flamme en V plongée dans une turbulence spatialement décroissante (planche PII.10., page 50). Cette configuration est assez complexe à mettre en œuvre d'un point de vue numérique dans les codes de DNS compressible où les ondes acoustiques peuvent se trouver "piégées" par la flamme. (cf. papier en annexe "*Direct numerical simulation of statistically stationary one- and two-phase turbulent combustion: a turbulent injection procedure*". Néanmoins elle possède de nombreux avantages non négligeables : un contrôle parfait des données de la turbulence et du spray injectés dans le domaine et la possibilité de faire des statistiques moyennes très précises (configuration statistiquement stationnaire).

Au sein du spray injecté dans la turbulence de type 'turbulence de grille' une petite zone du domaine de calcul relaxe vers une condition de chimie à l'équilibre afin de stabiliser la flamme. A partir de ce point, deux flammes vont se développer et évoluer en fonction des

conditions locales de la turbulence et du spray. Une base de données complète a été développée. Cependant, dans ce manuscrit seuls quelques exemples sont montrés. La richesse liquide d'injection est égale à 1 et 1.13. Deux densités de gouttes ont été considérées  $d = 262$  et  $d = 65$  gouttes par "volume de flamme", l'épaisseur de flamme étant notre référence de taille, ainsi que deux niveaux de turbulence:  $u' = 15\%$  et  $u' = 30\%$  de la vitesse moyenne de l'écoulement qui est elle-même égale à dix fois la vitesse de la flamme prémélangée stœchiométrique gazeuse de référence.

A la fois sur la planche PII.10. et la planche PII.11. il est possible de retrouver les structures de flammes décrites par Borghi: la flamme "prévaporisée", et donc prémélangée, peut être vue planche PII.10.-(a) et PII.11.-(a). Le régime de percolation d'un front de diffusion derrière un front prémélangé est montré planche PII.10.-(c,d). Un régime de groupe est quasiment atteint planche PII.11.-(d). Alors que des poches de diffusion (plus rares) apparaissent mais ne forment pas un régime à part entière du fait des paramètres choisis pour ces simulations.

L'ensemble de cette base de données qui vient tout juste d'être développé va nous permettre à présent de tester des modèles de combustion de sous-maille pour les régimes partiellement prémélangés mais aussi d'effectuer des analyses (d'où l'avantage d'être statistiquement stationnaire) concernant les équations de bilan de la variable de progrès, de la fraction de mélange mais aussi de la densité de surface de flamme en présence d'une phase liquide en cours d'évaporation.

Cependant, si les structures de flamme prémélangées sont bien définies, il nous est apparu intéressant de considérer une étude similaire dans le cadre des flammes non-prémélangées telles les flammes jets.

### II.4.3.3 Structures de flammes jets

Dans un premier temps les structures de flammes ont été étudiées de manière individuelle en suivant les deux axes montrés figure PII.12.. L'axe vertical indique la richesse d'injection du combustible liquide  $\Phi_{L0}^I$  par rapport à l'oxydant et l'axe horizontal représente la densité moyenne de gouttes au sein du spray  $d^I$  et, incidemment, le temps d'évaporation. En effet, pour une richesse d'injection fixée, diminuer la densité revient à

augmenter la taille de chacune des gouttes et donc, augmenter son temps d'inertie et d'évaporation. Dans chacune des cellules du tableau présenté planche PII.12., les taux de réaction ainsi que le régime de combustion (prémélangé ou diffusion) sont indiqués. Le rapport d'équivalence  $\Phi_{L0}^I$  qui a été défini est celui du jet porteur uniquement. Celui du brûleur doit prendre en compte le flux d'oxydant de l'écoulement d'accompa-

nement et est 10 fois plus faible que  $\Phi_{L0}^I$ .

Il est possible de remarquer deux évolutions distinctes des structures de flamme: selon l'axe vertical, l'augmentation de la richesse d'injection provoque le développement de la combustion non-prémélangée alors qu'une diminution de la densité modifiera directement la structure des flammes en introduisant de nombreuses discontinuités dans le front de flamme.

Observons dans un premier temps les flammes les plus pauvres ( $\Phi_{L0}^I = 0.87$ , figure PII.12.). Le mélange pauvre est obtenu à partir de l'évaporation de petites gouttes avec un taux d'évaporation très court. C'est pourquoi près des zones de réaction, la phase liquide a disparu et le mélange n'atteint jamais la stœchiométrie. Dans ces simulations, l'écoulement d'entraînement est préchauffé pour accélérer l'évaporation des gouttes et l'obtention de conditions idéales d'allumage. Ce préchauffage provoque l'apparition d'un faible autoallumage dans un régime de diffusion pauvre dans la zone de la fraction de mélange la plus réactive [90]. Ces flammes de diffusion apparaissent en amont de la flamme partiellement prémélangée principale.

Lorsque l'on augmente légèrement la richesse d'injection ( $\Phi_{L0}^I = 1$ ), des zones locales riches en combustible commencent à apparaître car les fluctuations de vitesse peuvent regrouper les plus lourdes des gouttes. Des fronts de flamme prémélangée se propagent rapidement apparaissent avec, dans leur suite, des flammes doubles. La flamme double est composée d'une flamme de diffusion brûlant le combustible situé en aval d'une flamme de prémélange riche. En fonction de la richesse, la longueur de séparation entre le front prémélangé et le front de diffusion est plus ou moins grande.

En fixant la dilution à  $d^I = 248$  et en augmentant la richesse du jet (i.e. aller de bas en haut dans la planche PII.12.), des flammes non-prémélangées fixées sur des points triples apparaissent. En effet, le niveau de la fraction de mélange augmente le long de l'axe du jet et une flamme de prémélange riche se développe. De plus, des groupes de gouttes s'étant évaporés, une

première flamme de prémélange brûle l'oxydant au sein de la poche ainsi formée avant de ne laisser en aval qu'un anneau de diffusion (GROUP-1). Si l'on continue d'augmenter la richesse, le taux de réaction de la flamme prémélangée riche devient trop faible pour qu'elle puisse se propager et elle est repoussée vers l'extérieur du jet (EXT-3). Cette flamme est stabilisée grâce à un point triple. Ce schéma global d'évolution de la topologie des flammes est vérifié pour toutes les dilutions.

Il est possible à présent d'observer les structures de flamme lorsque l'on maintient constant la richesse d'injection (lignes horizontales, planche PII.12.). Il s'avère que la coexistence entre les deux régimes de combustion prémélangé et non-prémélangé n'est que peu affectée par la diminution de la densité  $d^I$ . Cependant leur distribution spatiale est fortement modifiée. Comme nous l'avons évoqué, diminuer la dilution entraîne une augmentation de l'inertie et du temps d'évaporation des gouttes qui vont alors se regrouper dans certaines zones. Une combustion très localisée apparaît alors (GROUP-4).

Une troisième grande famille de structures de flamme peut être observée à la frontière des structures externes (EXT) et des structures de groupe (GROUP). En effet, lorsque à la fois la richesse d'injection du spray et l'inertie des gouttes sont importantes, ces dernières forment des nuages de gouttelettes qui s'évaporent sous la forme d'un prémélange riche qui brûle alors l'ensemble de l'oxydant qui se trouvait au cœur du jet. Le reste du combustible (régime riche) réagit alors sous la forme d'une flamme de diffusion continue externe avec l'oxydant extérieur au jet. Ce régime hybride peut être observé sur la planche PII.12. (HYBRID-1,2,3). En revanche, si la richesse d'injection augmente encore, les deux régimes prémélangés et non-prémélangés deviennent externes (EXT-3). De même si l'inertie des gouttes augmente, les poches de combustible sont de plus en plus isolées et mènent à un régime de groupe.

#### II.4.3.4 Diagramme de combustion

Grâce aux différentes simulations qui ont été effectuées, un diagramme de combustion a pu être ébauché. Des plans de ce diagramme sont tracés figure PII.13. et le diagramme tridimensionnel complet est résumé figure PII.14.. Nous pensons que, au minimum, trois degrés de libertés sont nécessaires afin de

décrire les structures de flammes pour un jet turbulent: le rapport entre le temps caractéristique d'évaporation et le temps de flamme  $\tau_v/\tau_f$ , le rapport entre l'espace inter-gouttes moyen et l'épaisseur de flamme  $\delta_s/\delta_f$  et enfin, la richesse d'injection  $\Phi_{L0}^I$ . Cependant, pour une description plus complète, l'intensité de la turbulence

devrait intervenir, ce qui n'est pas encore le cas puisque les propriétés du fluide porteur demeurent les mêmes pour toutes les simulations.

Tout d'abord nous pouvons commencer par décrire les cas limites. Si le temps d'évaporation des gouttes est très petit devant le temps de flamme ( $\tau_v/\tau_f \ll 1$ ) alors la combustion est purement gazeuse bien que la topologie de la fraction de mélange soit issue de l'évaporation rapide de gouttes. Trois régimes de combustion peuvent alors être détectés en fonction des conditions locales de la turbulence (ou du Reynolds de jet) qui pourraient former un axe à part entière du diagramme ( $\tau_k$  pour le temps turbulent). Cet axe n'a pas été explicitement exploré par mesure de lisibilité. Dans un premier temps il est possible d'envisager que les gouttes s'évaporent dès la sortie du brûleur ( $\tau_v/\tau_k \ll 1$ ). Dans ce cas, un régime de combustion prémélangé 'externe' apparaît. En fonction de la richesse, la flamme sera de type 'bec Bunsen' autour de l'injecteur (cas pauvre ou proche stœchio, EXT-1 planche PII.12.) soit elle sera plus largement ouverte (cas riche, EXT-3 planche PII.12.) vers l'aval de l'écoulement et suivie par une flamme de diffusion qui consommera le combustible restant avec l'oxydant extérieur. Deux régimes intermédiaires dépendants principalement de la richesse et de la distance inter-gouttelettes (et donc à richesse fixée de la taille des gouttes) peuvent apparaître si  $\tau_v/\tau_k \approx 1$ : un régime de combustion de groupe (GROUP-1, pl. PII.12.) et un régime hybride composé de poches de prémélange et d'une flamme de diffusion continue (HYBRID-1, pl. PII.12.). Ces régimes apparaissent si certaines des gouttes les plus inertielles (tout en restant dans le domaine  $\tau_v/\tau_f \ll 1$ ) ont été regroupées par les structures tourbillonnaires du jet. Dans ce cas, elles s'évaporent sous la forme de poches de combustible. Si l'injection initiale est proche de la stœchiométrie, un régime de groupe (GROUP-1) se formera avec une flamme de prémélange et de diffusion locale à chaque poche. Si l'injection est trop riche, seul l'oxydant local sera consommé sous la forme de poches de flammes de prémélange riches et le combustible restant au cœur du jet sera alors brûlé avec l'oxydant extérieur grâce à une flamme de diffusion continue (HYBRID-1).

Il est important de noter que les régimes principaux de flamme spray apparaissent déjà dans ce plan où le temps d'évaporation des gouttes est très petit devant le temps de flamme. La combustion étant alors uniquement gazeuse.

Considérons à présent le cas où le temps d'évaporation n'est plus négligeable devant le temps

de flamme ( $\tau_v/\tau_k < 1$ ). Dans ce cas, les possibilités d'obtenir un régime de combustion externe diminuent au profil des régimes de groupe et hybrides. En effet, une augmentation du temps d'évaporation implique automatiquement la possibilité pour les gouttes de subir plus longtemps les fluctuations de la turbulence avant de disparaître. De ce fait leur densité peut fluctuer jusqu'à former des clusters. Par conséquent la taille du domaine d'apparition des régimes groupes ou hybrides augmente avec le temps d'évaporation. La présence des gouttes plus en aval du jet peut alors provoquer l'apparition de nouveaux régimes beaucoup plus particuliers. Citons par exemple le régime de 'diffusion centrale' (DIFF-1, pl. PII.12.). Ce dernier est directement dû à un temps cinétique important des gouttes. Dans ce cas, les structures tourbillonnaires éjectent le combustible liquide de part et d'autre de la ligne centrale du jet qui se compose alors d'un écoulement purement gazeux d'oxydant qui est la phase porteuse dans notre configuration. De ce fait, nous avons la configuration suivante: un jet central d'oxydant entouré d'un écoulement de combustible liquide (ou gazeux si l'évaporation est complète) qui brûle en régime non-prémélangé. A nouveau autour de l'écoulement de combustible, nous avons de l'oxydant issu, lui de l'écoulement d'accompagnement, et qui brûlera aussi en régime de diffusion avec la zone de combustible. Donc, hormis cette flamme de diffusion externe que l'on peut qualifier de classique, nous avons aussi une flamme interne de diffusion qui est un effet direct de l'inertie des gouttes (DIFF-1, DIFF-2, pl. PII.12.). Si jamais la richesse d'injection est trop importante, le jet central est alors composé d'oxydant pur mais aussi de combustible et dans ce cas, nous avons une flamme centrale de prémélange qui se propage (PREM-1, pl. PII.12.). Dans les deux cas (DIFF ou PREM) la flamme est principalement stabilisée par des extrémités de flamme de type flamme triple.

Même si la DNS ne peut encore être mise en œuvre sur des configurations expérimentales ou industrielles, il est possible d'effectuer des comparaisons qualitatives sur les régimes de flammes. Nous avons utilisé les résultats de Armelle Cessou et Denis Stepowski du CORIA [91] afin d'essayer de retrouver certaines des structures de flammes que nous avons défini dans le diagramme. Des comparaisons ont été effectuées sur la planche PII.15.. Trois régimes ont été tracés: le régime externe avec une flamme englobant l'ensemble du combustible, le régime hybride avec des poches centrales de prémélange et une flamme de diffusion continue externe. Et enfin, le régime, plus rare, de diffusion cen-

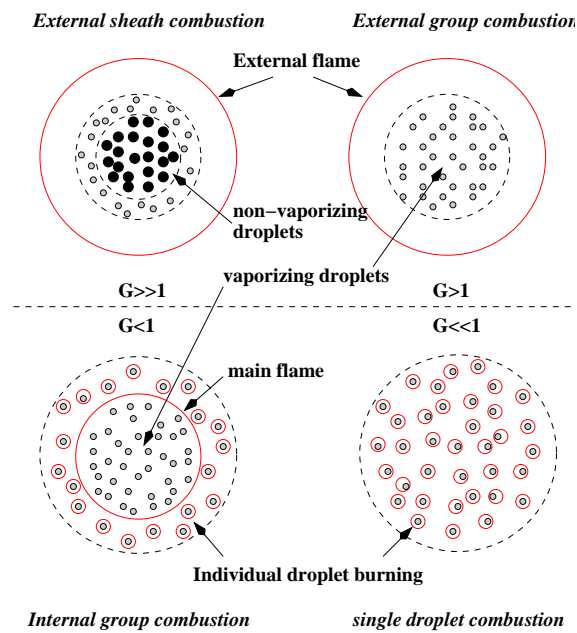


trale a aussi pu être observé expérimentalement. Il est intéressant d'observer que, malgré ses limitations spatiales, la DNS nous a permis de retrouver et de détailler les structures flammes expérimentales.

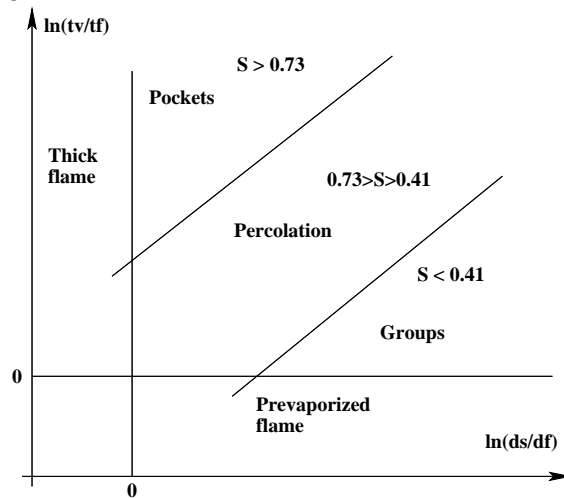
Conclusion:

Au cours de ce travail, nous avons développé une base de données relativement complète, à l'échelle de la DNS, concernant la structure des flammes diphasiques prémélangées (flamme en V) et non-prémélangées (flammes jet). Un aperçu des résultats a été proposé ici montrant la forte influence de la granulométrie du spray injecté sur les régimes de combustion. Des flammes appartenant principalement à une structure de type externe, groupe, ou hybride ont pu être calculées. Il a de même été possible de retrouver ces mêmes structures lors de l'analyse de mesures expérimentales.

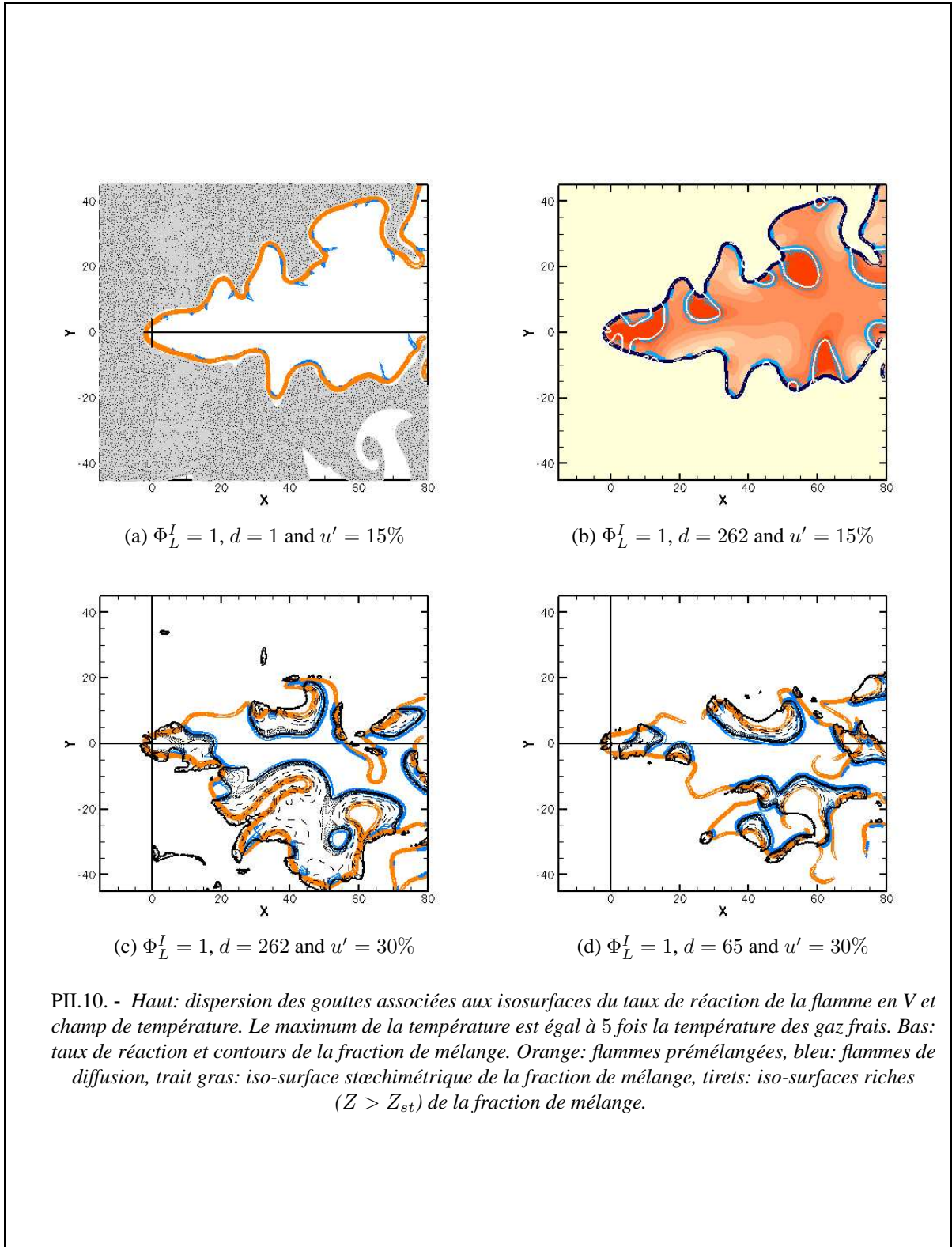
Les diagrammes de combustion tant dans le cas non-prémélangé que prémélangé montrent principalement la présence de flammes partiellement prémélangées associées localement à des flammes de diffusion ou des flammes prémélangées. Il apparaît nécessaire, dans le cadre de la modélisation des écoulements diphasiques instationnaires, d'utiliser des modèles de combustion capables de passer d'un régime à l'autre de manière dynamique. Pour cela, la variable normalisée de Takeno permettant de mesurer localement le taux de prémélange par rapport au taux de diffusion est un paramètre idéal.

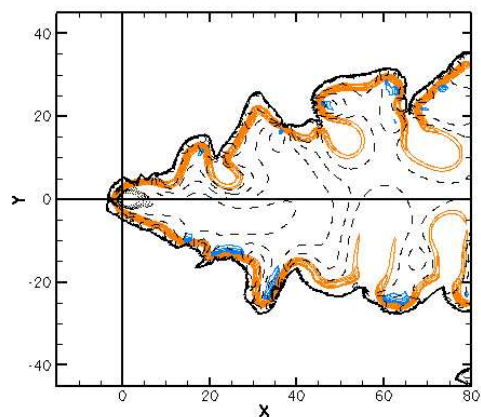


PII.9.a - Modes de combustion pour un nuage de gouttelettes (Chiu[84, 92]).

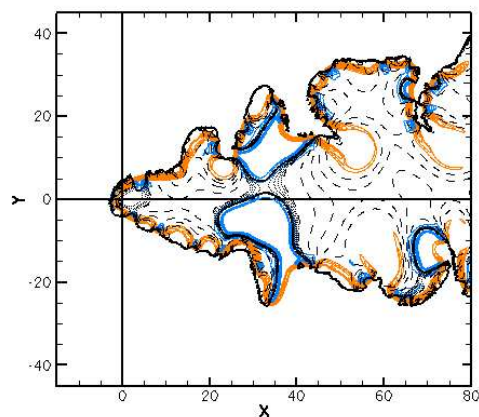


PII.9.b - Diagramme de combustion proposé par Borghi [87, 88].

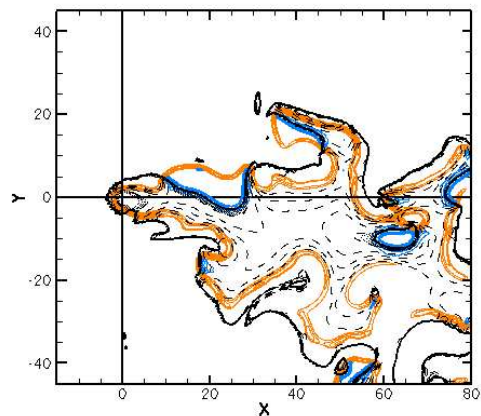




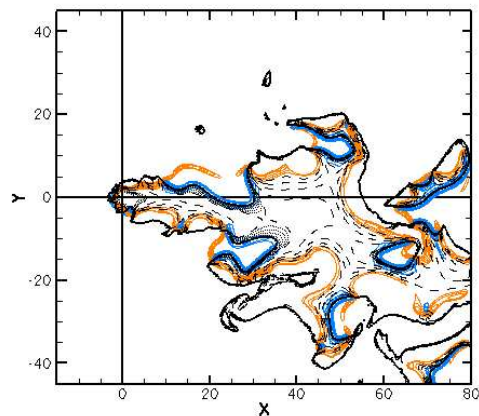
(a)  $\Phi_L^I = 1.13$ ,  $d = 265$  and  $u' = 15\%$



(b)  $\Phi_L^I = 1.13$ ,  $d = 65$  and  $u' = 15\%$

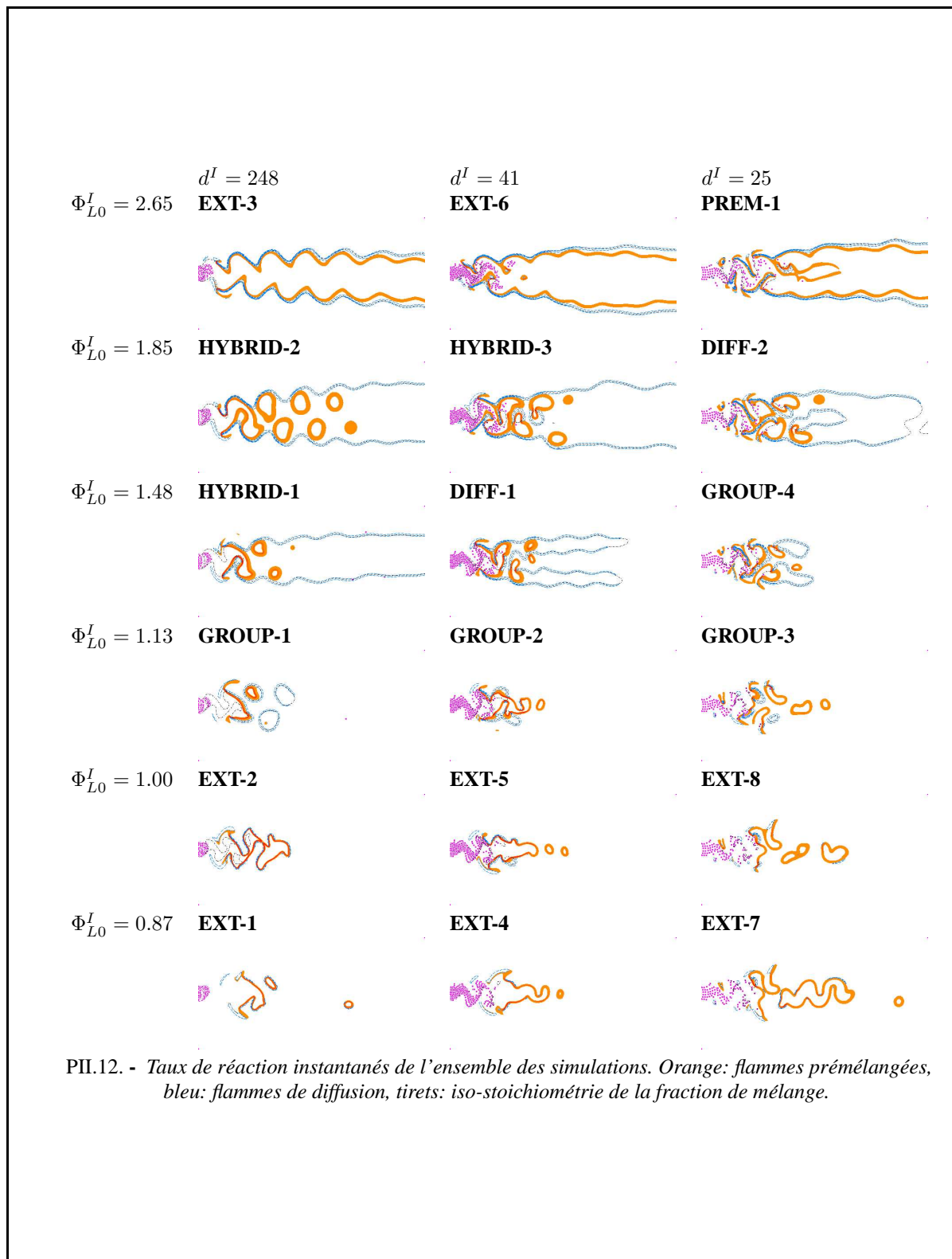


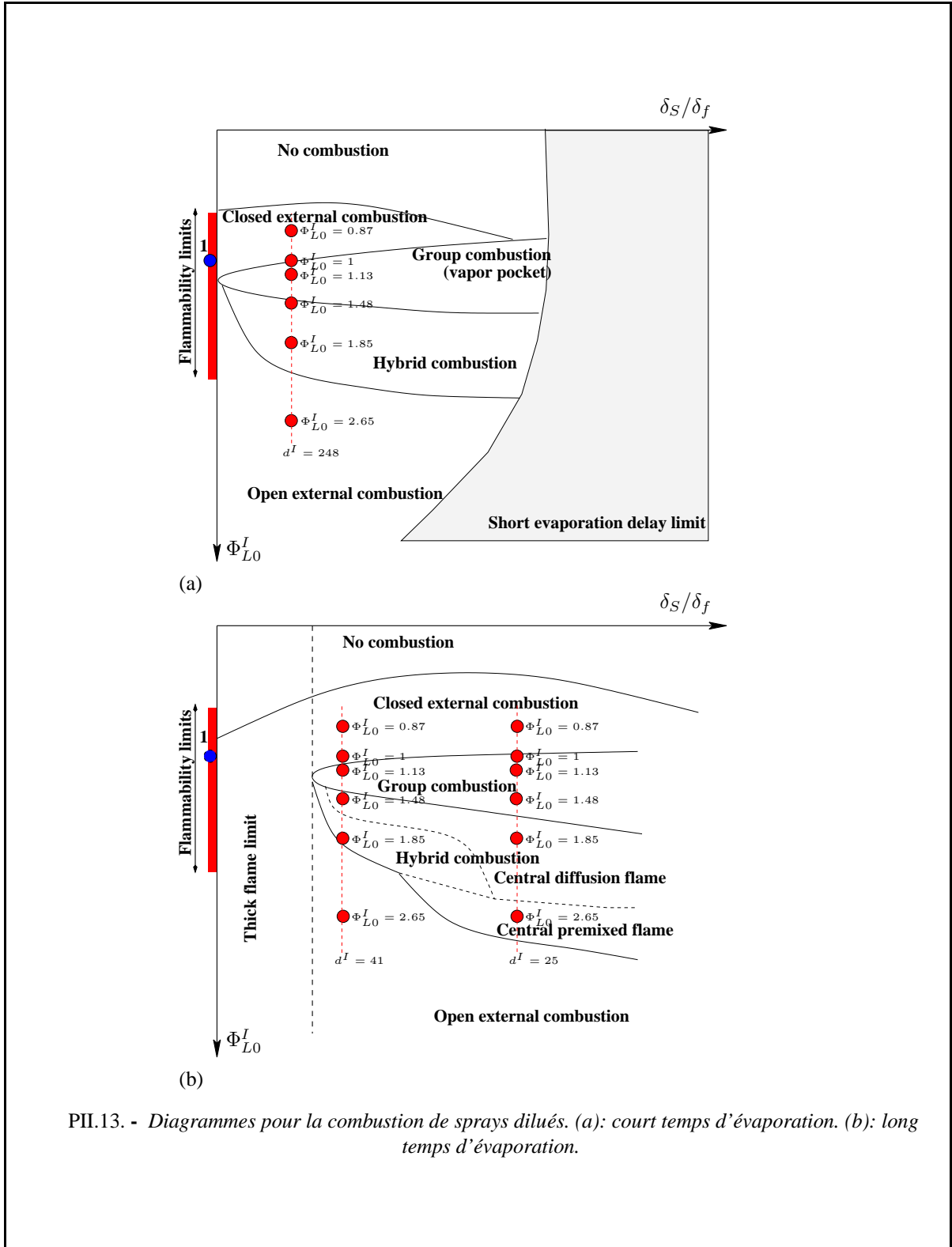
(c)  $\Phi_L^I = 1.13$ ,  $d = 65$  and  $u' = 15\%$

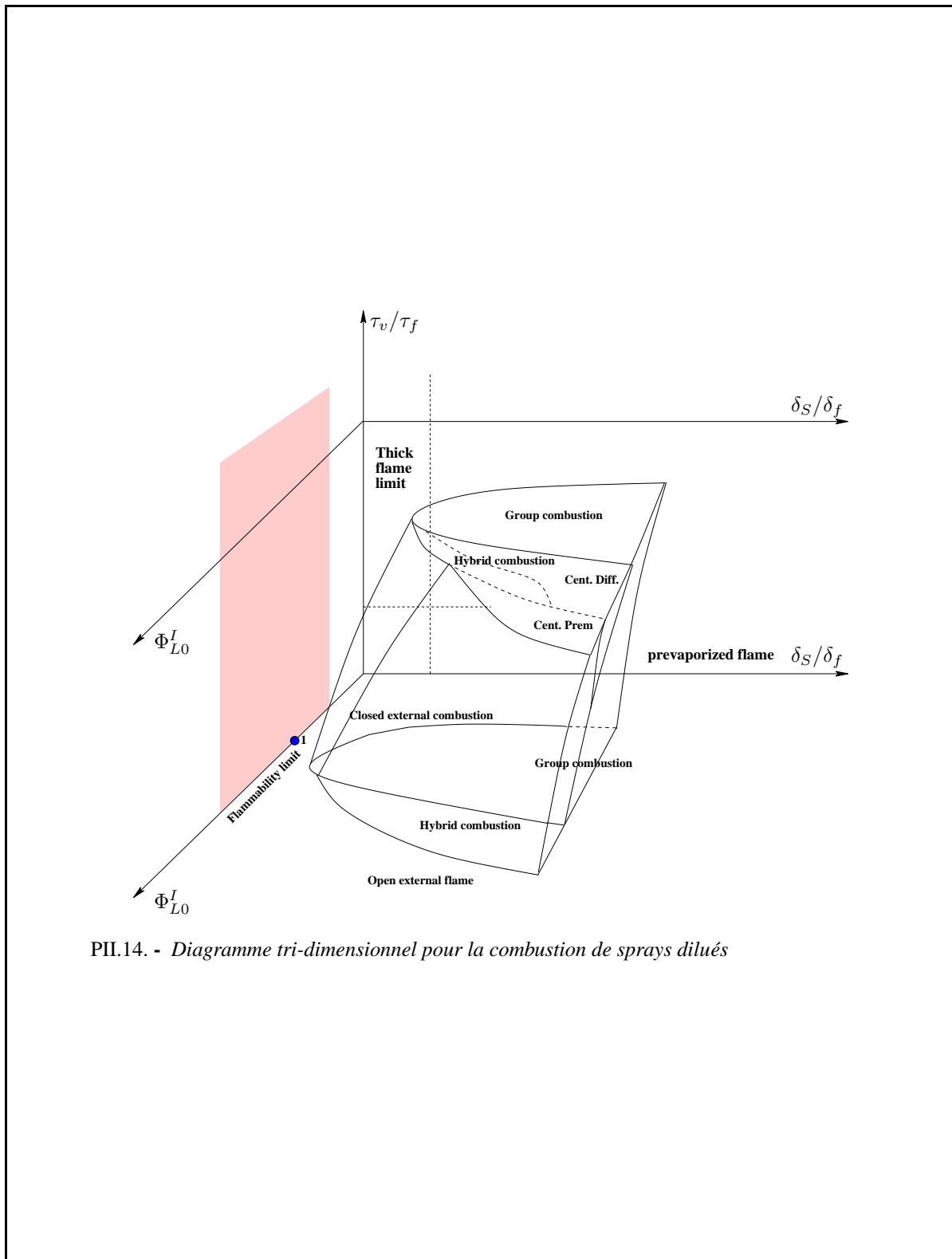


(d)  $\Phi_L^I = 1.13$ ,  $d = 65$  and  $u' = 30\%$

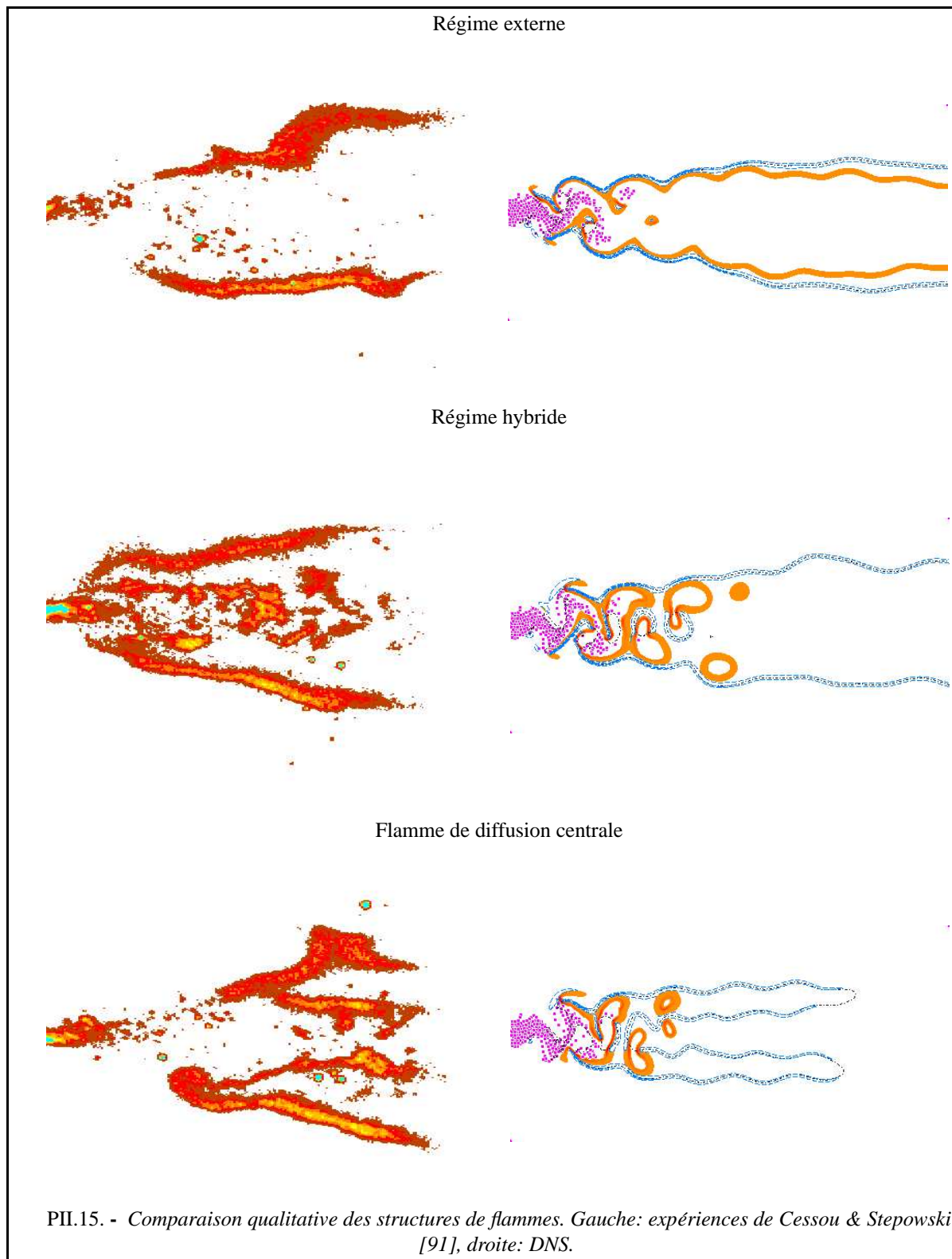
PII.11. - Taux de réaction et contours de la fraction de mélange. Orange: flammes prémélangées, bleu: flammes de diffusion, trait gras: iso-surface stœchimétrique de la fraction de mélange, tirets: iso-surfaces riches ( $Z > Z_{st}$ ) de la fraction de mélange.







PII.14. - Diagramme tri-dimensionnel pour la combustion de sprays dilués





### II.4.4 Instabilités de combustion

*A nouveau, les résultats présentés ici sont très récents et nous sommes encore dans une phase préliminaire de l'étude. Les résultats de cette partie ont été obtenus dans le cadre d'un financement, toujours en cours, de la Communauté Européenne (contrat MUSCLES). Il s'agit de la deuxième partie du travail de thèse de Cécile Pera, INSA de ROUEN. Ce travail est effectué en collaboration avec Sébastien Ducruix et Daniel Durox (du laboratoire EM2C de l'Ecole Centrale Paris) qui effectuent les recherches expérimentales alors que nous travaillons sur l'aspect numérique du sujet.*

La présence de fortes instabilités de combustion dans de nombreux systèmes industriels, et notamment les foyers aéronautiques, a généré de nombreux travaux de recherche basés sur cette thématique. Ces études, principalement basées sur les phénomènes d'instabilités dans les milieux purement gazeux (voir l'article de synthèse de S. Candel [93]) ont été effectuées à la fois de manière analytique, numérique et expérimentale. Un exemple complet peut être trouvé dans la thèse de S. Ducruix [94]. Cependant, du fait de la complexité des interactions qui entrent en jeu, l'aspect diphasique n'a été que très peu abordé jusqu'à présent. C'est pourquoi, dans un projet joint avec EM2C (Ecole Centrale Paris, S. Ducruix et D. Durox) qui travaille sur l'aspect expérimental du problème, nous nous proposons d'effectuer des simulations numériques qui nous permettront d'analyser les interactions entre les instabilités acoustiques, les flammes et le spray.

Dans cette étude, des flammes diphasiques laminares prémélangées sont considérées grâce à un brûleur

de type Bunsen (fig. II.11). Une flamme conique se développe alors. Des calculs gazeux qui servent de référence ont aussi été effectués. Le signal de vitesse au niveau du brûleur subit alors des fluctuations dont les interactions avec la flamme sont étudiées. Dans le cadre des écoulements gazeux, les interactions entre la flamme et la modulation ont déjà été étudiées [94]. Une étude similaire est donc envisagée dans le cas diphasique. Le problème est alors plus complexe car si l'interaction directe de la modulation sur la flamme existe toujours, une seconde interaction apparaît: celle de la modulation sur le spray qui va lui-même agir sur la flamme. Cette modulation affectera principalement la cinétique des gouttelettes (vitesse, trajectoire) mais elle peut aussi influencer les paramètres d'évaporation de ces dernières.

Dans l'exemple qui est présenté dans ce manuscrit, trois simulations de flammes coniques (calculs axisymétriques) ont été effectuées. Un premier cas purement gazeux (ST0) qui peut nous servir de référence, et deux cas diphasiques, le premier (SPRAY1, densité: 262 gouttes par volume de flamme de référence) avec des gouttes très légères ( $St = 0.02$ ) et le second (SPRAY2, densité: 65 gouttes par volume de flamme de référence) avec des gouttes plus lourdes ( $St = 0.4$ ). Dans les trois configurations, le rapport d'équivalence du brûleur est égal à 1. La flamme est stabilisée grâce à une flamme pilote située au niveau de la lèvres du brûleur. Une première série de calculs stationnaires avec une flamme stabilisée a été effectuée avant d'appliquer une modulation sinusoïdale au signal de vitesse à la sortie du brûleur. La vitesse moyenne d'injection est égale à cinq fois la vitesse de la flamme prémélangée stoechiométrique de référence.

#### *Flammes stationnaires*

La planche PII.16. (page 60) montre les trois flammes stationnaires issues du calcul pour les cas GAZ, SPRAY1 et SPRAY2. Dans tous les cas, le front de flamme est tracé sous la forme d'un front de prémélange orange et d'un front de diffusion bleu. La différenciation a été effectuée grâce au paramètre de Takeno ( $\xi_p$ ) introduit précédemment. De plus, les contours de la fraction de mélange  $Z$  ont été tracés. Il s'avère que des traces de flammes de diffusion apparaissent dans les trois configurations, y compris le cas gazeux. Une coupe au travers de la flamme nous permet de souligner que le taux de réaction lié à la diffusion est très faible voire

négligeable comparé au taux de réaction prémélangée. L'apparition de la faible flamme de diffusion est liée à l'inversion du gradient de fraction massique d'oxydant derrière le front de flamme principal. Cette inversion visible planche PII.16. (haut, droite) est due à l'entraînement de l'oxydant extérieur vers le front de flamme. La flamme peut cependant être considérée comme pleinement prémélangée au vu de la faiblesse du taux de réaction non-prémélangée. Une conclusion identique peut être obtenue à partir du profil issu du front de flamme de la simulation SPRAY1. Dans ce cas, le front non-prémélangé se décolle du front de flamme principal du fait d'une topologie différente de la frac-

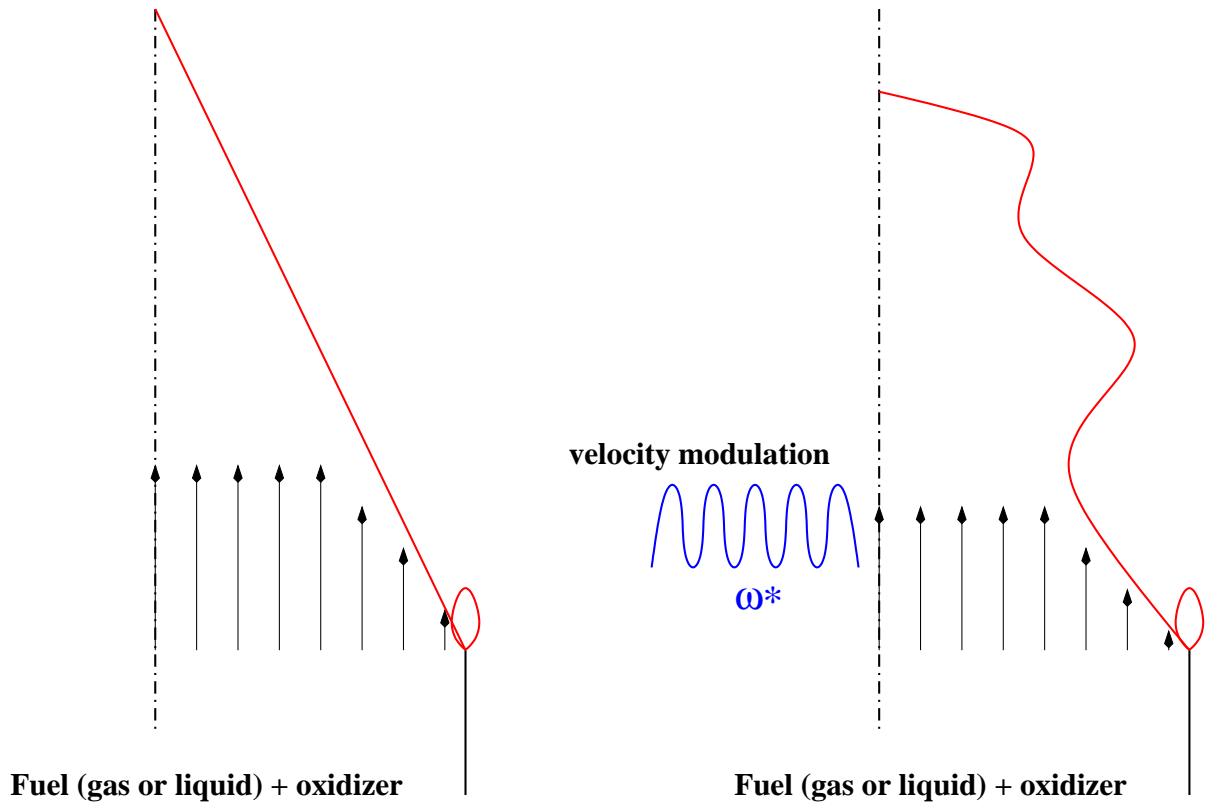


FIG. II.11 – Schéma de la configuration du bec Bunsen. Gauche: cas stationnaire, droite: interaction de la flamme avec une modulation de vitesse

tion de mélange issue de l'évaporation menant à l'apparition d'une zone très légèrement riche. C'est pourquoi, après que tout l'oxydant ait été consommé dans le premier front prémélangé, des traces de combustible sont alors brûlées avec l'air extérieur créant ainsi un front de flamme non-prémélangée dont l'intensité reste très faible (profil planche PII.16. (centre, droite)).

La deuxième configuration diphasique SPRAY2 concerne elle aussi une injection stœchiométrique de combustible liquide. Cependant, contrairement au cas SPRAY1 où beaucoup de petites gouttes (qui s'évaporent très rapidement) sont injectées afin d'atteindre ce niveau stœchiométrique, le cas SPRAY2 se compose de moins de gouttes dont la taille est plus importante. De ce fait, leur temps cinétique et aussi leur délai d'évaporation est plus important. En l'occurrence, le temps de flamme devient supérieur au temps d'évaporation et les gouttes dispersées peuvent traverser le front de flamme. Un premier front prémélangé se stabilise alors que les gouttes ne sont pas totale-

ment évaporées. Ce front se compose d'une flamme pauvre qui consomme l'ensemble du combustible gazeux qui a déjà été évaporé localement. Le reste de combustible liquide s'évapore derrière ce premier front de flamme et va brûler dans un régime non-prémélangé avec l'oxydant qui a réussi à traverser le premier front prémélangé pauvre (profil planche PII.16. (bas, droite)). Cependant cet oxydant n'est pas suffisant pour consommer l'ensemble du combustible qui brûlera alors dans un deuxième front de diffusion avec l'oxydant extérieur. Ce deuxième front est plus faible, décollé en aval du premier front de flamme. Si ce deuxième front est négligeable comparé au front prémélangé, ce n'est pas le cas du front de diffusion accolé au front de prémélangé pauvre et dont l'intensité est égale à 40% de ce dernier.

#### Flammes pulsées

Afin d'étudier la réponse de la flamme à des fluctuations du signal de pression et, par voie de conséquence, du signal de vitesse, une modulation sinusoïdale du pro-

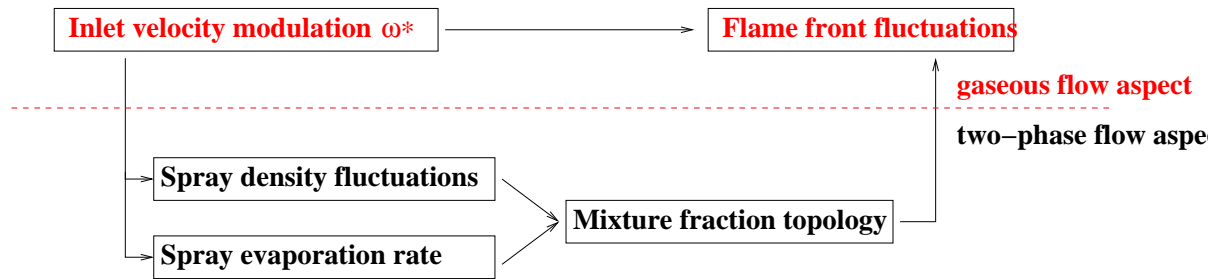


FIG. II.12 – Interactions possibles entre la modulation de vitesse en entrée et le front de flamme. Partie supérieure: interactions génériques gaz et spray, partie inférieure: interactions liées au spray.

fil de vitesse d'injection est imposée. Cette modulation est contrôlée via une fréquence réduite  $\omega^*$  [94], qui se ramène aux dimensions caractéristiques de la flamme conique stable:

$$\omega^* = \frac{\omega R}{S_f \cos \alpha_0}$$

où  $\omega$  est la pulsation effective,  $R$  le rayon de la base du cône,  $S_f$  la vitesse de la flamme laminaire de référence et  $\alpha_0$  le demi-angle au sommet du cône. La réponse de la flamme à la modulation en fonction de  $\omega^*$  nous permet d'analyser la réaction d'une flamme à des instabilités acoustiques. Dans les cas monophasiques, ce travail a déjà été mené à bien par S. Ducruix [94, 95]. Nous avons cependant effectué des calculs gazeux afin d'avoir des champs de référence avant d'étendre l'analyse aux écoulements diphasiques. La planche PII.17. (haut) montre la réponse de la flamme gazeuse aux modulations du profil de vitesse ( $\omega^* = 20$ ). Il est possible de voir le signal se propager le long du front de flamme depuis sa base jusqu'au sommet avec, dans cet exemple précis, la formation d'une bulle de prémélange qui se détache du sommet de la flamme principale et disparaît très vite. La propagation d'un signal très proche peut être observée dans le cas SPRAY1 sur la planche PII.17. (bas). En effet, deux particularités de cette configuration doivent être soulignées: du fait de leurs petites tailles, le délai d'évaporation des gouttelettes est très petit ( $\tau_v/\tau_f \ll 1$ ) par rapport au temps de flamme. et leur temps cinétique est très court ( $St \ll 1$ ). De ce fait, la combustion a lieu dans un milieu quasiment gazeux et le spray suit exactement les fluctuations de vitesse du gaz. Dans ce cas, la réponse de la flamme de la configuration SPRAY1 à la modulation de vitesse imposée en entrée est très similaire à celle d'une flamme gazeuse.

Si nous considérons à présent le cas SPRAY2, avec des gouttes de diamètre plus important menant à un

temps d'évaporation et un nombre de Stokes plus grand, la réponse de la flamme va être très différente de même que l'historique de ses interactions avec la modulation initiale. En effet, un double aspect doit être alors considéré: l'impact de la modulation directement sur la flamme et ses fluctuations par rapport à sa position stable mais aussi, l'impact de la modulation sur la position des gouttes avant que celles-ci ne s'évaporent et ne créent un mélange combustible/oxydant optimal (fig. II.12). Un troisième aspect est négligé pour l'instant dans cette étude: il s'agit de l'impact d'une éventuelle onde de pression sur le taux d'évaporation local des gouttelettes. Cependant, ce dernier point est en général négligeable comparé aux élévations locales de température dues aux fluctuations de combustion. La figure II.12 résume les multiples interactions qui peuvent donc apparaître dans les instabilités de combustion diphasique. L'aspect 'interaction modulation de vitesse / fluctuation de la densité locale de gouttes' devient particulièrement important lorsque le nombre de Stokes n'est plus négligeable. Trois situations principales peuvent se rencontrer pour une taille de goutte donnée:

1. La fréquence de la modulation est faible. De ce fait les fluctuations de vitesse qui apparaissent en entrée sont suffisamment lentes comparées au temps cinétique des gouttes pour être suivies par l'ensemble du spray. La densité locale de gouttes ne sera donc que très peu modifiée et l'influence de la modulation de vitesse sur le front de flamme sera le principal phénomène d'instabilité. Cet aspect a été abordé avec une fréquence réduite assez faible ( $\omega^* = 10$ ) sur la planche PII.18. (haut).
2. A l'autre extrémité de la gamme des fréquences, il est possible d'imposer des fluctuations de vitesse si rapides que les gouttes ayant une inertie importante ne sont pas capables de s'adapter et ne

perçoivent qu'un mouvement moyen général. A nouveau, même si les raisons en sont différentes, la densité de gouttes restera quasiment constante avant d'atteindre le front de flamme. Ce dernier, à nouveau, subira directement l'effet des fluctuations de vitesse et d'évaporation ( $\omega^* = 30$  sur la planche PII.18. (bas)).

3. Pour une gamme de fréquence intermédiaire dont les bornes dépendent directement du nombre de Stokes des gouttelettes, ces dernières ne percevront qu'une partie des fluctuations de vitesse du fait de leur inertie. Des fluctuations locales de

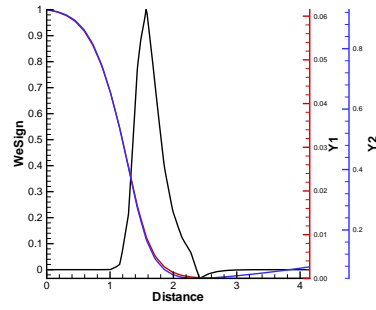
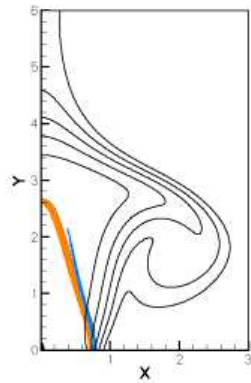
densité vont apparaître avec des zones riches et pauvres, l'injection moyenne étant effectuée à la stœchiométrie. Lors de l'évaporation des gouttes, de fortes fluctuations de la fraction de mélange vont alors apparaître menant à une combustion partiellement prémélangée du combustible. Des extinctions locales et des structures de flammes particulières apparaissent alors qu'elles ne sont pas présentes dans les interactions classiques de modulation/flamme ( $\omega^* = 20$  sur la planche PII.18. (centre)).

**Conclusion:**

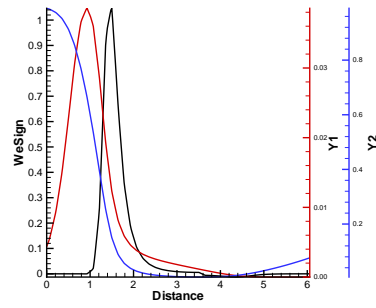
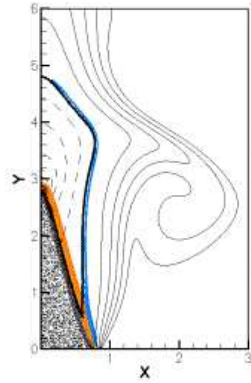
Les calculs préliminaires présentés ici nous ont permis de cerner les points clefs à analyser concernant les interactions entre les flammes diphasiques et une modulation de vitesse à l'entrée d'un injecteur. Un système complexe avec d'une part une interaction directe entre la modulation en entrée et la flamme et d'autre part une interaction indirecte avec une action significative du signal d'entrée sur le spray qui agit fortement sur la topologie du champ de fraction de mélange et donc, à nouveau sur la flamme. L'équilibre entre ces différentes interactions dépend fortement des caractéristiques du spray et notamment du nombre de Stokes et du délai d'évaporation par rapport au temps de flamme.

Le travail à venir afin de mener à bien cette étude va se décomposer en deux parties: d'une part, une étude analytique de l'action d'une modulation sinusoïdale de vitesse sur les fluctuations de densité de gouttes. Ce premier point nous permettra d'avoir une estimation des fluctuations de la fraction de mélange de combustible en fonction de la fréquence de la modulation et du nombre de Stokes des gouttes. Ensuite, une analyse de la réponse directe de la flamme en fonction de la modulation et de la topologie de fraction de mélange sera effectuée à travers une étude de l'évolution de la densité de surface de flamme.

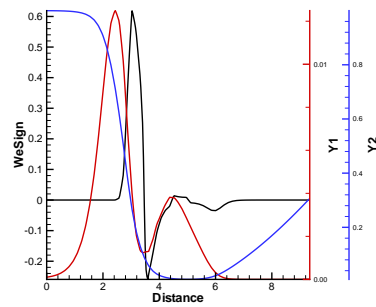
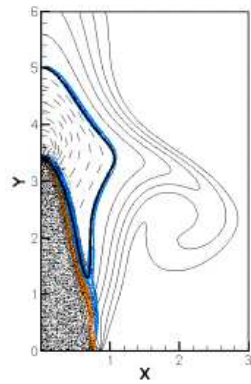
Cette étude nous permettra de définir, en fonction de la granulométrie du spray, les régimes critiques d'instabilité, le taux de réaction global, les structures de flamme et régimes de combustion.



(a) - GAZ

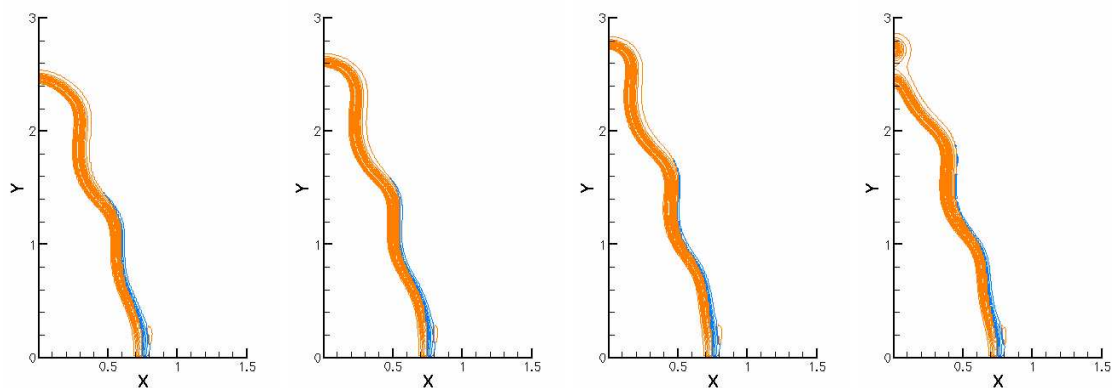


(b) - SPRAY1

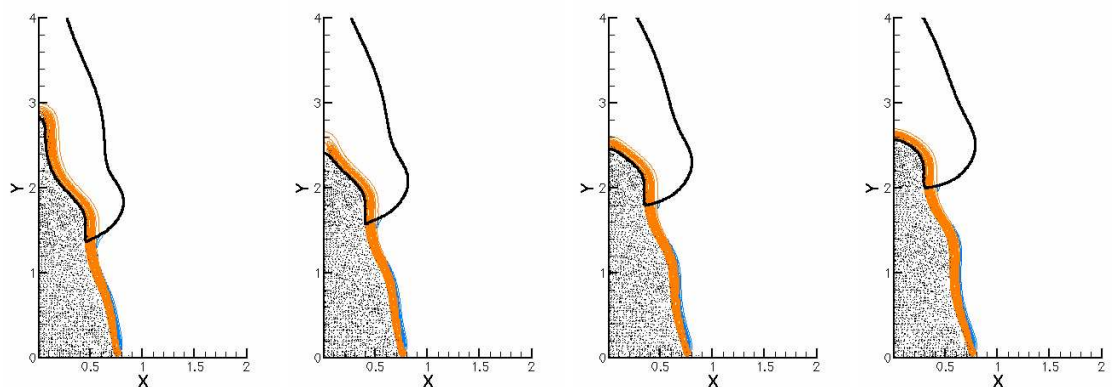


(c) - SPRAY2

PII.16. - Gauche: Taux de réaction (orange: prémélange, bleu: diffusion) des différentes flammes stabilisées avec contours de la fraction de mélange  $Z$  (ligne épaisse:  $Z_{stoecho}$ , tirets:  $Z$  riche, ligne continue:  $Z$  pauvre). Coupe perpendiculaire au front de flamme au niveau  $Y = 1.5$ , noir taux de réaction (positif=prémélange, négatif=diffusion), bleu: oxydant  $Y_2$ , rouge: combustible  $Y_1$ .

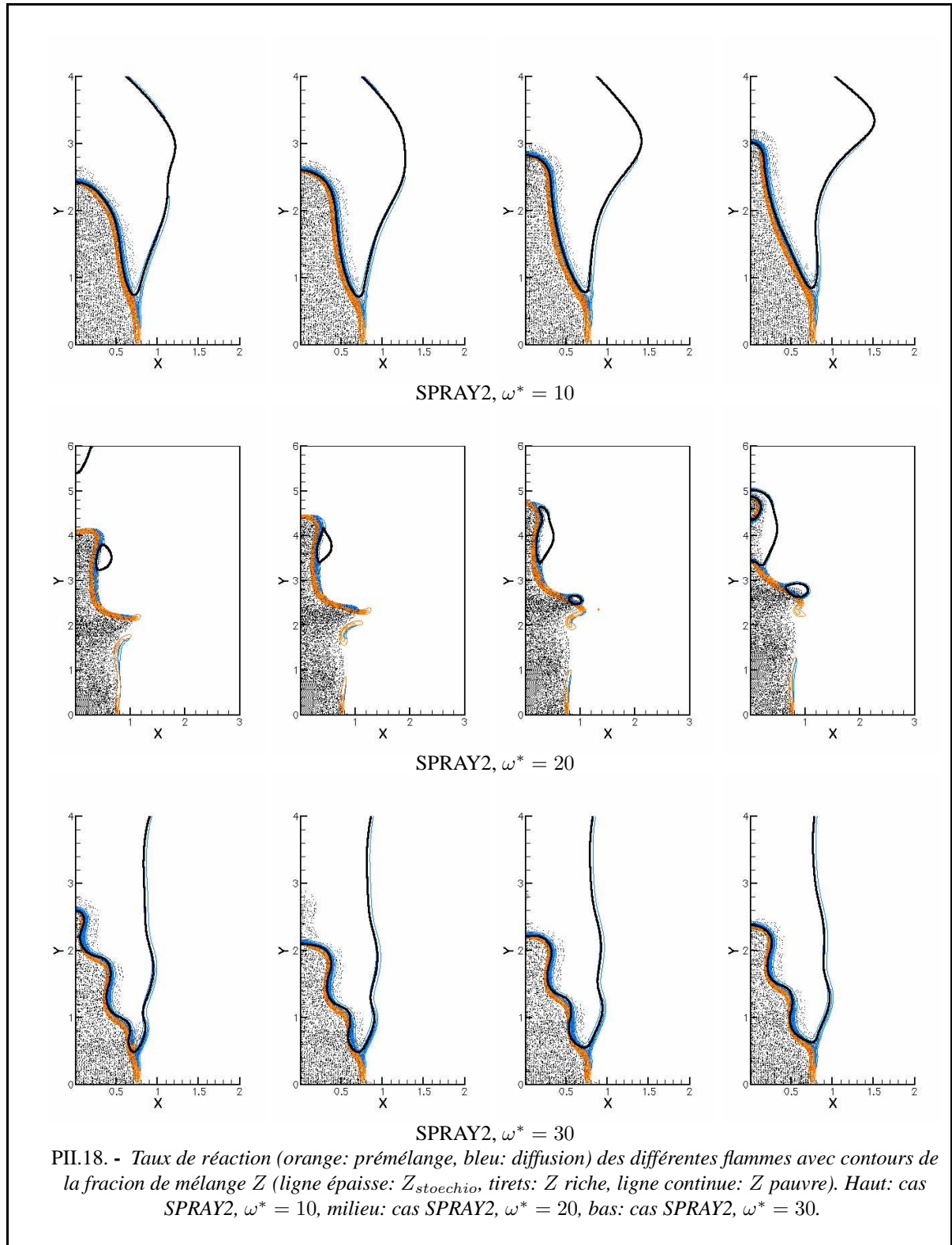


GAZ,  $\omega^* = 20$



SPRAY1,  $\omega^* = 20$

PII.17. - Taux de réaction (orange: prémélange, bleu: diffusion) des différentes flammes avec contours de la fraction de mélange  $Z$  (ligne épaisse:  $Z_{stoechio}$ , tirets:  $Z$  riche, ligne continue:  $Z$  pauvre). Haut: cas GAZ, pulsation réduite  $\omega^* = 20$ , bas: cas SPRAY1, pulsation réduite  $\omega^* = 20$ .



## II.4.5 Accrochage d'une flamme de diffusion - écoulement gazeux

### II.4.5.1 Introduction

*Les résultats présentés ici font partie du travail de thèse de Joan Boulanger, INSA de ROUEN. Luc Vervisch (Directeur de thèse) et Sandip Ghosal travaillaient aussi sur ce projet.*

- BOULANGER J., GHOSAL S., REVEILLON, J., VERVISCH, L., 2003, Effect of heat release in laminar diffusion flames lifted on round jets, *Combustion and Flame*, 134(4), pp 355-368.

**En annexe de ce document**

Au sein de couches de mélange bi-dimensionnelles, les flammes non-prémélangées laminares sont stabilisées par des flammes triples [96]. Ces dernières ont fait l'objet de nombreuses études expérimentales, numériques ou encore théoriques. Pour une bibliographie détaillée, le lecteur peut se reporter à l'article complet décrivant cette étude qui est situé en annexe de ce rapport. Il s'avère que la vitesse des flammes triples est contrôlée par deux paramètres : la courbure du front partiellement prémélangé, et le taux de dégagement de chaleur issue de la combustion. Augmenter la courbure du front réduit la vitesse de propagation de la flamme alors qu'une augmentation du dégagement de chaleur accroît la déflexion de l'écoulement en amont de la flamme et cette dernière se propage plus vite que  $S_L^o$ , la vitesse de propagation d'une flamme prémélangée plane stœchiométrique. Dans cette étude, nous nous sommes intéressés à l'effet du dégagement de chaleur lorsque une flamme triple se propage dans un écoulement axisymétrique. Nous nous sommes plus particulièrement attachés à décrire la hauteur de stabilisation de cette flamme en fonction du débit de combustible et du taux de dégagement de chaleur.

On suppose d'ordinaire que la base de la flamme se stabilise au voisinage du point, situé sur la surface iso-stœchiométrique iso- $Z_s$ , où la vitesse de l'écoulement est égale à la vitesse de la flamme triple. Si, dans un premier temps, nous négligeons l'effet du dégagement de chaleur sur l'écoulement, la flamme se stabilisera donc à l'intersection de la ligne stœchiométrique avec la ligne iso- $S_L^o$ . Le nombre de Schmidt détermine la position relative de ces deux lignes. Il est admis de manière générale que les variations de position de la base d'une flamme sont fortement corrélées au nombre de Schmidt mais les effets du dégagement de chaleur sont souvent

négligés alors qu'ils peuvent être très importants. L'objectif de cette étude est d'utiliser nos outils de simulation numérique directe afin d'analyser avec précision la modification par le dégagement de chaleur de la topologie de la ligne iso- $Z_s$  et iso- $S_L^o$  et par conséquent la modification de la distance d'accrochage de la flamme. Après avoir montré une modification significative de la hauteur d'accrochage en fonction du dégagement de chaleur, nous avons étudié le mécanisme de stabilisation de la flamme. Il s'avère que cette dernière se stabilise bien à l'intersection des isolignes de stœchiométrie et de vitesse  $S_L^o$ . Cependant la topologie de ces lignes est fortement modifiée par le dégagement de chaleur.

Trois critères différents ont été utilisés pour tenter une estimation analytique de la vitesse de propagation de la base de la flamme et donc de la hauteur d'accrochage :

Cas I : Flamme prémélangée plane stœchiométrique,

$$U_{F_b}^I = S_L^o$$

Cas II : Flamme triple avec effets de courbure,

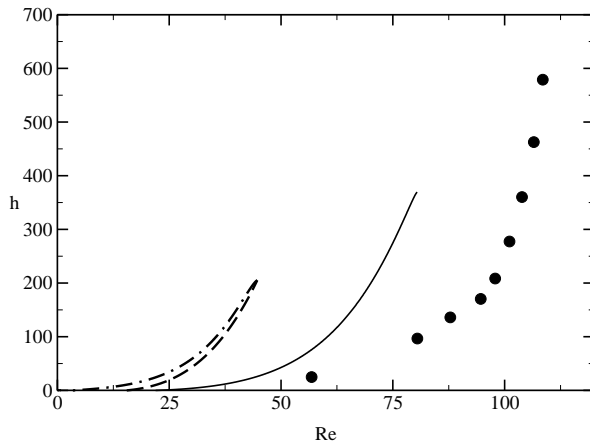
$$U_{F_b}^{II} = S_L^o - \mathcal{F}(\chi_s)$$

Cas III : Flamme triple avec effets de courbure et dégagement de chaleur,

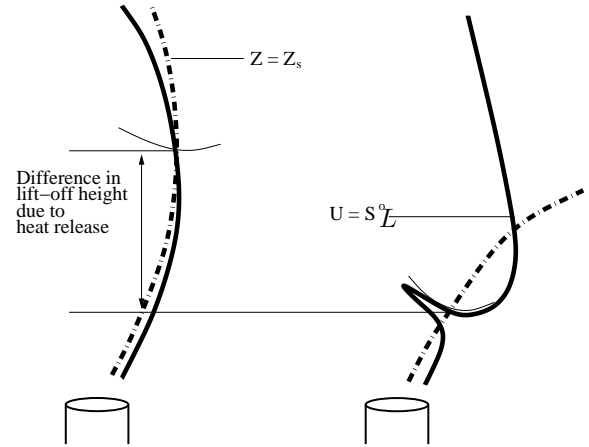
$$U_{F_b}^{III} = S_L^o(1 + \alpha) - \mathcal{F}_\alpha(\chi_s)$$

Dans ces trois cas,  $S_L^o$  est la vitesse de combustion de la flamme plane prémélangée. La première solution a été proposée par Hartley et Dold [97, 98] à partir d'une analyse asymptotique, cette approximation ne prend en compte ni la courbure ni le dégagement de chaleur du front de flamme. Les deux autres solutions sont basées sur une approximation de flamme triple développée par Ghosal et Vervisch [99] qui est obtenue en approximant le front de flamme par une solution parabolique.  $\mathcal{F}(\chi_s)$  and  $\mathcal{F}_\alpha(\chi_s)$  sont des corrections pour la courbure du front prémélangé et  $\alpha$  est le paramètre de dégagement de chaleur ( $\alpha = (T_s - T_o)/T_s$ , avec  $T_s$  température issue de la flamme plane stœchiométrique quand les gaz frais sont initialement  $T_o$ ).  $\chi_s$  est le taux de dissipation de la fraction de mélange juste devant la flamme. L'ensemble de ces critères a été comparé avec la solution obtenue grâce aux simulations numériques directes de la configuration.





(a)- Hauteurs d'accrochage. Cercles: simulations numériques, tirets: approximation en utilisant  $U_{F_b}^I = S_L^o$ , tirets-points: approximation en utilisant  $U_{F_b}^{II} = S_L^o - \mathcal{F}(\chi_s)$ , ligne: approximation en utilisant  $U_{F_b}^{III} = S_L^o(1 + \alpha) - \mathcal{F}_\alpha(\chi_s)$ .



(b)- Schéma de l'effet du dégagement de chaleur sur la hauteur d'accrochage. Gauche: sans dégagement de chaleur, droite: avec dégagement de chaleur.

FIG. II.13 – Effet du dégagement de chaleur sur la hauteur d'accrochage.

#### II.4.5.2 Effets du dégagement de chaleur sur les flammes laminaires décrochées.

La configuration de flamme non-prémélangée cylindrique a été mise en œuvre dans des simulations numériques directes pour différents taux de dégagement de chaleur et différents nombres de Reynolds de jet. Dans ce résumé, seul un taux de dégagement de chaleur  $\alpha = 5$  est présenté avec différents nombre de Reynolds. L'article complet correspondant à ce travail se situe en annexe de ce document. La configuration est tracée planche PII.19.-(a), page 66. Seule une partie de cette géométrie axi-symétrique est résolue par une méthode de suivi du front de flamme. La flamme est stabilisée pour un nombre de Reynolds donné et ses caractéristiques sont enregistrées. Ensuite, le débit de combustible est modifié, la hauteur d'accrochage change et le domaine est décalé vers la nouvelle position stationnaire de la flamme. En amont de cette flamme, dans une zone où l'écoulement n'est pas affecté par le dégagement de chaleur, la solution auto-similaire de Landau-Squire est utilisée afin d'appliquer des conditions limites correctes au calcul. Il a été vérifié que dans le cas d'un calcul inerte, la DNS retrouvait les résultats de l'analyse asymptotique de Landau et Squires avec une différence négligeable. Seules des flammes stabilisées au-delà de 10 rayons de jet ont été considérées

car la solution auto-similaire n'est pas valable dans les zones proches de l'orifice.

La hauteur d'accrochage obtenue par la DNS pour différents nombres de Reynolds peut être vue planche PII.19.-(b) avec la forme de la base de la flamme représentée par le dégagement de chaleur. Cette hauteur a été mesurée en considérant le point de taux de réaction maximum dans le domaine. Il apparaît que la structure de la flamme est très différente en fonction de la hauteur d'accrochage  $h$ . Pour de faibles valeurs de  $h$ , la flamme ressemble à une flamme triple classique avec un front prémélangé et une queue de diffusion. Ensuite, le front prémélangé s'agrandit au fur et à mesure que la flamme s'éloigne. En effet, le mélange a le temps de se développer correctement avant de pénétrer dans la zone réactive (par exemple, les cas  $Re = 107$  et  $Re = 109$  de la figure PII.19.-(b)).

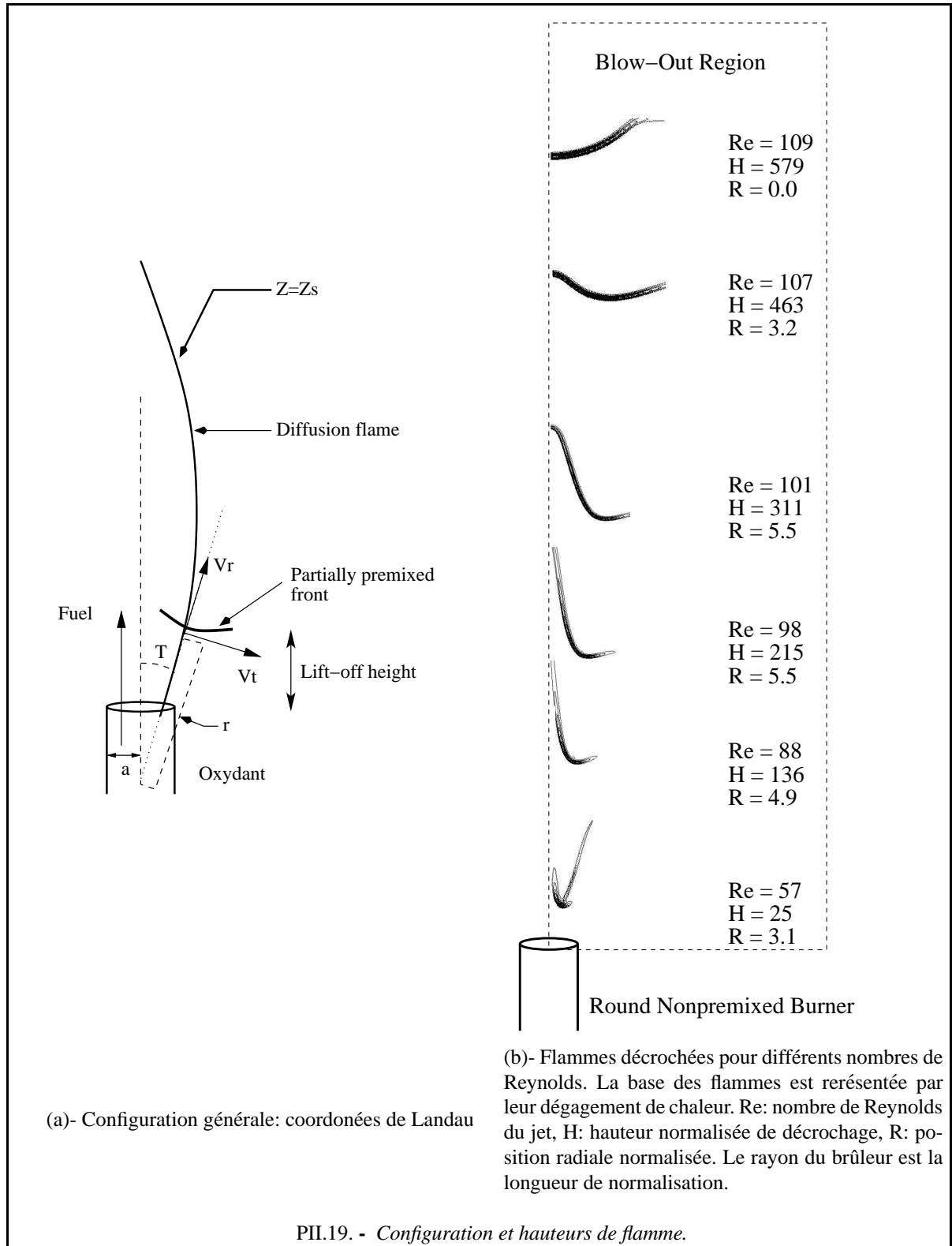
La figure II.13-(a) montre les différentes hauteurs de flamme en fonction du nombre de Reynolds qui ont été déterminées grâce à la DNS. Les prédictions analytiques correspondantes ont aussi été tracées. Il apparaît que la prédiction basée uniquement sur la vitesse de flamme laminaire  $U_{F_b}^I$  est la plus éloignée de la réalité. Si l'on tente de prendre en compte la cour-

bure de la flamme tout en continuant de négliger le dégagement de chaleur ( $U_{F_b}^{II}$ ), le résultat n'est guère meilleur. En revanche, si à la fois la courbure de la base de la flamme et le dégagement de chaleur sont intégrés au problème ( $U_{F_b}^{III}$ ), nous sommes plus proches des résultats de la DNS (fig. II.13-(a)). Il s'avère que si le dégagement de chaleur est plus faible, l'erreur diminue. Cependant, l'erreur demeure particulièrement importante. Elle est due au fait que la flamme modifie de manière importante l'écoulement des gaz frais en amont de la zone réactionnelle et donc dépasse le point d'accrochage où les iso-lignes de stœchiométrie et de vitesse

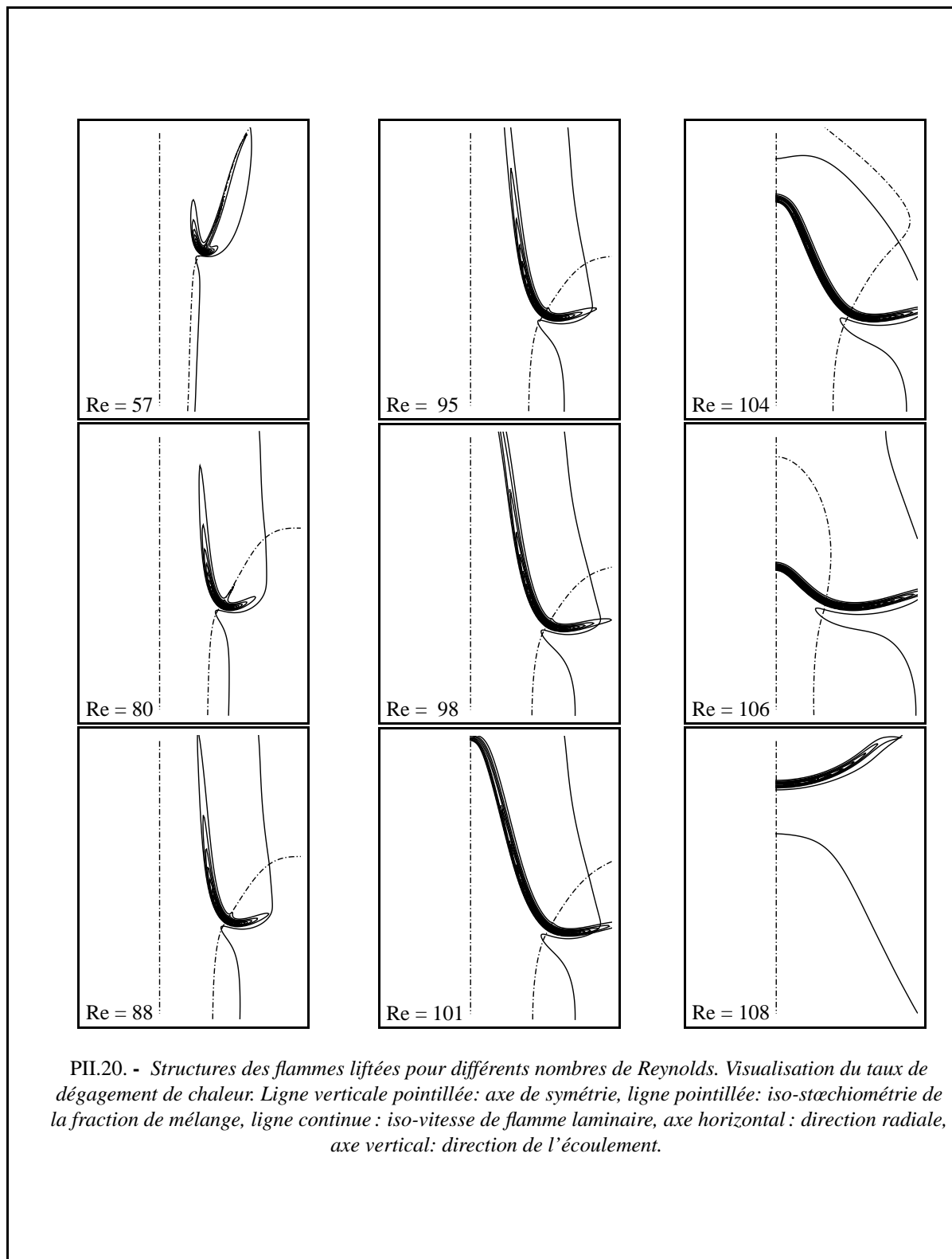
se croisent (fig. II.13-(b)). Cette hypothèse est confirmée par la planche PII.20. (page 67) où la dynamique de la flamme sur les surfaces iso- $Z_s$  et iso- $S_L^o$  a été tracée pour différents nombre de Reynolds. La surface iso- $S_L^o$  est très fortement déviée par la zone de réaction provoquant une stabilisation de la flamme plus proche du brûleur que s'il n'y avait pas d'expansion des gaz. Plus la vitesse (i.e. le Reynolds) du jet est importante, plus la déflexion est forte. Ce phénomène permet à la flamme de supporter des Reynolds importants et de retarder l'instant où elle sera soufflée.

Conclusion:

Des simulations numériques directes de flammes jets non-prémélangées ont été effectuées dans une configuration axi-symétrique. Les hauteurs d'accrochage de la flamme ont été comparées avec les résultats obtenus à partir d'une solution auto-similaire de jet froid et trois estimations différentes de la vitesse de propagation de la base de la flamme. La flamme se stabilise toujours à un niveau de la surface stœchiométrique en un point où la vitesse du fluide est proche de la vitesse de flamme prémélangée laminaire stœchiométrique. Cependant, la position du point de stabilisation est contrôlée par le dégagement de chaleur qui induit une déflexion de l'écoulement d'autant plus prononcée que le nombre de Reynolds de l'écoulement est important. De ce fait, la base de la flamme progresse à contre-courant et les extrémités de flamme ou triples flammes modifient fortement l'écoulement froid amont. De ce fait, il est nécessaire d'améliorer les théories de prédiction de hauteur d'allumage qui n'envisageaient pas l'impact de la flamme sur l'écoulement froid.



PII.19. - Configuration et hauteurs de flamme.



## II.5 Développement de méthodes et outils numériques

### II.5.1 Schéma de forçage, solveur spectral

*Les résultats présentés dans cette partie ont été obtenus dans le cadre de la thèse de Laurent Guichard et finalisés dans celle de Raphaël Hauguel. La méthode de forçage de la turbulence qui a été développée nous a amené à développer de nouvelles conditions aux limites et de mettre au point la configuration de la turbulence spatialement décroissante. Cette méthode a été utilisée dans des configurations décrites précédemment telle la dispersion du spray en cours d'évaporation (chap. II.2) et la stabilisation de la flamme en V diphasique (chap. II.4.3.2).*

- GUICHARD, L., REVEILLON J., HAUGUEL R., 2004, *Direct numerical simulation of statistically stationary one- and two-phase turbulent combustion: a turbulent injection procedure, Flow, Turbulence and Combustion, Accepté, sous presse.*

**En annexe de ce document**

Dans les systèmes expérimentaux ou industriels, la turbulence est généralement naturellement entretenue par la présence de gradients moyens de vitesses. Les phénomènes et interactions physiques ont alors lieu du sein d'écoulements turbulents dont les propriétés sont statistiquement stationnaires (jet, marche descendante, etc.). Cependant, l'étude fondamentale des écoulements turbulents se base généralement une turbulence homogène isotrope dont l'énergie se dissipe très vite. Il est particulièrement intéressant, dans certaines études, de pouvoir effectuer des analyses au sein d'une turbulence dont les propriétés moyennes (énergie, dissipation, taille de l'échelle intégrale) restent statistiquement stationnaire au cours du temps. Dans le cadre du travail présenté dans ce manuscrit, une méthode de forçage de la turbulence a été développée afin de pouvoir générer des conditions aux limites précises et ne générant pas d'ondes acoustiques artificielles dans une configuration de type turbulence de grille. Néanmoins la procédure peut aussi être utilisée d'un point de vue plus fondamental.

Il existe différentes façon d'effectuer le forçage

#### II.5.1.1 Procédure numérique

d'une turbulence homogène dans une DNS spectrale. Tout d'abord, il est possible de fixer l'amplitude des plus grandes structures du champ de vitesse spectral [100, 101]. Cependant, la stabilisation des paramètres de l'écoulement nécessite un temps très important. De plus, ces derniers sont statistiquement dépendants des grandes structures anisotropiques. Une autre solution est d'utiliser des schémas stochastiques [102] où l'énergie est ajoutée de manière aléatoire dans les modes à basse fréquence. Ces schémas semblent être efficace et sont statistiquement indépendants. Cependant, les fluctuations de certaines propriétés de la turbulence autour de leur valeur 'voulue' s'avèrent trop importantes. Une troisième possibilité est d'utiliser une méthode déterministe qui force les modes à basse fréquence (grandes structures) avec une quantité contrôlée d'énergie. Le travail le plus important dans ce domaine a été effectué par Overholt et Pope [103]. Le schéma de ces deux auteurs (OP-DFS pour Overholt and Pope Deterministic Forcing Scheme) relaxe le spectre de la DNS vers un spectre modèle en utilisant une fonction dépendante à la fois du temps et du nombre d'onde. La méthode OP-DFS est robuste et efficace. Elle n'introduit pas d'éléments stochastiques arbitraires dans le calcul qui atteint très vite un état stationnaire. Cependant ce schéma ne permet pas un contrôle 'parfait' du spectre simulé. En effet, la quantité d'énergie ajoutée aux basses fréquence est toujours positive et, dans certaines configurations, Les propriétés moyennes de la turbulence qui sont sensées rester constantes deviennent très instables. La méthode OP-DFS ne permet pas, entre autres, les calculs turbulents bi-dimensionnels qui, si ils ne sont pas utilisés dans les études théoriques, sont très utiles dans le cadre de la génération de conditions aux limites. C'est pourquoi, une nouvelle méthode a été développée. Il s'agit de la méthode FC-DFS pour 'Fully Controlled Deterministic Forcing Scheme'. De part sa construction, cette méthode permet un contrôle total de l'énergie de la turbulence grâce à la possibilité de prendre en compte une part d'énergie négative au niveau du spectre simulée.

Le forçage est effectué en ajoutant un terme source linéaire dans l'équation bilan du champ de vitesse spectral  $\widehat{u}$  dans l'espace des nombres d'onde :

$$\frac{\partial \widehat{u}}{\partial t} = \widehat{a} + \frac{f_\kappa}{\tau_f} \widehat{u} \quad , \quad (\text{II.16})$$

où  $\widehat{a}$  représente la contribution classique de Navier-Stokes. La fonction de forçage  $f_\kappa$  appartient aux Réels et dépend à la fois du temps  $t$  et du nombre d'onde  $\kappa$ .  $\tau_f$  est le temps de relaxation du spectre simulé  $E_s$  vers un spectre modèle  $E_m$ . Afin d'avoir un système stable  $\tau_f$  doit être plus petit que le plus petit des temps caractéristiques de l'écoulement [103]. Le temps caractéristique de Kolmogorov a donc été utilisé grâce à l'expression suivante :

$$\tau_f = C_f \sqrt{\frac{\nu}{\langle \varepsilon \rangle}} \quad , \quad (\text{II.17})$$

où  $C_f$  est un coefficient constant (égal à 1/2 dans nos simulations),  $\nu$  est la viscosité du fluide et  $\langle \varepsilon \rangle$  est la dissipation moyenne à l'instant considéré.

Avec le nouveau terme source (eq. II.16), l'évolution temporelle du spectre simulé  $E_s$  s'écrit :

$$\frac{dE_s}{dt} = C_\kappa + 2 \frac{f_\kappa}{\tau_f} E_s \quad , \quad (\text{II.18})$$

avec  $C_\kappa$  la contribution énergétique classique sans forçage. L'objectif est d'attirer le spectre simulé  $E_s$  vers le spectre modèle  $E_m$ . Cela peut être fait en introduisant un paramètre d'attraction dans l'équation d'évolution de spectre de l'énergie :

$$\frac{dE_s}{dt} = C_\kappa + F_\kappa \frac{\alpha_f(t) E_m(\kappa) - E_s(\kappa, t)}{\tau_f} \quad , \quad (\text{II.19})$$

où  $F_\kappa$  est une fonction filtre qui varie entre 0 et 1 :

$$F_\kappa = \frac{1 - \exp\left(-\frac{(\kappa - \kappa_f)^2}{\Delta\kappa^2}\right)}{1 - \exp\left(-\frac{\kappa_f^2}{\Delta\kappa^2}\right)} H(\kappa_f - \kappa) \quad , \quad (\text{II.20})$$

### II.5.1.2 Evaluation de la méthode

et qui détermine l'amplitude du forçage pour chacun des nombres d'onde. Afin de laisser la zone inertielle évoluer librement, le nombre d'onde de coupure ( $\kappa_f$ ) doit être fixé au début de la zone inertielle. En utilisant les équations II.18 et II.19, la fonction de forçage est définie par :

$$E_s(\kappa, t) f_\kappa = \frac{1}{2} F_\kappa (\alpha_f(t) E_m(\kappa) - E_s(\kappa, t)) \quad . \quad (\text{II.21})$$

Le coefficient  $\alpha_f$  est utilisé afin de contrôler l'évolution de l'énergie moyenne de la turbulence  $\langle k \rangle$  dans le domaine spectral. La relation suivante est alors utilisée :

$$\frac{d\langle k \rangle}{dt} = \frac{k_\infty - \langle k \rangle}{\tau_f} \quad . \quad (\text{II.22})$$

La valeur cible ( $k_\infty$ ) est supposée être celle du spectre modèle :

$$k_\infty = \int_\kappa E_m(\kappa) d\kappa \quad . \quad (\text{II.23})$$

Afin de déterminer  $\alpha_f$ , l'équation II.22 est comparée avec la définition théorique de l'énergie cinétique moyenne qui est obtenue en intégrant l'équation II.18 :

$$\frac{d\langle k \rangle}{dt} = -\langle \varepsilon \rangle + \frac{2}{\tau_f} \int_\kappa f_\kappa E_s(\kappa, t) d\kappa \quad . \quad (\text{II.24})$$

En intégrant en fonction de  $\kappa$  l'équation II.21 et en introduisant les relations II.22 et II.24, une relation pour  $\alpha_f$  émerge :

$$\alpha_f(t) = \frac{k_\infty - \langle k \rangle + \tau_f \langle \varepsilon \rangle + \int_\kappa F_\kappa E_s(\kappa, t) d\kappa}{\int_\kappa F_\kappa E_m(\kappa) d\kappa} \quad . \quad (\text{II.25})$$

Finalement, la fonction de forçage  $f_\kappa$  est obtenue grâce à la relation suivante :

$$f_\kappa = \frac{F_\kappa}{2E_s(\kappa, t)} (\alpha_f(t) E_m(\kappa) - E_s(\kappa, t)) \quad , \quad (\text{II.26})$$

qui nous permet d'attirer le spectre simulé vers le spectre modèle et de contrôler l'énergie cinétique moyenne et l'échelle intégrale.

La procédure qui vient d'être exposée a été testée dans des simulations 3D et 2D. Puisque cette méthode peut être utilisée avec n'importe quel solveur spectral [104], les détails de la méthode numérique utilisée ne sont pas donnés. En résumé, il est possible de dire que les équations de Navier-Stokes pour un fluide incompressible avec une viscosité constante ont été résolues dans le domaine spectral.

Quatre écoulements forcés sont présentés ici. Il s'agit de deux exemples tridimensionnels ( $Re_\lambda = 35$  et  $Re_\lambda = 70$ ) et deux autres bidimensionnels ( $Re_\lambda = 26$  and  $Re_\lambda = 52$ ) d'une turbulence homogène isotrope forcée. Les deux schémas OP-DFS et FC-DFS ont été comparés. L'expression analytique du spectre de Passot-Pouquet a été utilisée comme spectre modèle  $E_m$  (pour les petites longueurs d'onde). Le domaine est cubique (ou carré en 2D) et la taille de son côté  $L$  équivaut à dix échelles intégrales (définies par le spectre).

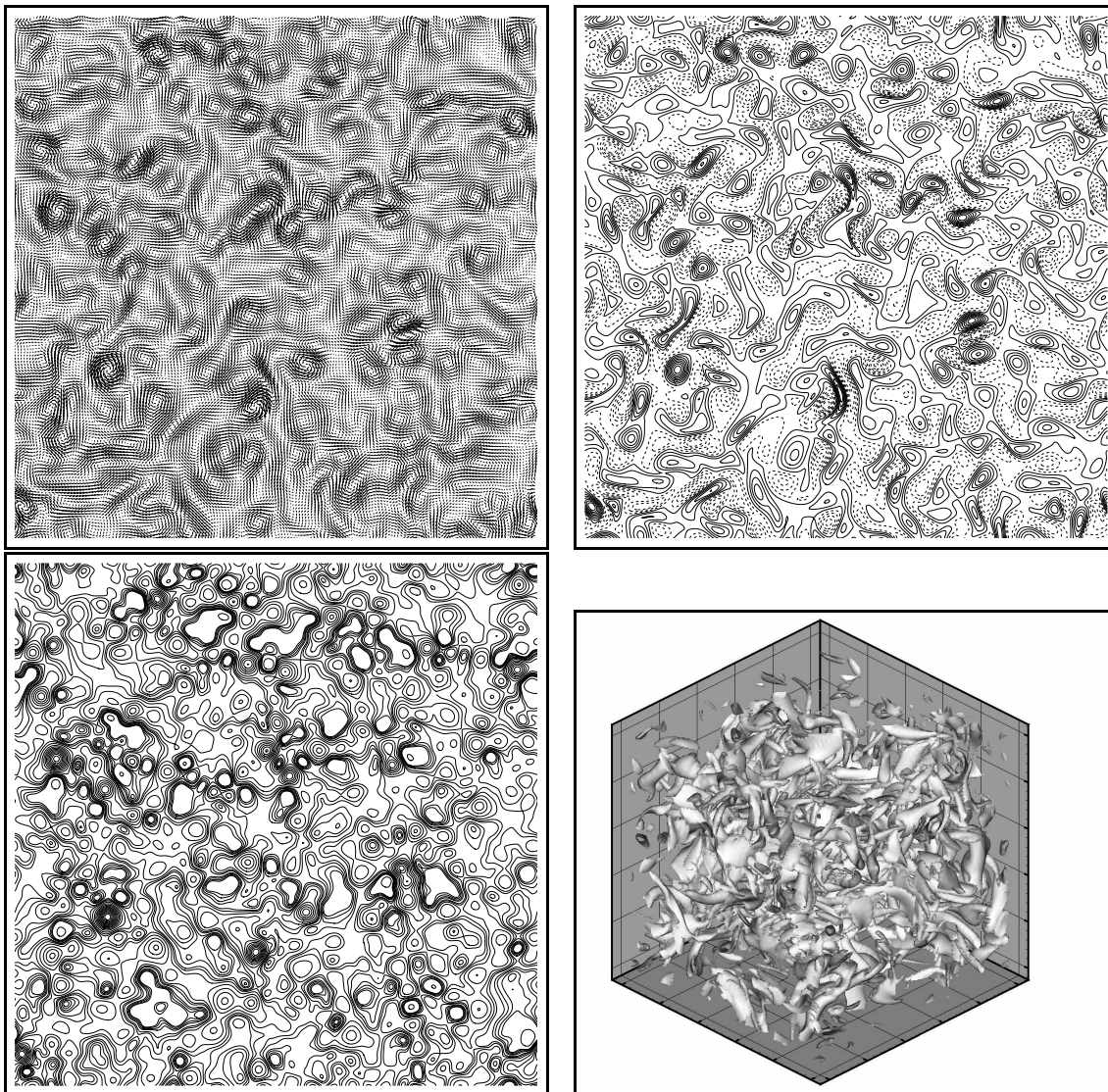
Les paramètres de normalisation sont les suivants: la valeur imposée de la racine carré de la moyenne du carré des fluctuations  $u'_0$ , la valeur initiale de la dissipation moyenne  $\varepsilon_0$ , la taille caractéristique  $l_0 = u'^3_0/\varepsilon_0$  et le temps de retournement des tourbillons  $\tau_0 = k_0/\varepsilon_0$ . Les paramètres précis de la fonction de filtrage peuvent être trouvés dans l'article en annexe de ce document : 'Direct

*numerical simulation of statistically stationary one- and two-phase turbulent combustion: a turbulent injection procedure*'.

Des exemples de champs turbulents forcés sont visibles sur la planche PII.21.. L'énergie cinétique moyenne  $k/k_0$ , la dissipation  $\varepsilon/\varepsilon_0$  et l'échelle intégrale  $L_p/l_0$  sont les paramètres tests issus de ces champs durant les simulations. L'évolution temporelle de ces quantités est tracée planche PII.22. sur de nombreux temps de retournement des tourbillons  $\tau_0$ . Pour les deux simulations tri- et bi- dimensionnelles, le nouveau schéma FC-DFS montre un comportement plus stable que le schéma OP-DFS, la valeur constante de l'énergie cinétique de la turbulence étant une propriété intrinsèque au schéma. En comparaison, le schéma OP-DFS montre des difficultés à rejoindre sa valeur prescrite et à observer un comportement stable. C'est particulièrement le cas dans les calculs bidimensionnels (fig. PII.22.-haut-droit) où l'énergie évolue depuis quatre fois la valeur voulue à deux fois cette valeur. Pour les deux schémas, la dissipation moyenne atteint une valeur constante (planche PII.22.-centre) bien que le schéma FC-DFS soit plus stable. De même, l'échelle intégrale de la turbulence est parfaitement contrôlée par le schéma FC-DFS (planche PII.22.-bas).

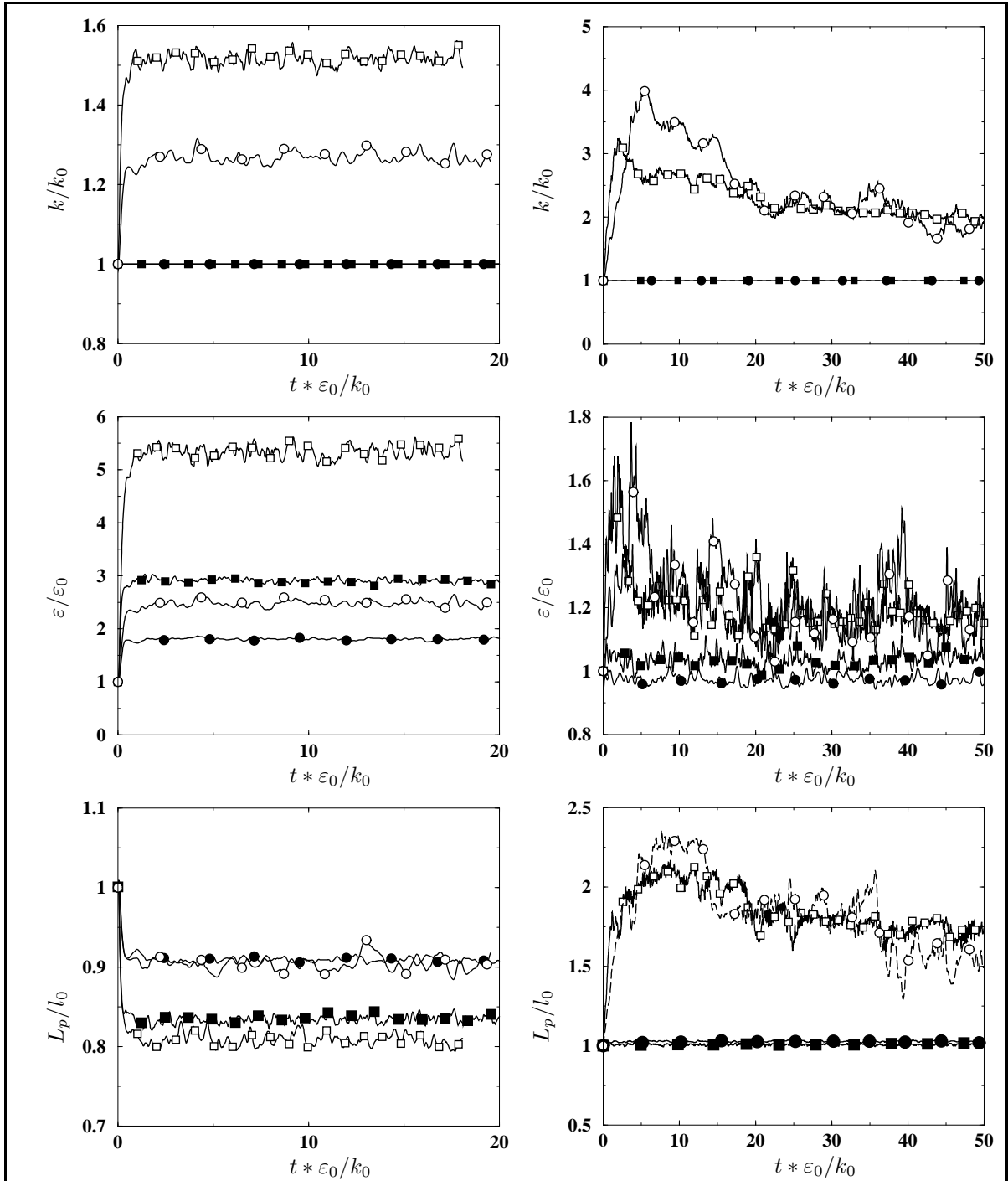
#### Conclusion:

La nécessité de générer des conditions aux limites précises pour l'injection d'une turbulence de grille nous a amené à rechercher un schéma de forçage efficace pour les simulations de DNS spectrales. Cependant, les schémas existants se sont avérés trop instables dans certaines situations. C'est pourquoi, une nouvelle procédure, nommée FC-DFS a été développée. Il apparaît que les caractéristiques moyennes de la turbulence sont très stables. De plus, le temps pour atteindre un écoulement turbulent établi est très court. Cette méthode, bien que développée dans le cadre de l'injection d'une turbulence de grille, peut être utilisée pour les études fondamentales des écoulements turbulents homogènes isotropes.



PII.21. - Résultats des simulations 2D et 3D après 10 temps de retournement. Haut gauche, vecteurs vitesse (2D); haut droit, champ de vorticité (2D); bas gauche, champ de pression (2D); bas droit: champ de vorticité (3D).





P11.22. - Evolution temporelle de l'énergie cinétique turbulente moyenne (haut), de la dissipation (centre) et de l'échelle intégrale (bas) dans des simulations spectrales 3D (gauche) et 2D (droit). Symboles pleins : FC-DFS, symboles vides : OPDFS, carrés :  $Re_\lambda = 70$  (3D-gauche) et  $Re_\lambda = 35$  (2D-droite), cercles :  $Re_\lambda = 52$  (3D-gauche) et  $Re_\lambda = 26$  (2D-droite).

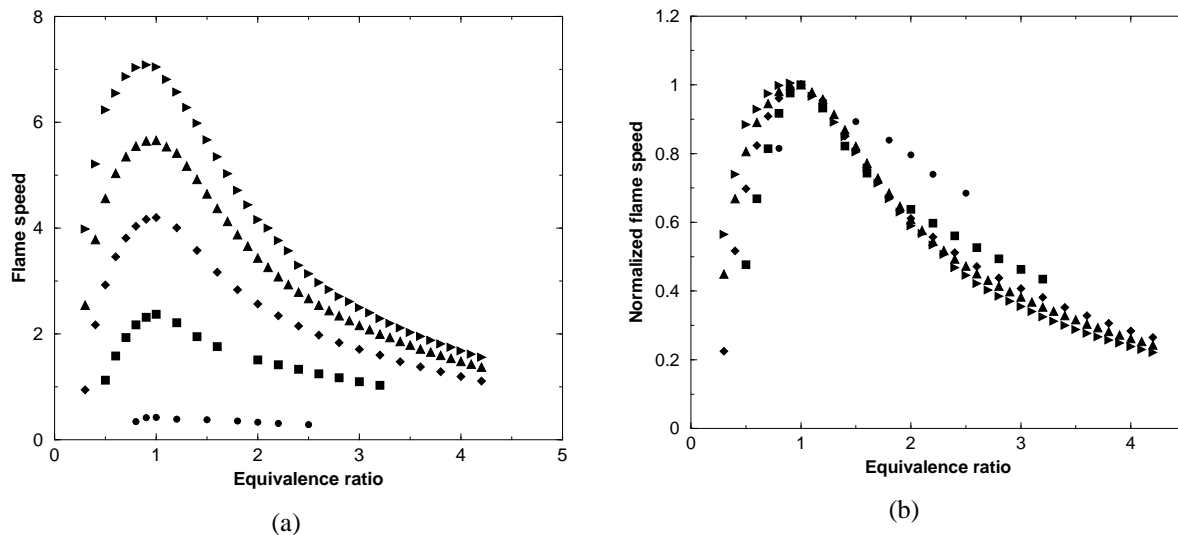


FIG. II.14 – (a):  $S_L^o(\phi)$ , Vitesse de flamme (m/s) en fonction du rapport d'équivalence  $\phi$ . (b):  $S_L^o(\phi)/S_L^o(1)$  Vitesse de flamme normalisée. Fraction de volume d'oxygène dans l'oxydant : Cercle:  $X_{O_2,o} = 0.21$ , Carré:  $X_{O_2,o} = 0.40$ , Losange:  $X_{O_2,o} = 0.60$ , Triangle sup.:  $X_{O_2,o} = 0.80$ , Triangle droit:  $X_{O_2,o} = 1.00$

## II.5.2 Tabulation de la chimie, application à une oxy-flamme hydrogène-soufre

Les résultats présentés dans cette partie ont été obtenus dans le cadre d'un financement par Air-Liquide. La méthode de tabulation de la chimie décrite ici nous a permis, outre l'étude des oxy-flammes de travailler sur la combustion de sprays.

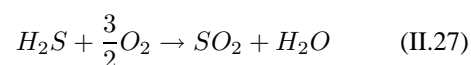
- VERVISCH, L., LABEGORRE, B., REVEILLON, J., 2004, *Hydrogen-sulphur oxy-flame analysis and single-step flame tabulated chemistry*, *Fuel*, 83, pp 605-614

De plus en plus, des systèmes chimiques complexes sont employés dans le calcul de la combustion d'hydrocarbures ou de gaz industriels. Cependant, du fait des contraintes de temps, l'utilisation de systèmes chimiques très simplifiés à une étape est toujours effective. Même si une description fine des réactions ne peut être attendue de ces systèmes à une étape, il est néanmoins possible de les optimiser pour capturer certaines des propriétés fondamentales des flammes issues du combustible qui nous intéresse tels que le dégagement de chaleur et le taux de réaction en fonc-

tion de la richesse locale de combustible ou encore les caractéristiques d'extinction de la flamme en fonction des taux d'étirement.

Pour capturer ces propriétés quelles que soient les conditions de mélange, une méthode de tabulation est utilisée : SFTC pour Single-step Flame Tabulated Chemistry. Cette SFTC est construite à partir de la distribution de vitesse de flamme en fonction du rapport d'équivalence et, éventuellement pour différents niveaux de dilution par l'oxygène.

Nous allons prendre, comme exemple d'application, la combustion du di-hydrogène de soufre qui intéresse particulièrement les industriels tels Air-Liquide qui tentent de réduire les émissions polluantes dans l'atmosphère. En additionnant toutes les réactions élémentaires de la cinétique détaillée, il est possible d'obtenir la réaction globale à une étape :



Le rapport d'équivalence de la réaction est défini par  $\phi = s(Y_{H_2S}/Y_{O_2})$ , avec  $s = 1.4117$  le coefficient stœchiométrique et  $Y_i$  la fraction massique de l'espèce  $i$ .

La loi d'Arrhenius à une étape s'écrit sous la forme :

$$\dot{\omega} = K \left( \frac{\rho Y_F}{W_F} \right)^{n_F} \left( \frac{\rho Y_O}{W_O} \right)^{n_O} \exp \left( -\frac{T_{Ac}}{T} \right) \quad (\text{II.28})$$

où  $n_F$  et  $n_O$  sont les ordres de de la réaction (non-nécessairement égaux à  $\nu_F$  et  $\nu_O$ ).  $K$  est la constante préexponentielle et  $T_{Ac}$  la température d'activation de la flamme.

Un schéma aussi simplifié demeure limité dans son champ d'action. Par exemple, il n'y a aucun moyen dans l'équation II.28 permettant de capturer la réponse correcte du taux de réaction à une modification du rapport d'équivalence qui est contrôlé par de nombreuses interactions entre les espèces impliquées dans de nombreuses réactions secondaires. Les constantes apparaissant dans l'équation II.28 peuvent être fixées pour toutes les valeurs possibles du rapport d'équivalence  $\phi$ . Cependant il sera alors très difficile de reproduire une réponse de flamme correcte lorsque à la fois  $\phi$  et  $X_{O_2,o}$  varient. Pour un simple hydrocarbure tel que le méthane, les estimations asymptotiques et numériques de la vitesse de flamme en fonction du rapport d'équivalence construit à partir de la relation II.28 sont connues pour fournir une bonne estimation du coté pauvre ( $\phi < 1$ ) et une mauvaise du coté riche ( $\phi > 1$ ).

En fait, une augmentation continue de la vitesses peut être observée même pour des rapport d'équivalence supérieurs à 1 [105] alors qu'un maximum devrait être observé autour de  $\phi = 1$  avant une diminution tel que cela peut être observé figure II.14. Afin de pallier à ce problème, un terme pré-exponentiel variable  $K(\phi)$ ,

qui dépend du rapport d'équivalence local, est introduit. Les modifications de la réponse de la flamme quand le mélange est riche ou pauvre en combustible peuvent alors être capturées.

Grâce au calcul de flammes prémélangées laminares,  $S_L^o(\phi)$ , la distribution de la vitesse de flamme en fonction du rapport d'équivalence (fig. II.14) est connue. Cette distribution de vitesse va nous permettre de construire une expression appropriée pour le taux de réaction. Nous nous proposons d'écrire l'expression SFTC pour la réaction hydrogène-soufre sous la forme :

$$\dot{\omega}_{H_2S} = -\rho K_o \mathcal{K}(\phi) (S_L^{o*}(\phi))^2 Y_{H_2S} Y_{O_2}^{3/2} \exp(-T_{Ac}/T) \quad (\text{II.29})$$

où  $T_{Ac}$  est la température d'activation et  $\mathcal{K}(\phi)$  est une fonction qui doit encore être déterminée. Pour cette cinétique, la température d'activation est telle que  $T_{Ac} \approx 11000$  K.

Dans la forme générique proposée pour le taux de réaction dans l'équation II.29, la distribution de vitesse  $S_L^{o*}(\phi)$  est utilisée afin de calibrer  $\dot{\omega}_{H_2S}$  grâce à une loi au carré qui dérive de résultats asymptotiques.  $S_L^{o*}(\phi)$  représente la vitesse de flamme en fonction du rapport d'équivalence et normalisée par la vitesse de flamme stœchiométrique,  $S_L^{o*}(\phi) = (S_L^o(\phi)/S_L^o(1))$ . Dans l'équation II.29, le coefficient  $K_o$  est calibré afin de reproduire la valeur exacte des vitesses de flamme alors que  $\mathcal{K}(\phi)$  doit être déterminée tel que les vitesses de flamme soient égales à  $S_L^{o*}(\phi)$  pour toute valeur de  $\phi$ . Nous allons à présent aborder la détermination de  $\mathcal{K}(\phi)$ .

### II.5.2.1 Fonction pre-exponentielle $\mathcal{K}(\phi)$

La détermination du coefficient pre-exponentiel  $\mathcal{K}(\phi)$  est déterminé à partir d'un processus itératif qui implique le calcul de flammes prémélangées planes de

référence. L'équation d'évolution de la distribution de température au sein d'une flamme prémélangée plane s'écrit :

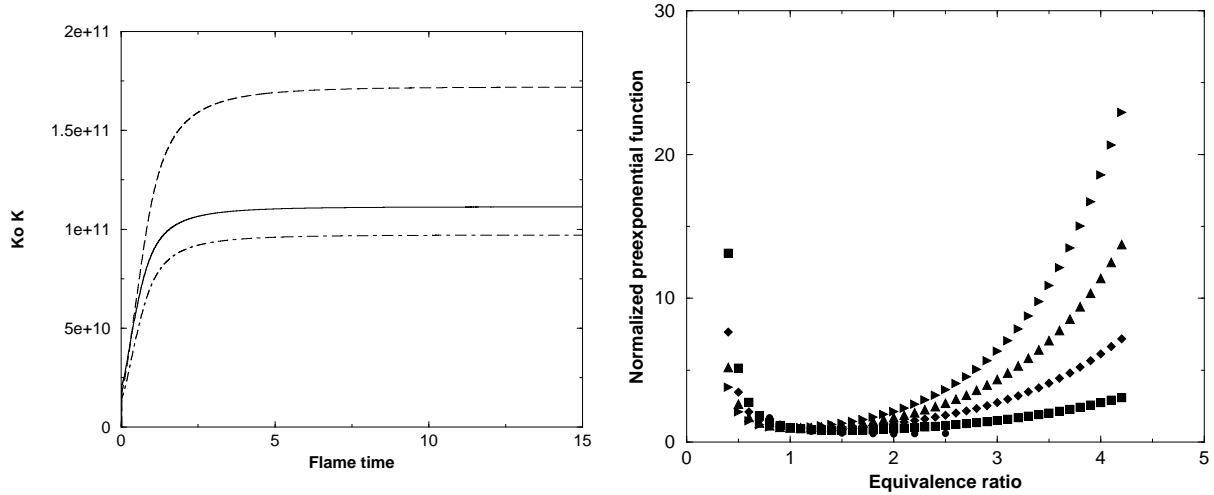
$$\rho_o S_L^o(\phi) \frac{dT}{dx} = \frac{d}{dx} \left( \rho a_T \frac{dT}{dx} \right) + \left( \frac{Q}{C_p} \right) \rho K_o \mathcal{K}(\phi) (S_L^{o*}(\phi))^2 Y_{H_2S} Y_{O_2}^{3/2} \exp(-T_{Ac}/T) \quad (\text{II.30})$$

$Q$  est le taux de réaction par unité de masse de combustible consommée. Il dépend de  $T_s$  la température adiabatique de flamme stœchiométrique (ou température d'équilibre à  $\phi = 1$ ) pour un nombre

de Lewis égal à 1 :

$$\left( \frac{Q}{C_p} \right) = \left( \frac{1 + \Phi_s}{Y_{H_2S,o}} \right) (T_s - T_o) \quad (\text{II.31})$$

$Y_{i,o}$  est la fraction massique de référence de l'élément  $i$ . ( $Y_{H_2S,o} = 1$  alors que  $Y_{O_2,o}$  dépend de l'ajout ou non



(a)- Evolution temporelle de la constante pre-exponentielle  $K_o \mathcal{K}(\phi)$ . Combustion dans de l'oxygène pur  $X_{O_2,o} = 1$ , le temps est normalisé par le temps de flamme  $t_{fl}$ . Ligne:  $\phi = 1.0$ . tirets:  $\phi = 0.5$ . points-tirets:  $\phi = 1.5$

(b)-  $\mathcal{K}(\phi)$ , Correction pre-exponentielle normalisée en fonction du rapport d'équivalence pour différentes valeur du taux d'oxygène dans l'oxydant. Triangle droit:  $X_{O_2,o} = 1.00$ , Triangle haut:  $X_{O_2,o} = 0.80$ , Diamant:  $X_{O_2,o} = 0.60$ , Carré:  $X_{O_2,o} = 0.40$ , Cercle:  $X_{O_2,o} = 0.21$ .

FIG. II.15 – Convergence des paramètres chimiques.

d'oxygène dans le système).  $\Phi_s = s(Y_{H_2S,o}/Y_{O_2,o})$  est le rapport d'équivalence de référence du problème.

Le combustible et l'oxydant peuvent s'écrire sous la forme de deux fonctions qui dépendent du rapport d'équivalence et de la température:

$$Y_{O_2}(\phi, T) = Y_{O_2,o} \left( \frac{\Phi_s}{\Phi_s + \phi} \right) + \frac{(3/2)W_{O_2}}{W_{H_2S}} \left( \frac{C_p}{Q} \right) (T_o - T) \quad (\text{II.32})$$

$$Y_{H_2S}(\phi, T) = Y_{H_2S,o} \left( \frac{\phi}{\Phi_s + \phi} \right) + \left( \frac{C_p}{Q} \right) (T_o - T) \quad (\text{II.33})$$

$W_i$  est la masse molaire des espèces. Même si la diffusion différentielle peut avoir un impact non-négligeable dans certains systèmes réactifs, les nombres de Lewis et de Schmidt sont supposés unitaires dans de nombreux modèles de combustion. Cette hypothèse a été adoptée avec la diffusivité moyenne suivante:  $a_T = 1.7894 \cdot 10^5 \text{ m}^2/\text{s}$ . Puisque la flamme dépend de la diffusivité moyenne, modifier  $a_T$  affecterait la valeur de  $K_o$ . Cependant, la forme de la fonction pre-exponentielle

corrective  $\mathcal{K}(\phi)$  n'est pas affecté directement par la valeur retenue pour  $a_T$ . La masse volumique est reliée à la température en supposant une combustion à pression constante  $(\rho/\rho_o) = (T_o/T)$ , avec  $\rho_o$  et  $T_o$  les valeurs de la condition de référence.

En associant l'ensemble de ces relations, l'équation d'évolution pour la température (eq. II.30) peut être résolue grâce à un processus itératif. A chaque itération,  $K_o \mathcal{K}(\phi)$  est déterminé à partir de l'eq. II.30 :

$$K_o \mathcal{K}(\phi) = \left( \frac{\rho \frac{\partial T}{\partial t} + \rho_o S_L^o(\phi) \frac{\partial T}{\partial x} - \frac{\partial}{\partial x} (\rho a_T \frac{\partial T}{\partial x})}{(Q/C_p) \rho (S_L^{o*}(\phi))^2 Y_{H_2S} Y_{O_2}^{3/2} \exp(-T_{Ac}/T)} \right)_{x_{fl}} \quad (\text{II.34})$$

Oxygen $X_{O_2,o}$	$S_L^o(\phi = 1)$ (m/s)	$T_s$ (Kelvin)	$K_o$ s <sup>-1</sup>
0.21	0.421	2034	2.17317130 10 <sup>10</sup>
0.40	2.372	2703	5.78543862 10 <sup>10</sup>
0.60	4.199	2917	8.41197240 10 <sup>10</sup>
0.80	5.657	3024	9.74884291 10 <sup>10</sup>
1.00	7.040	3090	1.11300755 10 <sup>11</sup>

TAB. II.1 – Flame speed under stoichiometric conditions, equilibrium stoichiometric temperature and SFTC pre-exponential constant  $K_o$  (Eq. II.29) for various oxygen volume fractions in oxidizer.

où  $x_{fl}$  est la position de maximum du taux de réaction.

La vitesse de flamme est une valeur propre du problème défini par l'équation II.30. Donc la solution de l'équation II.30 couplée avec la relation II.34 converge rapidement vers une solution de flamme stationnaire. La valeur du coefficient pre-exponentiel est alors déterminée. Pour un cas avec l'oxydant composé d'oxygène pur, la figure II.15-(a) montre l'évolution du facteur  $K_o \mathcal{K}(\phi)$ , pour trois valeurs différentes du rapport d'équivalence ( $\phi = 0.5$ ,  $\phi = 1$  and  $\phi = 1.5$ ). Le temps est normalisé par le temps caractéristique de flamme  $t_{fl}(\phi) = (\delta_{fl}(\phi)/S_L^o(\phi))$ . Cinq temps de flammes sont suffisant pour faire converger le facteur pre-exponentiel vers une valeur stationnaire. Cette

méthodologie est systématiquement appliquée pour toutes les vitesses de flammes montrées figure II.14.

Les valeurs obtenues pour  $K_o$  sont données dans le tableau II.1 alors que les coefficients pre-exponentiels  $\mathcal{K}(\phi)$  sont tracés figure II.15-(b). Le paramètre  $K_o$  varie avec le taux d'oxygène dans le mélange alors que les coefficients pre-exponentiels  $\mathcal{K}(\phi)$  évoluent en fonction du rapport d'équivalence. La forme de  $\mathcal{K}(\phi)$  est sensible aussi à la valeur de  $X_{O_2,o}$ . La détermination de ces quantités permet de reproduire, pour n'importe quelle rapport d'équivalence ou n'importe quel taux d'oxygène, les propriétés de bases correctes des flammes correspondantes tout en conservant une cinétique simple et rapide.

**Conclusion:**

Une nouvelle procédure numérique permettant de contrôler le taux de réaction global d'une flamme pour tout rapport d'équivalence a été développée dans le cadre d'une cinétique à une étape. Cette méthode qui a été présentée dans cette section avec une application à la combustion de di-hydrogène de soufre a aussi été employée dans les autres calculs présentés dans ce manuscrit pour la combustion du n-heptane.

## II.5.3 Cas particulier: Evaluation d'algorithmes de PIV grâce à la DNS de sprays turbulents

### II.5.3.1 Introduction

*Les résultats présentés dans cette partie ont été obtenus dans le cadre du stage de D.E.A. de David Demare, Université de ROUEN. Le principal encadrant de ce travail était B. Lecordier, CNRS-CORIA. J'ai encadré la partie concernant l'utilisation de la simulation numérique directe pour en extraire des champs de référence pour la P.I.V.*

LECORDIER, B., DEMARE D., VERVISCH L.M.J., REVEILLON, J., TRINITÉ, M., 2001, *Estimation of the accuracy of PIV treatments for turbulent flow studies by direct numerical simulation of multiphase flow, Meas. Sci. Technol.*, 12:1382–1391

Depuis ces quinze dernières années, des techniques de vélocimétrie par imagerie de particules (PIV) de plus en plus précises ont permis l'étude expérimentale de la turbulence. Le principe consiste àensemencer le fluide étudié avec des petites particules supposées parfaitement suivre l'écoulement. Une tranche du fluide est éclairée par une nappe laser. La lumière diffusée par les particules est recueillie à deux instants  $t$  et  $t+\Delta t$  à l'aide d'un détecteur 2D. Grâce à un traitement d'images approprié, il est possible de calculer le déplacement local des particules et de remonter ainsi au champ de vitesses. La précision de ces méthodes étant délicate à évaluer par un dispositif expérimental de référence, c'est une évaluation par méthodes numériques qui a été envisagée.

Le but de cette étude est donc de simuler numériquement une expérience de PIV sur un écoulement diphasique parfaitement connu créé grâce à une DNS. Pour différents paramètres et algorithmes de traitement, nous pouvons ensuite évaluer la reconstruction du champ de vitesses, effectuée sur la simulation, avec les vitesses réelles de l'écoulement. La

méthode la plus précise et la plus utilisée aujourd'hui (dans près de 2/3 des cas) est la vélocimétrie par intercorrélation d'images de particules [106, 107, 108]. Son principe (fig. II.16-a), consiste à prendre deux images de champs de particules, l'une à l'instant  $t$ , l'autre à l'instant  $t+\Delta t$ . Ceci n'est possible que depuis que les caméras CCD permettent de saisir ces deux images dans un temps très court. On prélève une zone échantillon appelée généralement "fenêtre d'interrogation" dans chaque image. Les intensités en niveaux de gris  $I_1$  et  $I_2$  des deux fenêtres sont ensuite corrélées numériquement entre-elles. Le calcul du produit classique de corrélation :

$$R_{I_1 I_2}(x, y) = \sum_{i=-K}^K \sum_{j=-L}^L I_1(i, j) I_2(i+x, j+y) \quad (\text{II.35})$$

est du point de vue numérique assez long. On utilise donc le plus souvent, un algorithme de Transformée de Fourier Rapide permettant de raccourcir la durée des calculs. Le résultat obtenu est un diagramme d'intercorrélation, avec un pic principal et un ensemble de pics secondaires ou pics de bruit. (fig. II.16-b). Pour connaître le déplacement des particules dans la maille d'analyse, il reste à mesurer l'écart entre le maximum du pic principal et le centre de la fenêtre. On trouve ainsi la vitesse moyenne des particules à l'intérieur de la maille.

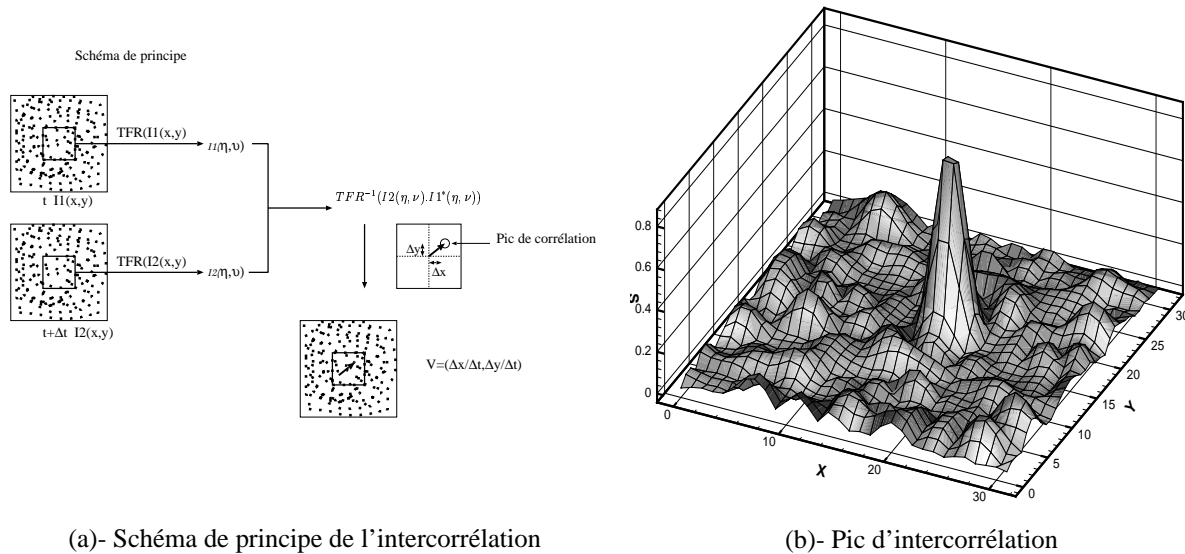
Malgré son efficacité, la méthode de PIV par intercorrélation possède un certain nombre de points faibles qui posent problèmes pour les mesures dans les écoulements turbulents. C'est pourquoi, il existe de nombreux algorithmes différents pour résoudre ces difficultés. Afin de les évaluer, le moyen le plus fiable est de les tester sur des images synthétiques construites à partir de champs de simulation numérique directe.

### II.5.3.2 Analyse des résultats

A partir d'un champ de DNS, correspondant à deux pas de temps rapprochés, nous avons prélevé une tranche représentant la nappe laser à l'intérieur du do-

maine de calcul. Nous pouvons ainsi créer :

- Deux images synthétiques de particules sur lesquelles nous appliquons les méthodes de traite-



(a)- Schéma de principe de l'intercorrélation

(b)- Pic d'intercorrélation

FIG. II.16 – Principe de base de la PIV par intercorrélation.

ment d'images.

- Un champ de vitesse obtenu par le calcul de la phase porteuse (le gaz).
- Un champ de vitesse des particules interpolé sur un maillage identique à celui de la PIV.

Nous pouvons grâce à ces champs, calculer les caractéristiques de la turbulence et les caractéristiques aérodynamiques des particules. Nous pourrions ensuite comparer les champs et leurs différentes caractéristiques.

Une turbulence homogène isotrope tri-dimensionnelle est simulée dans un domaine avec des parois périodiques. Un modèle Lagrangien permet de connaître la position et la vitesse des particules en tout point du domaine de calcul. Cependant, afin d'être en mesure d'appliquer les algorithmes de PIV, il est nécessaire d'interpoler le champ de vitesse sur un maillage régulier. Une méthode au troisième ordre a été utilisée pour cela.

### Champ PIV

Nous avons fait les calculs de PIV sur deux images construites à partir des champs DNS créés à deux instants séparés  $\Delta t$  (cet intervalle de temps correspond à un déplacement maximum de  $\pm 0.5$  pixel). Ces images

ont environ une taille de 800 par 800 pixels.

L'intercorrélation a été effectuée sur des fenêtres d'interrogation de 64x64 pixels avec deux algorithmes différents, un algorithme classique et un algorithme de PIV itérative 4096 vecteurs (64x64) sont représentés sur un maillage identique à celui du champ DNS gazeux pour pouvoir les comparer.

Sur les diagrammes de PIV, nous avons de plus fait figurer en niveau de gris les valeurs du rapport signal/bruit (RSB). Les taches sombres représentent les endroits les plus bruités (RSB faible), nous apercevons immédiatement que les diagrammes de PIV itératives sont moins bruités que ceux de PIV classique (la moyenne est de 1,45 pour la méthode classique et de 1,52 pour la méthode itérative). Ceci confirme qu'une grande partie du bruit sur les diagrammes d'intercorrélation est due au phénomène des particules non appariées. En effet la PIV itérative limite les problèmes liés aux particules entrant et sortant de la maille, d'une part par déplacements de mailles pour les mouvements dans le plan, d'autre part parce qu'elle permet des déplacements plus faibles réduisant ainsi les mouvements sur la troisième composante.

### Comparaison DNS-PIV

Sur la planche PII.23. (page 80), nous pouvons

comparer qualitativement les champs de DNS et les champs de PIV. Cette comparaison ne nous permet pas de déceler une réelle différence entre ces deux champs. Nous avons donc déterminé le pourcentage d'erreur introduit par la PIV sur chaque composante de vitesse en comparant les champs de PIV classique et itérative avec les champs du gaz et des particules (fig. PII.24.a).

Il apparaît que les erreurs sur une composante sont les plus importantes (taches sombres) et ont la même position quelle que soit la méthode d'analyse. Seule l'amplitude de l'erreur change. Le pourcentage d'erreur est toujours plus élevé pour la PIV classique que pour la PIV itérative, ce qui confirme la plus grande précision de cette dernière.

L'erreur de la comparaison DNSgaz-PIV est logiquement plus importante que celle de la comparaison DNSparticules-PIV, le mouvement des particules étant modélisé grâce aux forces du fluide agissant sur elles. Les images sont construites grâce à ces particules le champ de référence est donc logiquement le champ DNSparticules. Toutefois la différence n'est pas importante qualitativement car les particules sont suffisamment petites pour suivre parfaitement l'écoulement, le champ gazeux sera donc souvent préféré par la suite, les zones d'erreurs y sont plus prononcées.

Enfin, la dernière remarque générale sur ces résultats concerne la forme des zones d'erreurs sur la PIV classique. Ces zones sont plutôt allongées suivant l'axe des y pour les erreurs sur la composante  $U$  (fig. PII.24.a) et suivant l'axe des x pour les erreurs sur  $V$ . Cela signifie

que si la valeur d'une composante de vitesse ne varie pas lorsque l'on se déplace perpendiculairement à sa direction, son erreur ne varie pas non plus. L'erreur dépend donc fortement du calcul du déplacement.

### Analyse spectrale

Pour savoir avec quelle précision un algorithme de PIV résout la turbulence, le meilleur moyen est de tracer les spectres de l'écoulement calculés à partir des différents champs de particules et de les comparer avec le spectre exact issu de la DNS (fig. PII.24.b)

Ces spectres se caractérisent sur une échelle logarithmique par une zone de "décrochage" au-delà de laquelle il n'est plus possible d'avoir des renseignements sur la turbulence. Cette coupure intervient plus ou moins loin dans les fréquences selon que le champ de vitesse résout ou non la dissipation d'énergie dans les petites structures. La fréquence de coupure est  $k \simeq 10$ , si nous repassons dans l'espace réel, cela correspond à une longueur de  $\frac{2\pi}{k} \simeq 0.6$ . Cette valeur correspond quasiment à la valeur de l'échelle intégrale qui est environ de 0.5.

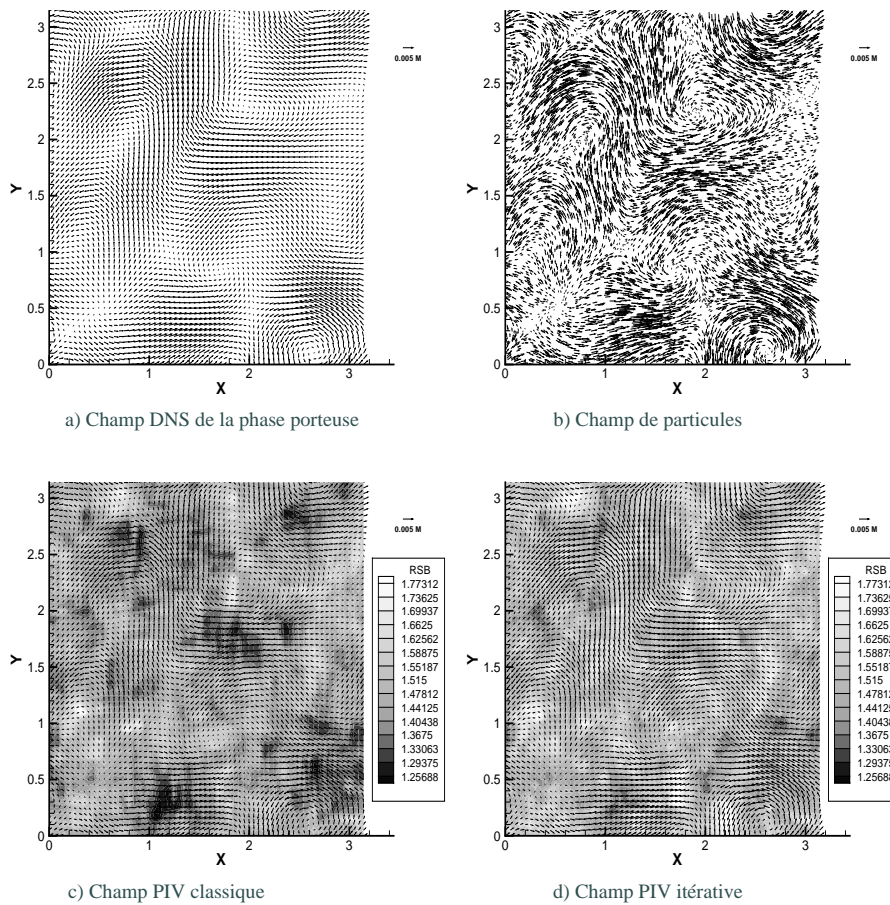
En comparant les spectres des champs DNS gazeux avec le champ de particules interpolé, nous pouvons remarquer que ce dernier ne peut pas restituer l'énergie des petites échelles [109]. Le bruit sur les spectres de PIV classique et de PIV itérative intervient quasiment à la même fréquence. Par contre la PIV itérative suit plus correctement les spectres DNS aux grandes échelles (pas de sous estimation de l'énergie).

#### Conclusion:

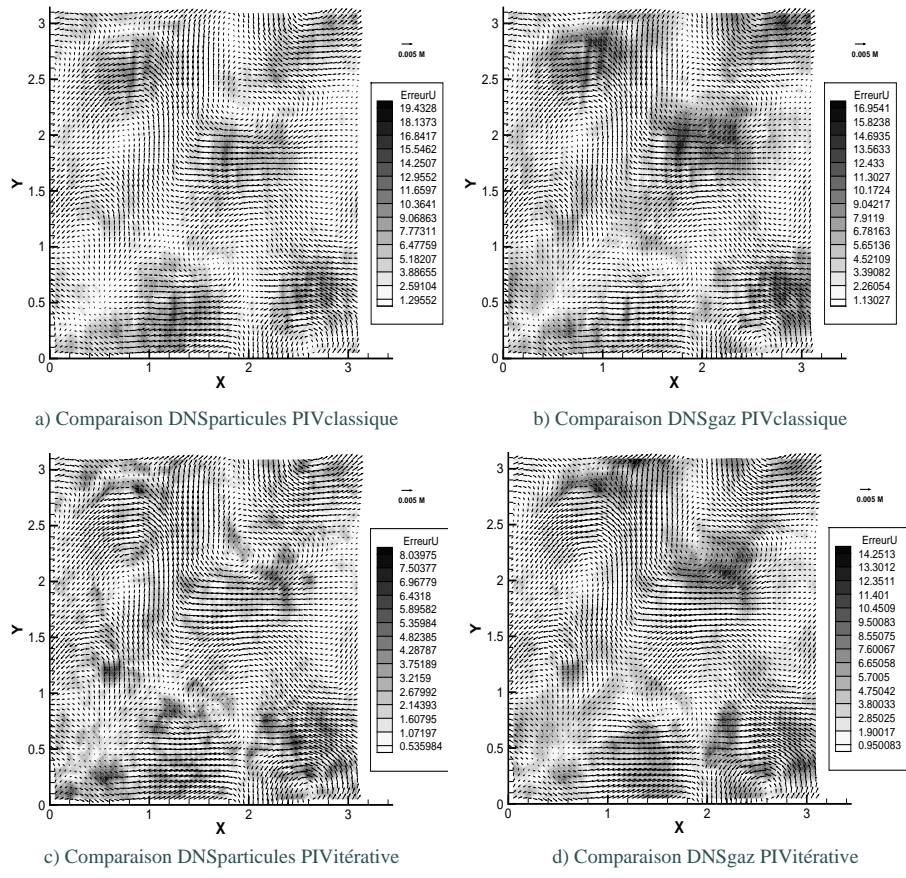
De nombreuses autres analyses permettant l'évaluation des algorithmes de PIV ont pu être effectuées par mes collègues B. Lecordier et D. Demare. Avec, entre autres, la détermination précise de l'ordre de grandeur et de la localisation des erreurs des algorithmes pour différentes intensités de la turbulence, de l'influence des dimensions des fenêtres d'analyse et du domaine de calcul. L'ensemble de ces analyses étant effectué tant dans l'espace physique que dans l'espace spectral.

Ce travail montre à nouveau les capacités de la DNS, couplée à un solveur Lagrangien de particules, à effectuer un travail amont à la démarche de développement expérimental ou industriel. Généralement ce travail amont se situe au niveau du développement de modèles pour des solveurs numériques dédiés aux configurations de calcul complexes, mais dans le cadre des résultats qui viennent d'être évoqués, il s'agit d'un travail préliminaire à des mesures expérimentales.

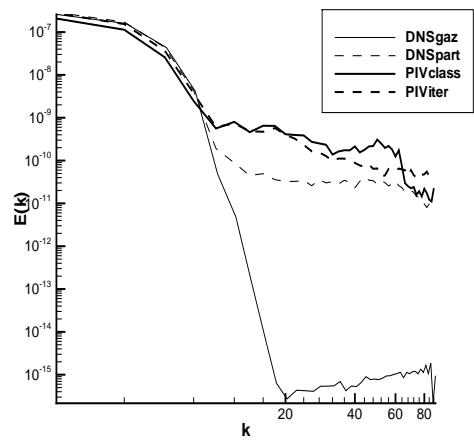




PII.23. - Champs DNS (a,b) et champs PIV (c,d) avec rapport signal/bruit



PII.24.a - Comparaison DNS PIV pour la composante U



PII.24.b - Spectres de la turbulence

## II.6 Conclusions et perspectives

### II.6.1 Préambule: rappel des travaux de thèse et de post-doctorat

Le sujet de ma thèse portait sur la simulation aux grandes échelles (LES) de la combustion turbulente dans les milieux purement gazeux. Au cours des trois années de ce travail, j'ai été amené à développer des outils numériques de simulation numérique directe et de simulation numérique des grandes structures. Ce travail m'a permis d'effectuer une analyse fine de l'impact du dégagement de chaleur dû à la présence d'une flamme sur les coefficients dynamiques des modèles LES les plus récents. Il a fallu étendre et mettre en œuvre des formulations classiquement utilisées pour les

modélisations basées sur les moyennes de Reynolds aux modélisations de sous-maille instationnaires: modèles de mélange, formulation de fonction de densité de probabilité de sous-maille, taux de réaction de sous-maille.

Après ma soutenance de thèse, je me suis rendu à l'Université de Cambridge (Royaume-Uni) afin de pouvoir développer une nouvelle activité liée aux écoulements diphasiques. Au cours des mois passés en Angleterre, j'ai pu développer un code de simulation numérique directe associé à un solveur Lagrangien pour décrire une phase liquide dispersée.

### II.6.2 Conclusion

Les résultats présentés dans ce manuscrit s'inscrivent dans la continuité du travail de post-doctorat et sont principalement dédiés à la simulation numérique directe des écoulements diphasiques. L'intérêt de la DNS pour la compréhension des phénomènes physiques ainsi que le développement et le test préliminaire de modèle ne s'est pas démenti au cours des dernières années. L'ensemble des travaux qui sont présentés dans ce manuscrit ont été financés soit directement par des industriels (SNECMA, CEA, EDF) soit par des projets nationaux (COS) ou Européen (BRITE, MUSCLES) auxquels participent des industriels.

Bien que n'ayant pas détaillé cet aspect du travail dans ce manuscrit, nous avons développé au cours de ces dernières années un outil unique d'étude et d'analyse des écoulements diphasiques turbulents. Cet outil nous a permis d'analyser avec précision les phénomènes de dispersion et d'évaporation de gouttelettes de combustible au sein d'une turbulence de grille. A la fois les aspects Eulérien et Lagrangien ont pu être abordés afin, dans un premier temps, d'isoler les paramètres fondamentaux de la dispersion et ensuite de valider les capacités des modèles de type multi-fluide à capturer ces mêmes propriétés fondamentales.

La modélisation précise des sprays en cours d'évaporation est absolument nécessaire afin d'obtenir ensuite une topologie correcte du champ de fraction de mélange qui sera à la base de tous les modèles de combustion que l'on souhaitera implémenter ultérieurement. Il s'agit là de la seconde partie de notre travail qui portait sur les écoulements inertes et le mélange va-

leur/oxydant. Des anciennes formulations ainsi que des nouveaux modèles de mélange de sous-maille ont été testés afin d'analyser leurs capacités à capturer les fluctuations locales de fraction de mélange alors que les gouttes sont toujours en cours d'évaporation. Une procédure identique a été utilisée pour les autres termes fondamentaux tels que la dissipation de sous-maille ou la production liée aux termes sources de masse. Il s'avère que l'introduction d'une nouvelle variable appelée "facteur de mélange" donne les meilleurs résultats quelles que soient les caractéristiques de dispersion et d'évaporation des gouttelettes.

Logiquement, nous avons aussi travaillé sur les phénomènes de combustion au sein des sprays. Beaucoup d'aspects sont encore méconnus du fait de la grande difficulté à faire des mesures au sein de milieu réactifs diphasiques. De même les calculs numériques, si ils sont assez courants, négligent de nombreux phénomènes dont il s'agit d'estimer l'ampleur. Cependant la DNS, même si est couplée à un modèle pour le suivi de l'évolution de la phase liquide, reste l'outil d'analyse le plus précis à ce jour. Nous avons pu commencer à mettre en œuvre un certain nombre de configurations clefs (prémélangée avec la flamme en V, non-prémélangée avec la flamme jet), qui se retrouvent très fréquemment sous une forme ou sous un autre dans les expériences académiques ou industrielles. A partir des bases de données qui ont été développées, nous avons pu déterminer les paramètres cruciaux qui pouvaient modifier fortement les régimes et le rendement de combustion. Au travers de la création d'un diagramme de com-

bustion, les différentes structures de flamme, que l'on peut rencontrer dans la combustion diphasique, ont été cataloguées. Ces mêmes bases de données sont actuellement utilisées pour la validation de modèles de combustion partiellement prémélangée. De même, ces bases de données vont permettre une analyse amont assez précise des différentes contributions des termes que l'on peut rencontrer dans les équations bilan de la variable de progrès ou de la densité de surface de flamme comme nous l'avons déjà fait pour les équations la fraction de mélange et de ses fluctuations.

Parallèlement à l'ensemble de ce travail, des études

périphériques à cet axe principal de recherche ont été effectuées afin de développer un certain nombre d'outils (injection d'une turbulence de grille, chimie à une étape respectant les propriétés de taux de réaction de la flamme pour tout rapport d'équivalence) et de connaissances (accrochage des flammes jets) qui nous étaient nécessaires. Ces études ont aussi pu se faire à l'occasion de certaines opportunités nous permettant de croiser nos connaissances avec des collègues (évaluation d'algorithmes de P.I.V., étude des transferts de chaleur entre un écoulement diphasique et une paroi).

### II.6.3 Perspectives

Les perspectives et suites possibles à donner à ce travail restent très conséquentes. Le développement des modèles de dispersion, d'évaporation et de combustion pour les sprays est encore très embryonnaire tant du point de vue de la prise en compte de la physique que du coût calcul. Cependant, les analyses DNS ne peuvent tout résoudre et il s'agit à présent de mettre en œuvre les acquis que nous a apportés ce travail dans des configurations complexes de type expérimental ou industrielle. Donc une grande partie du travail qui va suivre sera consacré à des modélisations de sous-maille de la combustion turbulente diphasique. Une première étude laminaire portant sur l'instabilité des flammes diphasiques est actuellement en cours en collaboration avec S. Ducruix et D. Durox du laboratoire EM2C de l'École Centrale Paris. Nous travaillons sur l'aspect numérique alors qu'ils effectuent des mesures expérimentales. D'autres projets sont en cours d'élaboration tel l'étude de flammes à contre-courant qui nous permettra d'aborder un point que nous n'avons pas évoqué dans ce travail: les limites d'extinction des flammes diphasiques. De même l'analyse des processus d'allumage et du bruit

qu'il génère est envisagé. Il faut néanmoins souligner le manque crucial de données expérimentales qui nous permettraient de valider les différents modèles mis en œuvre. Le développement de modèles pour la combustion turbulente diphasique devra donc accompagner celui des mesures expérimentales. L'objectif général étant la possibilité de capturer les propriétés principales (rendement, pollution, bruit) des fours, moteurs voitures ou moteurs aéronautiques quelles que soient leurs conditions d'utilisation.

Un dernier aspect qui n'a pas été abordé dans ce travail est le développement nécessaire de modèles précis de pulvérisation de nappes liquides afin d'estimer correctement la cartographie initiale des gouttes de combustibles qui seront dispersées et évaporées. Cet aspect, est un peu à part de ce que nous avons pu évoquer dans ce manuscrit car il implique des phénomènes physiques différents de ceux que nous avons pu aborder. Cependant, il n'est pas à négliger et à ce jour aucun 'vrai' modèle n'existe. Les données granulométriques actuellement connues sont principalement issues de la caractérisation expérimentale d'injecteurs.

# Bibliographie

- [1] J. Réveillon and L. Vervisch. Accounting for spray vaporization in non-premixed turbulent combustion modeling: A single droplet model (sdm). *Combustion and Flame*, 1(121):75–90, 2000.
- [2] D. Kaftori, G. Hestroni, and S. Banerjee. The effect of particles on wall turbulence. *Int. J. Multiphase Flow*, 24(3):359–386, 1998.
- [3] F.A. Williams. Spray combustion and atomization. *Phys. of Fluids*, (1):541–545, 1958.
- [4] P. Domingo, L. Vervisch, and K.N.C. Bray. Partially premixed flamelets in les of nonpremixed turbulent combustion. *Combust. Theory and Modeling*, 6(4), 2002.
- [5] L. Guichard, L. Vervisch, and P. Domingo. Two-dimensional weak choc-vortex interaction in a mixing zone. *AIAA journal*, 33(10), october 1995.
- [6] A. A. Wray. Minimal storage time-advancement schemes for spectral methods. Technical report, Center for turbulence research Report, Stanford University, 1990.
- [7] T. Poinso and S. K. Lele. Boundary conditions for direct simulations of compressible viscous flows. *J. Comput. Phys.*, 1(101):104–129, 1992.
- [8] M. Baum, T.J. Poinso, and D. Thévenin. Accurate boundary conditions for multicomponents reactive flows. *J. Comp. Phys.*, 116:247–261, 1994.
- [9] M. Germano. An algebraic property of the turbulent stress and its possible use in subgrid modeling. In *Eight symposium on turbulent shear flows*, pages (19–1–1)–(19–1–6), Munich, september 1991. Technical University of Munich.
- [10] D. K. Lilly. A proposed modification of the germano subgrid-scale closure method. *Phys. Fluids*, 4(3):633–635, march 1991.
- [11] C. Meneveau, T. S. Lund, and W. Cabot. A lagrangian dynamic subgrid-scale model of turbulence. *J. Fluid Mech.*, 319:353–386, 1996.
- [12] J.K. Dukowicz. A particle-fluid numerical model for liquid sprays. *J. Comput. Phys.*, (35):229–253, 1980.
- [13] P.J. O’Rourke. *Collective drop effects on vaporizing liquid sprays*. PhD thesis, Los Alamos National Laboratory, 87545, 1981.
- [14] C. Crowe, M. Sommerfeld, and Y. Tsuji, editors. *Multiphase flows with droplets and particles*. CRC Press, 1998.
- [15] G. Gouesbet and A. Berlemont. Eulerian and lagrangian approaches for predicting the behaviour of discrete particles in turbulent flows. *Prog. Energy Combust. Sci.*, 25:133–159, 1999.
- [16] S. Elgobashi. Direct numerical simulation of dispersed dilute two phase turbulent flows. In *Combustion and turbulence in two-phase flows, Lecture series 1996-02*. Von Karman Institute for Fluid Dynamics, 1996.
- [17] J. Réveillon, K.N.C. Bray, and L. Vervisch. Dns study of spray vaporization and turbulent micro-mixing. In *AIAA 98-1028*, 36th Aerospace Sciences Meeting and Exhibit, January 12-15, Reno NV, January 1998.
- [18] F. Mashayek. Simulations of reacting droplets dispersed in isotropic turbulence. *AIAA Journal*, 37(11):1420–1425, 1999.
- [19] Z. Lixing. *Theory and numerical modeling of and combustion*. Science Press and CRC Press, Inc., 1993.

- [20] F. Laurent, M. Massot, and P. Villedieu. Eulerian multi-fluid modeling for the numerical simulation of coalescence in polydisperse dense liquid spray. *J. Comput. Phys.*, 2003.
- [21] F. Laurent and M. Massot. Multi-fluid modeling of laminar poly-dispersed spray flames: Origin, assumptions and comparison of sectional and sampling methods. *Combustion Theory and Modeling*, 5(4):537–572, 2001.
- [22] J. B. Greenberg, I. Silverman, and Y. Tambour. On the origin of spray sectional conservation equations. *Combustion and Flame*, 118:90–96, 1993.
- [23] G. I. Taylor. Diffusion by continuous movements. *Proc. R. Soc. London*, 20:421–478, 1921.
- [24] J. L. Lumley. The mathematical nature of the problem of relating Lagrangian and Eulerian statistical functions in turbulence. In *Mécanique de la Turbulence (Marseille, 1961)*, pages 17–26. Éditions Centre National de la Recherche Scientifique, Paris, 1962.
- [25] R. H. Kraichnan. Lagrangian-history closure approximation for turbulence. *Phys. Fluids*, 8(4):575–598, 1965.
- [26] J. Weinstock. Lagrangian-eulerian relation and the independence approximation. *Phys. Fluids*, 19(11):1702–1711, 1976.
- [27] M. W. Reeks. On a kinetic equation for the transport of particles in turbulent flows. *Phys. Fluids*, 3(3):446–456, 1991.
- [28] K.E. Hyland, S. McKee, and M. W. Reeks. Derivation of a pdf kinetic equation for the transport of particles in turbulent flows. *J. Phys. A*, 32(34):6169–6190, 1999.
- [29] J.P. Minier and E. Peirano. The pdf approach to turbulent polydisperse two-phase flows. *Physics Reports*, 352:1–214, 2001.
- [30] F. Mashayek and R.V.R. Pandya. Analytical description of particle/droplet-laden turbulent flows. *Progress in Energy and Combustion Science*, 29:329–378, 2003.
- [31] S. Elgobashi and G.C. Truesdell. Direct numerical simulation of particle dispersion in a decaying isotropic turbulence. *J. Fluid Mech.*, 242:655–700, 1992.
- [32] P. Février. *Etude numérique des effets de concentration préférentielle et de corrélation spatiale entre vitesse de particules solides en turbulence homogène isotrope*. PhD thesis, Institut National Polytechnique de Toulouse, 2000.
- [33] F. Mashayek, F.A. Jaber, R.S. Miller, and P. Givi. Dispersion and polydispersity of droplets in stationary isotropic turbulence. *Int. J. Multiphase Flow*, 23(2):337–355, 1997.
- [34] R.S. Miller and J. Bellan. Direct numerical simulation of a confined three-dimensional gas mixing layer with one evaporating hydrocarbon-droplet-laden stream. *Journal of fluids mechanics*, 384:293–338, 1999.
- [35] R.S. Miller and J. Bellan. Direct numerical simulation and subgrid analysis of a transitional droplet laden mixing layer. *Phys. Fluid*, 12(3):650–671, 2000.
- [36] V. C. Khatumria and R. S. Miller. Numerical simulation of a fuel droplet laden exothermic mixing layer. *Int. J. Multiphase Flow*, 29:771–794, 2003.
- [37] A. Vallet, A. A. Burluka, and R. Borghi. Development of an Eulerian model for the "atomization" of a liquid jet. *Atomization and Sprays*, 11(5):521–544, 2001.
- [38] S. Jay. *Modélisation de la combustion diphasique au moyen de bilans d'aire interfaciale et de surface de flamme. Application à la combustion cryotechnique*. PhD thesis, Ecole Centrale de Paris, 2003.
- [39] S. Pope. *Turbulent flows*. Cambridge University, 2000.
- [40] A. Linán. The asymptotic structure of counterflow diffusion activation energies. *Acta Astronautica*, 1007, 1974.
- [41] R. W. Bilger. Turbulent diffusion flames. *Ann. Rev. Fluid Mech.*, 21:101–35, 1989.
- [42] C. T. Crowe, M. P. Sharma, and D. E. Stock. The particle-source in cell (psi cell) model for gas droplet flows. *Journal of Fluids Engineering*, pages 325–332, June 1977.
- [43] A. W. Cook and J. J. Riley. A subgrid model for equilibrium chemistry in turbulent flows. *Phys. Fluids*, 6(8):2868–2870, august 1994.

- [44] J. Réveillon and L. Vervisch. Response of the large eddy dynamic model to heat release induced effects. *Phys. Fluids*, 8(8), August 1996.
- [45] P.E. DesJardin and S.H. Frankel. Large eddy simulation of a nonpremixed reacting jet: Application and assessment of subgrid-scale combustion models. *Phys. Fluids*, 10(9):2298–2314, 1998.
- [46] R. Rawat, H. Pitsch, and J.F. Ripoll. Large-eddy simulation of pool fires with detailed chemistry using an unsteady flamelet model. *CTR Proc.*, pages 357–367, 2002.
- [47] J. Jimiénez, A. Liñán, M.M. Rogers, and F.J. Higuera. A priori testing of subgrid models for chemically reacting non-premixed turbulent shear flows. *J. Fluid Mech.*, 349:149–171, 1997.
- [48] A. W. COOK. Determination of the constant coefficient in scale similarity models of turbulence. *Phys. Fluids*, 9(5):1485–1487, may 1997.
- [49] C.D. Pierce and P. Moin. A dynamic model for subgrid-scale variance and dissipation rate of a conserved scalar. *Phys. Fluids*, 10(12):3041–3044, 1998.
- [50] M. Germano, U. Piomelli, P. Moin, and W. H. Cabot. A dynamic subgrid-scale eddy viscosity model. *Phys. Fluids*, 7(3):1760–1765, 1991.
- [51] P. Moin, K. Squires, W. Cabot, and S. Lee. A dynamic subgrid-scale model for compressible turbulence and scalar transport. *Phys. Fluids*, 3(11):2746–2757, november 1991.
- [52] C. Hollmann and E. Gutheil. Modeling of turbulent spray diffusion flames including detailed chemistry. In *Twenty-Sixth Symposium (International) on Combustion/The Combustion Institute*, pages 1731–1738, 1996.
- [53] C. Jiménez, F. Ducros, B. Cueno, and B. Cédât. Subgrid scale variance and dissipation of a scalar field in large eddy simulations. *Phys. Fluids*, 13(6):1748–1754, 2001.
- [54] J. Réveillon. *Simulation numérique des grandes structures appliquée aux flammes turbulentes non-prémélangées*. PhD thesis, Université de Rouen, 1996.
- [55] P. R. Voke and S. Gao. Numerical study of heat transfer from an impinging jet. *Int. J. Heat Mass Transfer*, 41(4-5):671–680, 1998.
- [56] G. J. Van Fossen, R. J. Simoneau, and C. Ching. Influence of turbulence parameters, reynolds number, and body shape on stagnation-region heat transfer. *Journal of heat transfer*, 117(3):597–203, 1995.
- [57] D. H. Lee, Y. S. Chung, and M. G. Kim. Turbulent heat transfer from a convex hemispherical surface to a round impinging jet. *Int. J. Heat Mass Transfer*, 42(6):1147–1156, 1999.
- [58] D. H. Lee, Y. S. Chung, and S. Y. Won. The effect of concave surface curvature on heat transfer from a fully developed round impinging jet. *Int. J. Heat Mass Transfer*, 42(13):2489–2497, 1999.
- [59] H. Yoshida, K. Suenaga, and R. Echigo. Turbulence structure and heat transfer of a two-dimensional impinging jet with gas-solid suspensions. *Int. J. Heat Mass Transfer*, 33(5):859–867, 1990.
- [60] T. Yokomine, A. Shimizu, A. Saitoh, and K. Higa. Heat transfer of multiple impinging jets with gas solid suspensions. *Experimental Thermal and Fluid Science*, (26):617–626, 2002.
- [61] W. Ling, J.N. Chung, T.R. Troutt, and C.T. Crowe. Direct numerical simulation of a three-dimensional temporal mixing layer with particle dispersion. *Journal of fluids mechanics*, (358):61–85, 1998.
- [62] K. D. Squires and J.K. Eaton. Measurements of particle dispersion obtained from direct numerical simulations of isotropic turbulence. *J. Fluid Mech.*, 226:1–35, 1990.
- [63] P. A. Vaillancourt and M. K. yau. Review of particle-turbulence interactions and consequences for cloud physics. *Bulletin of the American Meteorological Society*, 81(2):285–298, 2000.
- [64] M. R. Wells and D. E. Stock. The effects of crossing trajectories on the dispersion of particles in a turbulent flow. *Journal of fluids mechanics*, 136:31–62, 1983.
- [65] G. Hestroni. Particle-turbulence interaction. *Int. J. Multiphase Flow*, 15(5):735–746, 1989.
- [66] C. Li, A. Mosyak, and G. Hestroni. Direct numerical simulation of particle-turbulence interaction. *Int. J. Multiphase Flow*, 25:187–200, 1999.
- [67] Y.M. Chung, K.H. Luo, and N.D. Sandham. Numerical study of momentum and heat transfer in unsteady impinging jet. *Int. j. of heat and fluid flow*, 23:592–600, 2002.

- [68] E.M. Sparrow and T.C. Wong. Impingement transfer coefficients due to initially laminar slot jets. *Int. J. Heat Mass Transfer*, (68):597–605, 1975.
- [69] C. Desmeuzes. Hydroérosion : Essai soufflerie, premiers dépouillement des essais onera diphasiques. Technical report, CEA/CESTA/DIA/SCDA/GREC DO 256, 1997.
- [70] F. A. Williams. Progress in spray combustion analysis. In The combustion institute, editor, *Proceedings of the 8th Symposium (International) on combustion*, 1960.
- [71] M. Sichel P.B. Patil and J.A. Nicolls. Analysis of spray combustion in a reserach turbin combustor. *Combustion Science and Technology*, 18:21–31, 1978.
- [72] G.A. Richards and P.E. Sojka. A model of h<sub>2</sub>-enhanced spray combustion. *Combustion and Flame*, 79:319–332, 1990.
- [73] T. H. Lin, C. K. Law, and S. H. Chung. Theory of laminar flame propagation in off-stoichiometric dilute spray. *Int. J. Heat Mass Transfert*, 31(5):1023–1034, 1988.
- [74] T. H. Lin and Y. Y. Sheu. Theory of laminar flame propagation in near stoichiometric dilute spray. *Combustion and Flame*, 84:333–342, 1991.
- [75] C.E. Polymeropoulos. Flame propagation in aerosols of fuel droplets, fuel vapor and air. *Combustion Science and Technology*, 40:217–232, 1984.
- [76] I. Silverman, J. B. Greenberg, and Y. Tambour. Asymptotic analysis of a premixed polydispersed spray flame. *SIAM J. Appl. Math*, 51(5):1284–1303, 1991.
- [77] I. Silverman, J. B. Greenberg, and Y. Tambour. Stoichiometry and polydisperse effects in premixed spray flames. *Combustion and Flame*, 118:97–118, 1993.
- [78] H. Yamashita, M. Shimada, and T. Takeno. A numerical study on flame stability at the transition point of jet diffusion flames. *Proc. Combust. Inst*, 26:27–34, 1996.
- [79] Y. Mizobuchi, S. Tachibana, J. Shinjo, S. Ogawa, and T. Takeno. A numerical analysis on structure of turbulent hydrogen jet lifted flame. *Proc Combust Inst*, 29, 2002.
- [80] V. Favier and L. Vervisch. Edge flames and partially premixed combustion in diffusion flame quenching. *Combust. Flame*, 125(1-2):788–803, 2001.
- [81] T. Suzuki and H.H. Chiu. Multi droplet combustion on liquid propellants. In *Proceedings of the Ninth International Symposium on Space and Technology and Science*, pages 145–154, Tokyo, Japan, 1971. AGNE.
- [82] H.H. Chiu and T.M. Liu. Group combustion of liquid droplets. *Comb. Sci. Technol.*, 17:127–131, 1977.
- [83] H. H. Chiu and E. J. Croke. Group combustion of liquid fuel sprays. Technical report, Energy Technology Lab Report 81-2, Univ. of Illinois at Chicago, 1981.
- [84] H. H. Chiu, H. Y. Kim, and E. J. Croke. Internal group combustion of liquid droplets. In The combustion institute, editor, *Proceedings of the nineteenth Symposium (International) on combustion*, 1982.
- [85] S. Candel, F. Lacas, N. Darabiha, and C. Rolon. Group combustion in spray flames. *Multiphase Sci. Tech.*, 11:1–18, 1999.
- [86] S. H. Chang, editor. *Transport Phenomena in combustion*. Taylor and Francis, 1996.
- [87] R. Borghi. *The links between turbulent combustion and spray combustion and their modelling*, pages 1–18. In Chang [86], 1996.
- [88] R. Borghi. Background on droplets and sprays. In *Combustion and turbulence in two-phase flows, Lecture series 1996-02*. Von Karman Institute for Fluid Dynamics, 1996.
- [89] R. Borghi and M. Champion, editors. *Modélisation et théorie des flammes*. Technip, 2000.
- [90] E. Mastorakos, T. A. Baritaud, and T. J. Poinso. Numerical simulations of autoignition in turbulent mixing flows. *Combust. Flame*, 109:198–223, 1997.
- [91] A. Cessou and D. Stepowski. Planar laser induced fluorescence measurement of [oh] in the stabilization stage of a spray jet flame. *Combust. Sci. and Tech.*, 118(4-6):361–381, 1996.
- [92] K.K. Kuo, editor. *Principles of combustion*. John Wiley and sons, 1986.



- [93] S. Candel. Combustion instabilities coupled with pressure waves and their active control. In Pittsburgh The combustion institute, editor, *Proceedings of the 24th Symposium (International) on combustion*, 1992.
- [94] S. Ducruix. *Dynamique des interactions Acoustique - combustion*. PhD thesis, Ecole Centrale Paris, 1999.
- [95] S. Ducruix, D. Durox, and S. Candel. Determination of the transfer function of a laminar premixed flame. In *Proceedings of the combustion institute*, 2000.
- [96] H. Phillips. Flame in a buoyant methane layer. *Proc. Combust. Inst.*, 10:1277–1283, 1965.
- [97] J. W. Dold. Flame propagation in a nonuniform mixture: analysis of a slowly varying triple flame. *Combust. Flame*, 76:71–88, 1989.
- [98] L. J. Hartley and J. W. Dold. Flame propagation in a nonuniform mixture: analysis of a propagating triple flame. *Combust. Sci. and Tech.*, 80:23–46, 1991.
- [99] S. Ghosal and L. Vervisch. Theoretical and numerical investigation of symmetrical triple flame using a parabolic flame tip approximation. *J. Fluid Mech.*, 415:227–260, 2000.
- [100] E.D. Siggia and G.S. Patterson. Intermittency effects in a numerical simulation of stationary three-dimensional turbulence. *Journal of Fluid Mechanics*, 86:567–592, 1978.
- [101] L. Sirovich, editor. *New perspectives in Turbulence*. Springer, Berlin, 1991.
- [102] V. Eswaran and S.B. Pope. Direct numerical simulations of the turbulent mixing of the passive scalar. *Phys. Fluids*, 31(3):506–520, march 1988.
- [103] M. R. Overholt and S. B. Pope. A deterministic forcing scheme for direct numerical simulation of turbulence. *Computer and Fluid*, 27:11–28, 1998.
- [104] C. Canuto, M.Y. Hussaini, A. Quarteroni, and T.A. Zang. *Spectral methods in Fluid Dynamics*. Springer-Verlag, 1988.
- [105] T. Poinso and D. Veynante. *Theoretical and Numerical Combustion*. Edwards, 2001.
- [106] M. Raffel, C. E. Willert, and J. Kompenhans. *Particle Image Velocimetry*. Springer, 1998.
- [107] B. Lecordier. *Etude de l'interaction de la propagation d'une flamme prémélangée avec le champ aérodynamique, par association de la tomographie laser et de la vélocimétrie par images de particules*. PhD thesis, Université de Rouen, 1997.
- [108] E. Rouland. *Etude et développement de la technique de vlocimtrie par intercorrlation d'images de particules. Application aux coulements en tunnel hydrodynamique*. PhD thesis, Univ. of Rouen, 1994.
- [109] L. Guichard, B. Lecordier, and J. Réveillon. Evaluation des algorithmes utilisés en piv grâce à la simulation numérique directe. In *6ieme Congrès francophone de Vélocimétrie Laser, F-5*. Saint-Louis, France, September 1998.