



HAL
open science

Simulation numérique de l'écoulement d'un mélange air et phase dispersée pour l'allumage d'une chambre de combustion aéronautique via un formalisme Euler

Lagrange

Loïc Hervo

► **To cite this version:**

Loïc Hervo. Simulation numérique de l'écoulement d'un mélange air et phase dispersée pour l'allumage d'une chambre de combustion aéronautique via un formalisme Euler Lagrange. Milieux fluides et réactifs. INSTITUT SUPERIEUR DE L'AERONAUTIQUE ET DE L'ESPACE (ISAE); UNIVERSITE DE TOULOUSE, 2017. Français. NNT: . tel-01702848

HAL Id: tel-01702848

<https://hal.science/tel-01702848>

Submitted on 7 Feb 2018

HAL is a multi-disciplinary open access archive for the deposit and dissemination of scientific research documents, whether they are published or not. The documents may come from teaching and research institutions in France or abroad, or from public or private research centers.

L'archive ouverte pluridisciplinaire **HAL**, est destinée au dépôt et à la diffusion de documents scientifiques de niveau recherche, publiés ou non, émanant des établissements d'enseignement et de recherche français ou étrangers, des laboratoires publics ou privés.



THÈSE

En vue de l'obtention du

DOCTORAT DE L'UNIVERSITÉ DE TOULOUSE

Délivré par : *l'Institut Supérieur de l'Aéronautique et de l'Espace (ISAE)*

Présentée et soutenue le 15/12/2017 par :

Loïc HERVO

**Simulation numérique de l'écoulement d'un mélange air et phase dispersée
pour l'allumage d'une chambre de combustion aéronautique via un
formalisme Euler Lagrange**

JURY

BÉNÉDICTE CUENOT

PASCALE DOMINGO

BENOÎT FIORINA

FABIEN HALTER

ARNAUD MURA

STÉPHANE RICHARD

JEAN-MATHIEU SENONER

Chercheur senior

Directrice de recherche

Professeur

Professeur

Directeur de recherche

Ingénieur de recherche

Ingénieur de recherche

Directrice de thèse

Présidente du Jury

Membre du Jury

Rapporteur

Rapporteur

Membre du Jury

Co-directeur de thèse

École doctorale et spécialité :

MEGEP : Énergétique et transferts

Unité de Recherche :

ONERA (DMPE)

Directeur(s) de Thèse :

Bénédicte CUENOT et Jean-Mathieu SENONER

Rapporteurs :

Fabien HALTER et Arnaud MURA

Table des matières

Partie I Équations et modèles pour un écoulement turbulent diphasique réactif

Chapitre 1: Équations et modèles pour la simulation numérique de combustion diphasique

1.1	Équations de conservation pour la phase gazeuse	8
1.1.1	Conservation de l'espèce k	8
1.1.2	Flux de diffusion de l'espèce k	9
1.1.3	Conservation de la quantité de mouvement	11
1.1.4	Grandeurs thermodynamiques	11
1.1.5	Conservation de l'énergie	12
1.1.6	Flux de diffusion de chaleur	13
1.1.7	Taux de réaction chimique	14
1.1.8	Loi d'état	15
1.1.9	Description des propriétés de transport	15
1.2	Description et modélisation de la turbulence	16
1.2.1	Phénoménologie de la turbulence	16
1.2.2	Simulation numérique de la turbulence	17
1.3	Description et modélisation de la combustion	22
1.3.1	Flamme de diffusion et flamme de pré-mélange	22
1.3.2	Modélisation de la combustion turbulente	24
1.3.3	Modélisation de la chimie	27
1.4	Description et modélisation de la phase dispersée	29
1.4.1	Fonction de densité de probabilité du spray	29
1.4.2	Forces agissant sur une particule	31
1.4.3	Échange de masse et d'énergie d'une particule isolée avec son environnement	32
1.4.4	Échange entre le gaz et la phase dispersée	37

1.4.5	<i>Interactions avec la turbulence</i>	38
1.4.6	<i>Diamètres caractéristiques d'un spray</i>	38
1.5	Description et modélisation de la combustion diphasique	39
1.5.1	<i>Combustion diphasique laminaire</i>	39
1.5.2	<i>Combustion diphasique turbulente</i>	43
1.6	Présentation du code CEDRE	48
1.6.1	<i>Le solveur CHARME</i>	48
1.6.2	<i>Le solveur SPARTE</i>	52

Partie II Modèles pour la simulation de l'allumage

Chapitre 2: Dépôt d'énergie et expansion de noyaux de flamme dans un écoulement laminaire

2.1	Présentation du phénomène d'allumage et de sa modélisation	60
2.1.1	<i>Différents moyens d'allumage</i>	60
2.1.2	<i>Physique de l'allumage par bougie</i>	60
2.1.3	<i>Énergie minimale d'allumage</i>	63
2.1.4	<i>Influence de l'aspect diphasique</i>	63
2.1.5	<i>Modélisation du noyau d'allumage</i>	64
2.2	Implémentation de la méthode de dépôt d'énergie dans CEDRE	66
2.2.1	<i>Extension de la validité des propriétés thermodynamiques</i>	66
2.2.2	<i>Vérification des vitesses de flamme en écoulement purement gazeux</i>	71
2.2.3	<i>Ajout d'un terme source d'énergie volumique instationnaire</i>	73
2.3	Validation de l'expansion du noyau de flamme	75
2.3.1	<i>Simulation de l'allumage d'un mélange air-propane en écoulement laminaire</i>	75
2.3.2	<i>Vérification de l'expansion du noyau de flamme</i>	76
2.4	Étude de l'allumage d'un mélange diphasique	80
2.5	Conclusion	82

Partie III Simulation de la maquette monosecteur du banc MERCATO

Chapitre 3: Simulations numériques de l'écoulement turbulent monophasique inerte de la configuration MERCATO

3.1	Présentation du banc MERCATO	86
3.1.1	<i>Description du MERCATO et de la maquette mono-secteur.</i>	86
3.1.2	<i>Travaux effectués précédemment sur le MERCATO</i>	87
3.2	Mise en place de la simulation de l'écoulement gazeux non-réactif.	91
3.3	Comparaison des résultats numériques aux résultats expérimentaux	92
3.3.1	<i>Vitesses de l'écoulement gazeux.</i>	92
3.3.2	<i>L'instabilité tourbillonnaire PVC.</i>	95
3.3.3	<i>Pertes de charge.</i>	99
3.4	Conclusion	101

Chapitre 4: Simulation de l'écoulement turbulent diphasique inerte de la configuration MERCATO

4.1	Modélisation de l'injection	104
4.1.1	<i>Modélisation de la vitesse des gouttes : méthode FIMUR.</i>	104
4.1.2	<i>Modélisation de la distribution de taille des particules</i>	108
4.2	Mise en place de la simulation de l'écoulement diphasique non-réactif	113
4.3	Comparaison des résultats numériques aux résultats expérimentaux	115
4.3.1	<i>Champ instantané de l'écoulement diphasique</i>	115
4.3.2	<i>Profil de vitesse</i>	115
4.3.3	<i>Profil de diamètre.</i>	119
4.3.4	<i>Répartition du flux volumique</i>	121
4.3.5	<i>Influence de la phase dispersée sur l'écoulement gazeux.</i>	122
4.4	Conclusion	123

Chapitre 5: Simulation de l'écoulement réactif pendant l'allumage du MERCATO

5.1	Vérification de la vitesse de flamme en écoulement diphasique	126
5.2	Implémentation de la correction du modèle de flamme épaissie en présence d'une phase dispersée	130
5.2.1	<i>Implémentation dans le code CEDRE</i>	130
5.2.2	<i>Validation du modèle sur un cas de flamme 1D diphasique</i>	131
5.3	Mise en place des simulations d'allumages	133

5.4 Résultats des simulations d'allumage	136
5.4.1 <i>Premières simulations menant à un échec de l'allumage</i>	136
5.4.2 <i>Simulation avec plus d'énergie déposée</i>	136
5.4.3 <i>Comparaison avec les données expérimentales</i>	141
5.4.4 <i>Impact du modèle thermique de paroi et de la fonction d'efficacité du modèle de combustion turbulente</i>	145
5.5 Conclusion	146

Partie IV Conclusions générales

Chapitre 6: Conclusions générales et perspectives

Remerciements

Je tiens à remercier particulièrement Jean-Mathieu Senoner pour toute l'aide qu'il m'a apporté pendant cette thèse. Merci pour ta disponibilité et ton dynamisme qui m'ont permis de réaliser cette thèse. Merci aussi à Bénédicte Cuenot, ma directrice de thèse, qui a apporté ses connaissances pointues de la combustion à ces travaux.

Je tiens également à remercier Pierre Millan et Pierre Gajan pour m'avoir accueilli à l'ONERA au sein du département DMPE et de l'unité MH. Je remercie également la DGA d'avoir contribué au financement de cette thèse.

Je remercie l'ensemble des membres du jury de s'être intéressé à ces travaux.

Je remercie les autres personnes de l'ONERA qui m'ont aidé au cours de cette thèse : Olivier Rouzaud, Nicolas Bertier, François Chedevergne, François Laurendeau, Lionel Matuszewski, Corinne Plantade et Valérie Duplessis, Ghislain Blanchard, Davide Zuzio.

Je remercie mes collègues de bureau Maxime et Jean-François avec qui j'ai pu discuter longuement de sujets divers plus ou moins scientifiques.

Je remercie également les autres doctorants et stagiaires avec qui j'ai partagé plein de bons moments : Baptiste, Baptiste, Thibaud, Anthony, Frank, Pierre, Pierre, Charlotte, Rémy, Isabelle, Ana, Vincent, Thibaud, Swann, Julien, Maxime, François.

Je remercie aussi mes amis toulousains Adeline, Jules, Ronan, Cyprien, Kévin, Thomas, Matthieu, Jean, Maxime et mes amis de Brenne : Auguste, Gwladys, Alexis, Lise, Valentin, Nicolas et Mélodie.

Enfin, je remercie ma famille du fond du coeur. Je remercie plus particulièrement mes parents et ma soeur pour leur soutien.

Liste des symboles

Lettres romaines

s_e^{p-f}	terme source d'énergie provenant de la phase dispersée
$[X_k]$	concentration molaire de l'espèce k
\tilde{u}	vitesse du gaz non perturbée par la particule
f_p	forces extérieures exercées sur l'espèce p
\dot{m}_g	débit massique de gaz
\dot{m}_l	débit massique de liquide
\dot{Q}	terme source de chaleur externe
u_i	composante du vecteur vitesse du gaz suivant l'axe i
$A_{f,j}$	constante préexponentielle de la réaction j
C_d	coefficient de traînée
$c_{p,k}$	capacité thermique massique à pression constante de l'espèce k
$c_{v,k}$	capacité thermique massique à volume constant de l'espèce k
D_k	coefficient de diffusivité moléculaire de l'espèce k
d_p	diamètre de la particule p
d_{10}	diamètre moyen arithmétique des gouttes
d_{32}	diamètre moyen de Sauter
D_{pk}	coefficient binaire de diffusion massique de l'espèce p dans l'espèce k
$D_{T,p}$	coefficient de diffusion thermique de l'espèce p dans le mélange
E	fonction d'efficacité du modèle de flamme épaissie
E	énergie totale non chimique

Nomenclature

E_j	énergie d'activation de la réaction j
e_t	énergie totale
$e_{s,k}$	énergie sensible massique de l'espèce k
F	facteur d'épaississement du modèle de flamme épaissie
f_j	composante des forces volumiques suivant la direction j
G_j^0	enthalpie libre de réaction
h_k	enthalpie massique de l'espèce k
$h_{s,k}$	enthalpie sensible massique de l'espèce k
$h_{s,p}$	enthalpie sensible de la particule p
$J_{i,k}$	flux de diffusion de l'espèce k dans l'axe i
K	étirement d'une flamme
K_{ev}	constante d'évaporation
K_{fj}	constantes de réaction j
l_t	échelle intégrale de la turbulence
L_{ev}	chaleur latente d'évaporation
m_k	masse de l'espèce k
m_p	masse de la particule p
n_k	nombre de mole de l'espèce k
p	pression
q_i	composante du flux de diffusion de chaleur selon l'axe i
R	constante des gaz parfaits
r_p	rayon de la particule p
s_m^{p-f}	terme source de masse de la phase dispersée
$s_{m,k}^{p-f}$	terme source de l'espèce k provenant de la phase dispersée
$s_{v,j}^{p-f}$	terme source de quantité de mouvement provenant de la phase dispersée
s_k	entropie massique de l'espèce k
S_l	vitesse de flamme
s_{ij}	partie symétrique du tenseur de gradient de vitesse

T	température du mélange
T_g	température du gaz
T_l	température du liquide
u^+	vitesse de paroi
$u_{k,i}$	composante de la vitesse de l'espèce k selon l'axe i
V	volume
$V_{k,i}$	composante de la vitesse de diffusion de l'espèce k selon l'axe i
$v_{p,i}$	vitesse de la particule p suivant la direction i
W_k	masse molaire de l'espèce k
w_k	poids numérique de la particule k
X_k	fraction molaire de l'espèce k
y^+	longueur de paroi
Y_k	fraction massique de l'espèce k

Lettres grecques

$\Delta h_{f,k}^0$	enthalpie standard massique de formation de l'espèce k
δ_l	épaisseur de flamme
δ_{ij}	symbole de Kronecker
$\dot{\omega}_k$	taux de réaction chimique de l'espèce k
$\dot{\omega}_T$	taux de dégagement de chaleur
ϵ_i	énergie déposée dans le gaz
η_k	échelle de Kolmogorov
λ	conductivité thermique du fluide
μ	viscosité dynamique du fluide
ν	viscosité cinématique
$\omega_{p,i}$	poids numérique de la particule i
ϕ	richesse du mélange
ρ	masse volumique du gaz
σ_p	tension de surface de la goutte

Nomenclature

τ_{ij} tenseur des contraintes visqueuses

Nombres sans dimensions

B_M nombre de Spalding massique

B_T nombre de Spalding thermique

Le nombre de Lewis

Nu nombre de Nusselt

Pr nombre de Prandtl

Re nombre de Reynolds

Sc nombre de Schmidt du gaz

Sh nombre de Sherwood

St nombre de Stokes

We nombre de Weber

Introduction

Dans le secteur aéronautique, les contraintes de sécurité sont au cœur du processus de certification de nouveaux modèles d'avion et de moteurs. Par exemple, pour certifier un moteur d'hélicoptère, il faut démontrer que ce dernier peut être allumé / réallumé même dans des conditions difficiles rencontrées en haute altitude. Actuellement, les constructeurs s'appuient sur de nombreux essais pour déterminer les capacités d'allumage de nouveaux moteurs, ce qui s'avère long et coûteux. Une amélioration de la précision des outils de simulation numérique pour l'allumage pourrait permettre de réduire la nécessité des essais dans le processus de design de chambre de combustion. Cependant, l'allumage d'un moteur aéronautique met en jeu une multitude de phénomènes physiques complexes.

En effet, l'allumage nécessite un fort apport d'énergie localisé qui va généralement conduire à la formation d'un plasma interagissant avec un écoulement. Cet écoulement est à la fois turbulent et diphasique car constitué d'une phase porteuse sous forme gazeuse et d'une phase liquide de carburant. La phase liquide est injectée sous forme continue et va s'atomiser pour former un brouillard de gouttelettes propice à l'évaporation et ainsi alimenter la combustion.

Plusieurs étapes peuvent être distinguées pendant l'allumage d'une chambre de combustion aéronautique. Tout d'abord, la formation du noyau de flamme peut être observée. Cette étape commence par la formation d'un plasma provoqué par la décharge d'une bougie électrique, la focalisation d'un faisceau laser ou la génération de micro-ondes. Ensuite, la diffusion de la chaleur déposée dans l'écoulement conduit à la formation d'un noyau de gaz chauds. C'est à l'intérieur de ce noyau que les réactions de combustion vont être amorcées. Cette période a fait l'objet de plusieurs études afin de comprendre les phénomènes physiques à l'oeuvre. De nombreuses études se sont consacrées à la détermination des caractéristiques de ce noyau sans prendre en compte explicitement la présence du plasma [28, 39, 81]. Le noyau réactif va ensuite se propager et être convecté dans la chambre. Il est également plissé par son interaction avec les structures tourbillonnaires de l'écoulement. Le noyau peut s'éteindre ou conduire à une flamme établie, on parle alors d'allumage réussi de la chambre. Plusieurs études expérimentales et numériques ont montré que la capacité du noyau de flamme à se propager jusqu'à l'établissement d'une flamme est dépendante de sa trajectoire dans la chambre et donc de son historique [29, 81, 97]. Parmi les principaux phénomènes pouvant mener à une extinction au cours de cette phase propagative, on peut citer la présence de mélanges air carburant localement trop pauvres ou trop riches ainsi que des niveaux de vitesse conduisant au soufflage de la flamme. Finalement, les chambres de combustion de moteurs d'avions ou d'hélicoptères ont une forme annulaire et sont constituées de plusieurs secteurs. L'allumage étant initié dans un nombre limité de secteurs voire un seul, la propagation de la flamme à l'ensemble des secteurs doit également être assurée. Plusieurs études ont été menées au sujet de cette propagation [12, 14, 81, 84]. La propagation de la flamme d'un secteur à l'autre est grandement influencée par la distance entre les injecteurs. De plus, la propagation de la flamme se produit à une

vitesse plus élevée que la vitesse de flamme grâce à l'expansion des gaz chauds qui aide à convecter le front de flamme de l'injecteur de démarrage vers les autres secteurs de la chambre.

Plusieurs difficultés se présentent lors de la réalisation de simulations numériques de ces phénomènes. L'allumage est un phénomène instationnaire nécessitant des simulations de type Simulations aux Grandes Echelles (SGS) ou Large Eddy Simulation (LES) et éventuellement des Simulations Numériques Directes ou Direct Numerical Simulation (DNS) pour pouvoir le capturer. Ces approches restent coûteuses en termes de temps de calcul. Par ailleurs, la combustion d'hydrocarbures met en jeu un grand nombre de réactions chimiques et d'espèces. En termes d'ordres de grandeur, la combustion du kérosène comporte plusieurs centaines de réactions et d'espèces chimiques. Une simplification de la cinétique de combustion s'avère donc nécessaire. De surcroît, le front de flamme va interagir avec la turbulence. Bien que cette interaction soit recherchée puisqu'elle permet d'augmenter le taux de dégagement de chaleur par unité de volume, sa modélisation demeure complexe. En dépit de ces difficultés, des progrès significatifs ont pu être effectués et des simulations numériques d'allumage de chambres multi-secteur présentant un bon accord avec les résultats expérimentaux ont pu être réalisées [11, 97]. Une très grande part des carburants usuels sont liquides, ce qui implique de prendre en compte un écoulement diphasique dans la chambre de combustion. Deux formalismes différents peuvent être employés pour décrire le comportement du nuage de gouttes, aussi appelé phase dispersée, dans la chambre. Le formalisme Eulérien résout un système d'équations de conservation pour les principaux moments de la fonction de densité de probabilité du spray. Le formalisme Lagrangien approche quant à lui cette fonction de densité de probabilité par un échantillon de particules numériques suivies dans leur propre référentiel. Plusieurs simulations numériques d'allumage reposant sur un formalisme Eulérien ont été effectuées [14, 42, 62, 118]. Ces simulations permettaient de reproduire correctement l'écoulement diphasique réactif dans la chambre, mais elles reposaient sur un formalisme Eulérien localement monodisperse, alors que les brouillards rencontrés dans les chambres de combustion sont généralement fortement polydisperses, c'est à dire avec une distribution de diamètres sur une plage assez étendue, typiquement de 5 à 150 micromètres. Par ailleurs, le temps d'évaporation d'une goutte de carburant étant proportionnel au carré de son diamètre à l'ordre 0, cette limitation semble problématique pour des simulations diphasiques réactives. Ainsi, des simulations numériques reposant sur des approches polydisperses sectionnelles ou par classes sont plus récemment apparues. D'autres simulations ont été réalisées avec une représentation Lagrangienne de la phase dispersée [58, 103]. Ces simulations ont bien reproduit des régimes de flamme établie dans différentes configurations. Par exemple, les profils de vitesse de l'écoulement gazeux et de la phase dispersée ont été bien reproduits. De plus, la position et la structure de la flamme sont elles aussi bien retrouvées dans les simulations numériques.

Cette thèse s'inscrit dans la continuité de plusieurs thèses menées à l'ONERA et au CERFACS ayant pour but la simulation numérique d'une séquence d'allumage du montage monosecteur du banc expérimental MERCATO, installé sur le site du Fauga-Mauzac de l'ONERA. Ce montage dispose aujourd'hui d'une importante base de données expérimentales permettant de caractériser de manière précise les écoulements turbulents monophasique inerte, diphasique inerte et diphasique réactif dans la chambre de combustion de ce montage. Par ailleurs, des campagnes expérimentales de caractérisation de séquences d'allumage ont également été menées, en particulier en conditions dépressurisées froides caractéristiques d'un allumage en haute altitude.

Linassier [81] a mené une campagne d'essais expérimentale très complète qui a permis d'acquérir de nombreuses données sur l'écoulement diphasique turbulent réactif du banc MERCATO. Il a en particulier caractérisé la vitesse du gaz et des particules dans des conditions réactives et non-réactives

et effectué des visualisations de séquences d'allumage. Il a par ailleurs réalisé des simulations de l'écoulement dans cette maquette en utilisant une méthode URANS ainsi qu'un formalisme Lagrangien pour représenter la phase dispersée. Ces simulations reproduisaient les principales caractéristiques de l'écoulement ainsi que les étapes majeures se produisant au cours d'un allumage de la chambre de combustion. Cependant, en vertu du formalisme URANS employé, ces simulations ne prenaient en compte que les plus basses fréquences de l'écoulement. Ainsi, l'instabilité hydrodynamique de type PVC ("precessing vortex core") n'était pas capturée.

Eyssartier [42] a réalisé des simulations numériques de l'écoulement diphasique en conditions non réactives et réactives du banc MERCATO au cours de sa thèse. Il a également effectué des simulations numériques de début d'allumage sur cette même maquette. Pour réaliser ces simulations, il a utilisé une approche LES avec une chimie simplifiée et un formalisme Eulérien pour représenter la phase dispersée. Ces simulations reproduisaient fidèlement les grandeurs de l'écoulement dont par exemple la fréquence des grandes instabilités tourbillonnaires caractéristiques de cette configuration. Mais la dispersion spatiale en taille des gouttes n'était que partiellement reproduite du fait de l'utilisation d'un formalisme Eulérien monodisperse. De plus, la propagation du noyau de flamme à l'ensemble de la chambre de combustion était trop rapide par rapport aux données expérimentales. Pendant sa thèse, il a également mis au point [43] un modèle de cartographie de probabilité d'allumage baptisé ICRIT-LES. Ce modèle repose sur l'évaluation de 5 critères prenant en compte différents phénomènes pouvant empêcher un allumage. Ce modèle ICRIT-LES a permis de réaliser des cartographies d'allumage permettant d'identifier les zones de l'écoulement où l'allumage était possible. Finalement, les probabilités d'allumages obtenues dans les simulations numériques étaient plus importantes que celles observées expérimentalement.

Bruyat [19] a réalisé au cours de sa thèse des simulations de l'écoulement diphasique non-réactif et réactif dans la chambre MERCATO. Elle a également implémenté des méthodes pour simuler l'évaporation de gouttes contenant plusieurs composants. Puis, elle a étudié l'influence de l'évaporation multicomposant sur la structure de flammes diphasiques simples. Pour réaliser ces simulations, elle a utilisé une méthode LES avec une chimie simplifiée et un formalisme lagrangien pour représenter la phase dispersée. Ces simulations ont permis de mettre en évidence la capacité de simulations Euler-Lagrange à correctement reproduire l'écoulement dans la chambre MERCATO. Elles ont également permis de mieux comprendre l'influence de l'évaporation sur la structure des flammes diphasiques. Mais les simulations de l'allumage de la chambre MERCATO effectuées au cours de cette thèse souffraient de problèmes numériques sévères provoquant une montée en pression extrêmement rapide de la chambre de combustion et un retour de flamme non observé expérimentalement.

En résumé, il existe une base de données expérimentale suffisamment fournie pour valider des simulations numériques de la configuration MERCATO par la comparaison de différentes grandeurs des écoulements : profils de vitesse, spectres de pression et position du front de flamme. Des simulations numériques LES avec les formalismes Eulérien et Lagrangien ont permis de reproduire ces grandeurs caractéristiques observées expérimentalement.

Des progrès restent cependant à faire pour rendre les simulations numériques de l'allumage dans cette configuration plus fidèles aux observations expérimentales. De plus, aucune séquence complète d'allumage dans une chambre de combustion aéronautique n'a été simulée. Cette thèse se donne pour but de contribuer à ces efforts en réalisant une simulation numérique aux grandes échelles (LES) de l'écoulement d'un mélange d'air et d'une phase dispersée pendant une séquence complète d'allumage d'une chambre de combustion aéronautique via un formalisme Euler-Lagrange.

L'organisation de ce manuscrit suit la démarche menée pendant la thèse.

Le premier chapitre présente différents phénomènes intervenant dans la combustion turbulente diphasique et leur modélisation. Ainsi, la modélisation de la turbulence, de la combustion gazeuse et d'un écoulement diphasique sont présentés. Ensuite, quelques phénomènes importants liés à leurs interactions sont brièvement présentés.

Dans le second chapitre, une description du phénomène d'allumage est fournie et la démarche suivie dans cette thèse exposée. Les développements ont consisté en une extension des propriétés thermodynamiques pour des températures supérieures à 5000K afin d'être capable de représenter le mélange gazeux dans les premiers instants suivant le dépôt d'énergie. Ensuite, l'ajout d'un terme source instationnaire d'énergie volumique représentant ce dépôt a été validé. Par ailleurs, une vérification des vitesses de flamme laminaires d'un mélange propane air a été effectuée. Ces développements ont ensuite été utilisés pour simuler l'allumage d'un écoulement prémélangé laminaire gazeux. La vitesse d'expansion du noyau de flamme observée numériquement a été comparée avec des données expérimentales de Renou et Boukhalfa [111] et des données numériques obtenues par Enaux [39] avec le code AVBP sur ce même cas. Ensuite, une étude qualitative de l'influence de la présence d'une phase dispersée sur une simulation d'allumage laminaire a été effectuée.

L'étape suivante détaillée dans le troisième chapitre a consisté à vérifier la capacité du code CEDRE à simuler l'écoulement turbulent au sein de la chambre de combustion du banc MERCATO. Ainsi, les profils de vitesses sur différents plans de mesures, la fréquence de l'instabilité tourbillonnaire principale et les pertes de charge dans l'injecteur mesurés dans les simulations numériques ont été comparés aux données expérimentales. Ces différentes comparaisons ont permis de vérifier que les principales caractéristiques de l'écoulement observées expérimentalement étaient correctement reproduites dans les simulations numériques.

Afin de permettre la simulation de l'écoulement diphasique non réactif de cette même configuration, un modèle d'injection simplifié permettant de reproduire la vitesse et la taille des gouttes observées expérimentalement a été implémenté dans le code CEDRE et validé sur un cas élémentaire. La simulation diphasique effectuée à l'aide de ce modèle a ensuite été validée par comparaison de profils de vitesses et de taille de la phase dispersée avec les données expérimentales.

Finalement, le cinquième chapitre détaille comment les différentes fonctionnalités précédemment mentionnées ont été combinées pour réaliser les simulations d'allumage de l'écoulement turbulent diphasique dans la configuration MERCATO. Pour s'assurer des capacités du code CEDRE à simuler un écoulement diphasique réactif, des simulations de flammes diphasiques saturées monodimensionnelles ont été réalisées. Le schéma cinétique simplifié en deux étapes nommé BFER [48] à été utilisé pour modéliser la combustion du kérosène. Pour le modèle de combustion turbulente, le choix s'est porté sur le modèle de flamme épaissie. Dans le cas diphasique, ce modèle requiert une division des termes sources diphasiques par le facteur d'épaississement pour rendre les vitesses de propagation du front de flamme diphasique indépendantes du facteur d'épaississement. Cette correction de consistance du modèle de flamme épaissie a été implémentée dans le code CEDRE et validée. Des simulations d'allumage de la chambre MERCATO ont ensuite été effectuées. Ces simulations ont conduit à des allumages réussis ou ratés. La dynamique de propagation de la flamme dans la chambre pour un allumage réussi a fait l'objet d'une analyse afin de déterminer ses principaux mécanismes.

Première partie

Équations et modèles pour un écoulement turbulent diphasique réactif

Chapitre 1

Équations et modèles pour la simulation numérique de combustion diphasique

Ce chapitre décrit les modèles utilisés dans le cadre des simulations numériques de l'allumage d'un mélange diphasique air/carburant dans une chambre de combustion simplifiée effectuée dans le cadre de cette thèse. Dans un premier temps, les équations de conservation pour la phase gazeuse sont détaillées. Ensuite, des phénomènes liés à la turbulence et à la combustion ainsi que des outils pour les modéliser sont exposés. La modélisation de la phase dispersée est abordée par la suite. Ces descriptions permettent d'évoquer les phénomènes en jeu dans la combustion diphasique. Finalement, une présentation rapide des méthodes numériques utilisées dans le solveur CEDRE est effectuée.

Sommaire

1.1	Équations de conservation pour la phase gazeuse.	8
1.1.1	<i>Conservation de l'espèce k</i>	8
1.1.2	<i>Flux de diffusion de l'espèce k</i>	9
1.1.3	<i>Conservation de la quantité de mouvement</i>	11
1.1.4	<i>Grandeurs thermodynamiques</i>	11
1.1.5	<i>Conservation de l'énergie</i>	12
1.1.6	<i>Flux de diffusion de chaleur</i>	13
1.1.7	<i>Taux de réaction chimique.</i>	14
1.1.8	<i>Loi d'état</i>	15
1.1.9	<i>Description des propriétés de transport</i>	15
1.2	Description et modélisation de la turbulence.	16
1.2.1	<i>Phénoménologie de la turbulence</i>	16
1.2.2	<i>Simulation numérique de la turbulence</i>	17
1.3	Description et modélisation de la combustion	22
1.3.1	<i>Flamme de diffusion et flamme de pré-mélange</i>	22
1.3.2	<i>Modélisation de la combustion turbulente</i>	24

1.3.3	<i>Modélisation de la chimie</i>	27
1.4	Description et modélisation de la phase dispersée	29
1.4.1	<i>Fonction de densité de probabilité du spray</i>	29
1.4.2	<i>Forces agissant sur une particule</i>	31
1.4.3	<i>Échange de masse et d'énergie d'une particule isolée avec son environnement.</i>	32
1.4.4	<i>Échange entre le gaz et la phase dispersée.</i>	37
1.4.5	<i>Interactions avec la turbulence</i>	38
1.4.6	<i>Diamètres caractéristiques d'un spray</i>	38
1.5	Description et modélisation de la combustion diphasique	39
1.5.1	<i>Combustion diphasique laminaire</i>	39
1.5.2	<i>Combustion diphasique turbulente</i>	43
1.6	Présentation du code CEDRE	48
1.6.1	<i>Le solveur CHARME</i>	48
1.6.2	<i>Le solveur SPARTE</i>	52

1.1 Équations de conservation pour la phase gazeuse

La simulation numérique de la combustion requiert la résolution des équations de Navier-Stokes pour un écoulement compressible. Ces équations décrivent la conservation de la masse, de la quantité de mouvement et de l'énergie d'un fluide. Nous verrons que ces équations font apparaître plus d'inconnues que d'équations et qu'elles nécessitent donc des relations de fermeture supplémentaires. De plus, la résolution de ces équations est considérée en présence d'une phase particulaire dispersée et de réactions chimiques, ce qui induira la présence de termes sources supplémentaires. Pour plus de détails concernant la dérivation de ces équations, on renvoie le lecteur aux livres de Kuo [67], de Poinot et Veynante [107], et de Williams [140].

Dans la suite, un indice répété implique une somme sur cet indice suivant la convention de sommation d'Einstein.

1.1.1 Conservation de l'espèce k

L'équation de conservation de la masse pour un mélange réactif est la même que pour un mélange non réactif car les réactions chimiques ne créent pas de masse. Par contre, en écoulement diphasique, un terme source de masse provenant de la phase dispersée doit être ajouté.

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial \rho u_i}{\partial x_i} = s_m^{p-f} \quad (1.1)$$

avec :

- ρ la masse volumique
- u_i la composantes du vecteur vitesse suivant l'axe i .
- s_m^{p-f} le terme source de masse provenant de la phase dispersée détaillé dans la section 1.4

L'équation de conservation de l'espèce k peut être écrite sous la forme suivante :

$$\frac{\partial \rho Y_k}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_i} (\rho Y_k u_i) = - \frac{\partial}{\partial x_i} (\rho Y_k V_{k,i}) + \dot{\omega}_k + s_{m,k}^{p-f} \quad (1.2)$$

avec :

- Y_k la fraction massique de l'espèce k définie par $Y_k = m_k/m$ où m_k est la masse de l'espèce k et m est la masse totale
- $V_{k,i}$ est la composante selon i de la vitesse de diffusion de l'espèce k
- $\rho Y_k V_{k,i}$ le flux de diffusion de l'espèce k dans l'axe i qui peut être notée $J_{i,k}$
- $\dot{\omega}_k$ le taux de réaction chimique de l'espèce k .
- $s_{m,k}^{p-f}$ le terme source provenant de la phase dispersée pour l'espèce k . Ce terme tient compte des phénomènes d'évaporation et de condensation. Plus de détails sont fournis dans la section 1.4.

L'équation de conservation de la masse peut être obtenue en sommant les équations de conservation des espèces. Par définition, les relations suivantes sont vérifiées :

$$\sum_{k=1}^N Y_k V_{k,i} = 0 \quad (1.3)$$

$$\sum_{k=1}^N \dot{\omega}_k = 0 \quad (1.4)$$

$$\sum_{k=1}^N s_{m,k}^{p-f} = s_m^{p-f} \quad (1.5)$$

En pratique, il n'est pas nécessaire de la résoudre si les équations de conservation de toutes les espèces sont utilisées.

1.1.2 Flux de diffusion de l'espèce k

La vitesse de diffusion $V_{k,i}$ peut être évaluée en résolvant le système suivant obtenu par la théorie cinétique des gaz [140]

$$\frac{\partial X_p}{\partial x_i} = \sum_{k=1}^N \frac{X_p X_k}{D_{pk,i}} (V_{k,i} - V_{p,i}) + (Y_p - X_p) \frac{1}{p} \frac{\partial p}{\partial x_i} + \frac{\rho}{p} \sum_{k=1}^N Y_p Y_k (f_{p,i} - f_{k,i}) + \sum_{k=1}^N \left[\frac{X_p X_k}{\rho D_{pk}} \left(\frac{D_{T,k,i}}{Y_k} - \frac{D_{T,p,i}}{Y_p} \right) \right] \frac{1}{T} \frac{\partial T}{\partial x_i} \quad (1.6)$$

avec :

- X_p la fraction molaire de l'espèce p définie par

$$X_p = n_p/n = W Y_p / W_p \quad (1.7)$$

avec n_p le nombre de mole de l'espèce p , n le nombre de mole total, W_p la masse molaire de l'espèce p et W la masse molaire du mélange :

$$\frac{1}{W} = \sum_{k=1}^N \frac{Y_k}{W_k} \quad (1.8)$$

- D_{pk} le coefficient binaire de diffusion massique de l'espèce p dans l'espèce k
- \mathbf{f}_p les forces extérieures exercées sur l'espèce p
- $D_{T,p}$ le coefficient de diffusion thermique de l'espèce p dans le mélange

Il est possible de voir que les gradients de concentration peuvent être dus à :

- des différences de vitesse de diffusion
- un gradient de pression si les fractions massiques d'espèces sont différentes des fractions molaires d'espèces
- des différences de forces extérieures exercées sur les espèces. Par exemple une espèce chargée dans un plasma va être influencée par le champ électrique mais pas une espèce neutre.
- un gradient de température avec des différences dans la diffusion thermique des espèces. Cet effet est appelé effet Soret.

Dans le cadre de cette thèse, les effets de diffusion liée aux gradients de pression, forces extérieures et gradients de température seront négligés. Plusieurs études réalisées par Dakhli et al. [33] et Ern et Giovangigli [40] ont évalué l'impact de l'effet Soret sur différentes flammes et montré un écart négligeable pour des flammes d'hydrocarbures dans l'air. L'équation 1.6 se réduit donc à :

$$\frac{\partial X_p}{\partial x_i} = \sum_{k=1}^N \frac{X_p X_k}{D_{pk,i}} (V_{k,i} - V_{p,i}) \quad (1.9)$$

En pratique, la résolution de ce système est trop coûteuse et la vitesse de diffusion $V_{k,i}$ peut être évaluée par l'approximation d'Hirschfelder et Curtiss [63] :

$$Y_k V_{k,i} = -D_k \frac{W_k}{W} \frac{\partial X_k}{\partial x_i} \quad (1.10)$$

avec D_k le coefficient de diffusivité moléculaire de l'espèce k dans le mélange

Cette expression ne permet pas d'assurer la conservation globale de la masse 1.1 pour un mélange de plus de deux espèces. Il est donc nécessaire d'ajouter une vitesse de correction V_i^c à l'équation de conservation des espèces :

$$V_i^c = \sum_{k=1}^N D_k \frac{W_k}{W} \frac{\partial X_k}{\partial x_i} \quad (1.11)$$

Le flux de diffusion $J_{i,k}$ de l'espèce k devient alors :

$$J_{i,k} = -\rho \left(D_k \frac{W_k}{W} \frac{\partial X_k}{\partial x_i} - Y_k V_i^c \right) \quad (1.12)$$

1.1.3 Conservation de la quantité de mouvement

L'équation de conservation de la composante j du vecteur quantité de mouvement ρu_j s'écrit :

$$\frac{\partial \rho u_j}{\partial t} + \frac{\partial \rho u_i u_j}{\partial x_i} = -\frac{\partial p}{\partial x_j} + \frac{\partial \tau_{ij}}{\partial x_i} + f_j + s_{v,j}^{p-f} \quad (1.13)$$

avec :

- τ_{ij} le tenseur des contraintes visqueuses, qui peut être exprimé comme suit pour des fluides newtoniens :

$$\tau_{ij} = 2\mu s_{ij} - \frac{2}{3}\mu s_{ii}\delta_{ij} \quad (1.14)$$

où μ est la viscosité dynamique du fluide, δ_{ij} est le symbole de Kronecker et s_{ij} correspond à la partie symétrique du tenseur de gradient de vitesse

$$s_{ij} = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right) \quad (1.15)$$

- f_j la composante des forces volumiques s'exerçant suivant la direction j
- $s_{v,j}^{p-f}$ le terme source de quantité de mouvement provenant de la phase dispersée

Le tenseur des contraintes visqueuses est souvent regroupé avec les forces de pression au sein du tenseur σ_{ij} :

$$\sigma_{ij} = \tau_{ij} - p\delta_{ij} \quad (1.16)$$

1.1.4 Grandeurs thermodynamiques

Cette partie présente comment sont calculées les grandeurs thermodynamiques nécessaires au calcul de l'énergie du mélange.

Dans un système où se produisent des réactions chimiques, il peut être utile d'introduire la notion d'énergie sensible massique de l'espèce k notée $e_{s,k}$. Cette grandeur représente l'énergie interne du système sans la contribution des réactions chimiques. La même distinction peut être effectuée entre l'enthalpie massique h_k et l'enthalpie massique sensible $h_{s,k}$.

$$h_k = h_{s,k} + \Delta h_{f,k}^0 \quad (1.17)$$

avec

- $h_{s,k}$ l'enthalpie sensible qui peut être calculée à partir de la capacité thermique massique à pression constante $c_{p,k}$:

$$h_{s,k} = \int_{T_0}^T c_{p,k} dT \quad (1.18)$$

avec T_0 une température de référence choisie usuellement à 298.5 K.

- $\Delta h_{f,k}^0$ l'enthalpie standard massique de formation de l'espèce k

La capacité thermique massique isobare peut être définie à partir de l'entropie massique de l'espèce k notée s_k :

$$c_{p,k} = T \left(\frac{\partial s_k}{\partial T} \right)_p \quad (1.19)$$

avec T la température du fluide. En pratique, la capacité thermique massique isobare $c_{p,k}$ est tabulée en fonction de la température ou calculée via une représentation polynômiale :

$$c_{p,k} = \sum_i a_{i,k} \left(\frac{T}{\theta} \right)^i \quad (1.20)$$

avec $a_{i,k}$ les coefficients du polynôme et θ une température servant d'échelle, souvent choisie à 1000 K.

A partir de la capacité thermique massique à pression constante, il est possible d'obtenir l'enthalpie massique, l'entropie massique et la capacité thermique à volume constant de l'espèce k notées respectivement h_k , s_k et $c_{v,k}$:

$$h_k = \int_{T_0}^T c_{p,k} dT \quad (1.21)$$

$$s_k = \int_{T_0}^T \frac{c_{p,k}}{T} dT \quad (1.22)$$

$$c_{v,k} = c_{p,k} - T \left(\frac{\partial p}{\partial T} \right)_V \left(\frac{\partial V}{\partial T} \right)_p \quad (1.23)$$

avec p la pression et V le volume. La relation reliant $c_{v,k}$ et $c_{p,k}$ est appelée relation de Mayer. Dans le cas d'un gaz parfait, cette relation se simplifie en :

$$c_{v,k} = c_{p,k} - \frac{R}{W_k} \quad (1.24)$$

avec R la constante des gaz parfait.

Ces grandeurs sont utilisées dans l'équation de conservation de l'énergie

1.1.5 Conservation de l'énergie

On choisit d'exprimer l'équation de conservation de l'énergie en fonction de l'énergie totale non chimique E :

$$E = e_t - \sum_{k=1}^N \Delta h_{f,k}^0 Y_k \quad (1.25)$$

avec :

- e_t l'énergie totale qui correspond à l'addition de l'énergie interne non chimique, de l'énergie chimique et de l'énergie cinétique

$$e_t = \sum_{k=1}^N \int_{T_0}^T Y_k c_{v,k} dT - \frac{RT_0}{W} + \sum_{k=1}^N \Delta h_{f,k}^0 Y_k + \frac{1}{2} u_i u_i \quad (1.26)$$

Le terme $\frac{RT_0}{W}$ est présent dans la définition de l'énergie interne non chimique pour obtenir la relation suivante entre l'enthalpie non chimique h_s et l'énergie interne non chimique e_s :

$$h_s = e_s + \frac{p}{\rho} \quad (1.27)$$

L'équation de conservation de l'énergie totale non chimique E est :

$$\frac{\partial \rho E}{\partial t} + \frac{\partial \rho u_i E}{\partial x_i} = \frac{\partial}{\partial x_i} (-p u_i + u_i \tau_{ij} - q_i) + \dot{\omega}_T + \dot{Q} + \rho \sum_{k=1}^N Y_k f_{k,i} (u_i + V_{k,i}) + s_e^{p-f} \quad (1.28)$$

- $\frac{\partial}{\partial x_i} (-p u_i + u_i \tau_{ij})$ est le terme lié à la puissance des forces de pression et des forces visqueuses issues de l'équation de quantité de mouvement 1.13
- $\frac{\partial q_i}{\partial x_i}$ est le terme lié au flux de diffusion de la chaleur
- le taux de dégagement de chaleur $\dot{\omega}_T$ s'écrit :

$$\dot{\omega}_T = - \sum_{k=1}^N \Delta h_{f,k}^0 \dot{\omega}_k \quad (1.29)$$

- \dot{Q} est le terme source de chaleur externe (lié par exemple à une bougie électrique)
- $\rho \sum_{k=1}^N Y_k f_{k,i} (u_i + V_{k,i})$ est la puissance produite par des forces volumiques externes $f_{k,i}$
- s_e^{p-f} est le terme source provenant de la phase dispersée

1.1.6 Flux de diffusion de chaleur

Le flux de diffusion de chaleur q_i peut être exprimé sous la forme suivante [140] :

$$q_i = -\lambda \frac{\partial T}{\partial x_i} + \sum_{k=1}^N J_{i,k} h_k + RT \sum_{k=1}^N \sum_{l=1}^N \left(\frac{X_l D_{T,k}}{W_k D_{kl}} \right) (V_{k,i} - V_{l,i}) + q_R \quad (1.30)$$

- Le premier terme correspond à la conduction de la chaleur exprimée par une loi de Fourier où λ est la conductivité thermique du fluide.
- Le second terme correspond à la diffusion de chaleur liée à la diffusion d'espèces. $J_{i,k}$ est le flux de diffusion d'espèce défini dans la section 1.1.2. h_k correspond à l'enthalpie massique de l'espèce k .
- Le troisième terme correspond à l'effet Dufour qui tient compte du flux de chaleur lié au gradient d'espèce. En pratique, ce terme peut être négligé dans la plupart des applications, dont celle-ci.
- Le quatrième terme correspond au flux radiatif. Ce terme peut être important pour certaines applications, par exemple si beaucoup de suies sont présentes.

Dans cette thèse, l'effet Dufour est négligé. En effet, la contribution de l'effet Dufour est généralement négligeable selon García-Ibarra et al. [52]. Les flux radiatifs sont également négligés dans cette thèse. On obtient finalement :

$$q_i = -\lambda \frac{\partial T}{\partial x_i} + \sum_k J_{i,k} h_k \quad (1.31)$$

1.1.7 Taux de réaction chimique

Pour expliciter le taux de réaction chimique $\dot{\omega}_k$ relatif à l'espèce k , on considère le cas général de N espèces réagissant via R réactions.

$$\sum_{k=1}^N \nu'_{kj} M_k \rightleftharpoons \sum_{k=1}^N \nu''_{kj} M_k \quad \text{pour } j = 1, R \quad (1.32)$$

avec :

- M_k le symbole chimique de l'espèce k
- ν'_{kj} et ν''_{kj} les coefficients stoechiométriques molaires de l'espèce k dans la réaction j

L'équation suivante doit être vérifiée pour assurer la conservation de la masse de l'espèce k :

$$\sum_{k=1}^N (\nu''_{kj} - \nu'_{kj}) W_k = \sum_{k=1}^N \nu_{kj} W_k = 0 \quad (1.33)$$

avec W_k la masse molaire de l'espèce k .

Chaque réaction j contribue au taux de réaction $\dot{\omega}_k$ de l'espèce k suivant l'équation suivante :

$$\dot{\omega}_k = W_k \sum_{j=1}^R \nu_{kj} Q_j \quad \text{pour } k = 1, N \quad (1.34)$$

où Q_j est le taux d'avancement de la réaction j . Le taux d'avancement Q_j peut être exprimé par :

$$Q_j = K_{fj} \prod_{k=1}^N [X_k]^{\nu'_{kj}} - K_{rj} \prod_{k=1}^N [X_k]^{\nu''_{kj}} \quad (1.35)$$

$[X_k]$ est la concentration molaire de l'espèce k définie par :

$$[X_k] = \frac{\rho Y_k}{W_k} = \frac{\rho X_k}{W} \quad (1.36)$$

ν'_{kj} et ν''_{kj} sont les ordres direct et inverse de la réaction j pour l'espèce k .

K_{fj} et K_{rj} sont les constantes directe et inverse pour la réaction j :

$$K_{rj} = \frac{K_{fj}}{K_{eq}^j} \quad (1.37)$$

avec la constante d'équilibre K_{eq}^j définie par :

$$K_{eq}^j = \left(\frac{p_0}{RT} \right)^{\sum_{k=1}^N \nu_{kj}} \exp \left(-\frac{\Delta G_j^0}{RT} \right) \quad (1.38)$$

avec

- p_0 la pression de référence
- ΔG_j^0 la variation d'enthalpie libre de réaction ou enthalpie de Gibbs

$$\Delta G_j^0 = \Delta H_j^0 - T\Delta S_j^0 \quad (1.39)$$

avec :

- ΔH_j^0 est la variation d'enthalpie pour la réaction j

$$\Delta H_j^0 = h(T) - h(0) = \sum_{k=1}^N \nu_{kj} W_k (h_{s,k}(T) + \Delta h_{f,k}^0) \quad (1.40)$$

- ΔS_j^0 la variation d'entropie

$$\Delta S_j^0 = s(T) - s(0) = \sum_{k=1}^N \nu_{kj} W_k s_k(T) \quad (1.41)$$

Généralement, les coefficients $K_{f,j}$ peuvent être exprimés via une loi d'Arrhenius :

$$K_{f,j} = A_{f,j} \exp\left(-\frac{E_j}{RT}\right) \quad (1.42)$$

où :

- $A_{f,j}$ est la constante préexponentielle
- E_j est l'énergie d'activation

1.1.8 Loi d'état

En plus des équations précédentes, une loi d'état est nécessaire pour évaluer la pression. La pression et la température restent suffisamment modérées dans les simulations effectuées dans cette thèse pour justifier l'utilisation d'une loi de gaz parfaits. Classiquement, l'équation d'état d'un gaz parfait est :

$$p = \sum_{k=1}^N p_k = \sum_{k=1}^N \rho_k RT / W_k = \rho RT / W \quad (1.43)$$

où T est la température du mélange et $R = 8.314 \text{ J mol}^{-1} \text{ K}^{-1}$ est la constante des gaz parfaits.

1.1.9 Description des propriétés de transport

La viscosité dynamique μ du mélange est fonction de la viscosité dynamique μ_k des espèces prises séparément. Dans cette thèse, une moyenne arithmétique est employée pour calculer la viscosité dynamique du mélange :

$$\mu = \sum_k Y_k \mu_k \quad (1.44)$$

La viscosité d'espèce est évaluée via une loi de Sutherland :

$$\mu_k = \mu_{0,k} \left(1 + \frac{T_{1,k}}{T_{0,k}} \right) \frac{T}{T_{1,k} + T} \sqrt{\frac{T}{T_{0,k}}} \quad (1.45)$$

où $\mu_{0,k}$, $T_{1,k}$ et $T_{0,k}$ sont des constantes fonction de l'espèce k .

La conductivité thermique λ du mélange est fonction de la conductivité thermique λ_k des espèces prises séparément. Elle est obtenue via une moyenne pondérée par la viscosité dynamique :

$$\lambda = \mu \sum_k Y_k \frac{\lambda_k}{\mu_k} \quad (1.46)$$

La conductivité thermique d'espèce est calculée à partir du nombre de Prandtl de l'espèce Pr_k :

$$\lambda_k = \frac{\mu_k c_{p,k}}{Pr_k} \quad (1.47)$$

Dans la partie suivante, une brève description de la turbulence et de sa modélisation est effectuée.

1.2 Description et modélisation de la turbulence

1.2.1 Phénoménologie de la turbulence

Un écoulement fluide peut être laminaire ou turbulent. En régime laminaire, les lignes de courant ne s'intersectent pas alors que ce n'est plus le cas en régime turbulent. Un écoulement turbulent va présenter des fluctuations spatiales et temporelles aléatoires de sa vitesse locale. Pour connaître le régime d'un écoulement on utilise le nombre de Reynolds défini par :

$$Re = \frac{uL}{\nu} \quad (1.48)$$

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

$$\nu = \frac{\mu}{\rho} \quad (1.49)$$

Le nombre de Reynolds compare les effets visqueux avec les effets inertiels. Plus le nombre de Reynolds est important, plus les effets inertiels seront prédominants et plus la transition vers un écoulement turbulent sera favorisée. La transition du régime laminaire au régime turbulent est également favorisée par la présence de perturbations, par exemple des rugosités à la paroi.

La turbulence est un phénomène multi-échelle. Les structures tourbillonnaires peuvent être réparties dans plusieurs échelles distinctes selon la théorie de Kolmogorov et Obukhov [66, 99]. Les plus grandes structures turbulentes d'un écoulement sont peu influencées par les effets visqueux. La taille caractéristique de ces tourbillons est donnée par l'échelle intégrale l_t . Ces structures sont responsables de la création de l'énergie cinétique turbulente. Ces grands tourbillons sont instables et se disloquent en tourbillons plus petits qui vont eux-même se disloquer en tourbillons encore plus petits. Ce phénomène permet un transfert de l'énergie cinétique turbulente vers les plus petites échelles

de l'écoulement. Lorsque les tourbillons atteignent une taille suffisamment petite pour que les effets visqueux deviennent prépondérants, ils se stabilisent. La viscosité va progressivement dissiper en chaleur l'énergie cinétique de ces tourbillons. La taille caractéristique associée à cette petite échelle est nommée échelle de Kolmogorov et notée η_k . À cette échelle, le nombre de Reynolds vaut environ 1 : $Re_{\eta_k} \approx 1$

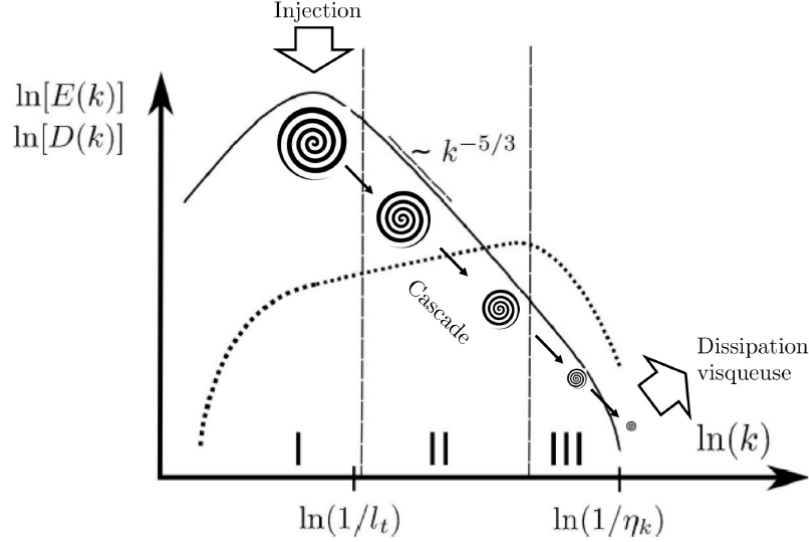


Figure 1.1 : Schéma du spectre d'énergie cinétique turbulente $E(k)$ en ligne continue et de dissipation $D(k)$ en pointillés en fonction du nombre d'onde k pour une turbulence homogène isotrope (THI) [103]

Le nombre d'onde k correspond à l'inverse de la taille caractéristique du tourbillon. Lorsque la turbulence est isotrope et stationnaire, une zone de pente $k \approx -5/3$ est observée sur la figure 1.1 représentant l'évolution de l'énergie cinétique turbulente en fonction du nombre d'onde. Cette zone située entre l'échelle intégrale et l'échelle de Kolmogorov est nommée zone inertielle.

1.2.2 Simulation numérique de la turbulence

Pour simuler un écoulement turbulent, plusieurs techniques sont envisageables. Il est possible de simuler toutes les échelles de l'écoulement jusqu'à l'échelle de Kolmogorov. Cette approche est appelée Simulation Numérique Directe ou Direct Numerical Simulation (DNS) en anglais. Une analyse dimensionnelle montre que le nombre de points requis pour une DNS d'un domaine cubique de longueur $L = 8l_t$ est fonction du nombre de Reynolds turbulent Re_t [108] :

$$N^3 = \frac{L^3}{\eta_k} \propto Re_t^{9/4} \quad (1.50)$$

$$Re_t = \frac{\sqrt{2k}l_t}{\nu} \quad (1.51)$$

où k est l'énergie cinétique turbulente.

Cette analyse dimensionnelle montre que la simulation numérique directe d'un problème industriel est très coûteuse. Compte tenu de l'augmentation importante des ressources de calcul disponibles via les architectures massivement parallèles, des DNS de chambre de combustion peuvent être envisagées essentiellement à des fins de démonstration et de validation des modèles, leur coût de calcul demeurant prohibitif pour des calculs de production. Il est possible de citer la simulation hautement résolue d'une chambre de combustion réalisée par Moureau et al. [93]. Une autre limite de ces simulations est que la quantité très importante de données générée rend leur post-traitement complexe [24].

1.2.2.a) Approche RANS

Pour pouvoir simuler des écoulement turbulents dans une configuration industrielle, il est possible d'utiliser la moyenne statistique de l'écoulement. Cette approche est appelée Reynolds-Average Navier Stokes ou RANS. Dans cette approche, chaque quantité Q peut être décomposé selon la décomposition de Reynolds en une partie moyennée $\langle Q \rangle$ et une partie fluctuante Q' [108].

$$Q = \langle Q \rangle + Q' \quad (1.52)$$

avec

$$\langle Q' \rangle = 0 \quad (1.53)$$

Dans cette approche, seule la partie moyennée $\langle Q \rangle$ est simulée. La partie fluctuante Q' contenant la turbulence est modélisée. Le problème de cette méthode est la difficulté de la modélisation nécessaire pour reproduire un écoulement turbulent avec une bonne précision.

Pour des écoulements compressibles, une moyenne de Favre peut être utilisée pour simplifier les équations :

$$\hat{Q} = \frac{\overline{\rho Q}}{\bar{\rho}} \quad (1.54)$$

Il est important de noter que la moyenne de Favre est un formalisme mathématique permettant de ne pas résoudre les corrélations entre les fluctuations de masse volumique et les fluctuations de la grandeur Q . Mais la moyenne de Favre n'est pas rigoureusement égale à la moyenne de Reynolds [137]. Un terme de corrélation entre les fluctuations est présent.

$$\bar{\rho} \hat{Q} = \bar{\rho} \overline{Q} + \overline{\rho' Q'} \quad (1.55)$$

1.2.2.b) Approche LES

Une approche intermédiaire entre DNS et RANS est utilisée pour simuler des problèmes industriels où la turbulence joue un rôle important : la Simulation des Grandes Echelles ou LES (Large Eddy Simulation). Dans cette approche, seules les plus grandes échelles sont résolues. Les petites échelles sont appelées échelles de sous-maille et leur influence est modélisée. Cette méthode permet de simuler les échelles les plus énergétiques de la turbulence pour un coût de calcul moins important que la DNS.

Dans une LES, un filtre F est appliqué aux différentes grandeurs Q [107] :

$$\bar{Q}(x) = \int Q(x^*) F(x - x^*) dx^* \quad (1.56)$$

où F est un opérateur de filtrage. Ici, \bar{Q} est une grandeur fluctuante filtrée et non une grandeur moyennée. La partie non résolue aussi appelée grandeur de sous-maille, notée Q^{sgs} pour *subgrid scale*, est obtenue par

$$Q^{sgs} = Q - \bar{Q} \quad (1.57)$$

L'opération de filtrage utilisé dans une LES ne possède pas les mêmes propriétés que l'opérateur de moyenne dans une simulation RANS. Les filtres LES ne sont généralement pas idempotents :

$$\overline{\bar{Q}} \neq \bar{Q} \quad (1.58)$$

$$\overline{Q^{sgs}} \neq 0 \quad (1.59)$$

Souvent, dans des écoulements réactifs, on préfère utiliser le filtrage de Favre qui inclut les variations de masse volumiques [107] :

$$\bar{\rho}\tilde{Q}(x) = \int \rho Q(x^*) F(x - x^*) dx^* \quad (1.60)$$

Les équations filtrées avec un filtrage de Favre sont alors :

$$\frac{\partial \bar{\rho}}{\partial t} + \frac{\partial \bar{\rho}\tilde{u}_j}{\partial x_j} = 0 \quad (1.61)$$

$$\frac{\partial \bar{\rho}\tilde{u}_i}{\partial t} + \frac{\partial \bar{\rho}\tilde{u}_i\tilde{u}_j}{\partial x_j} = -\frac{\partial \bar{p}}{\partial x_i} + \frac{\partial}{\partial x_j} [\bar{\tau}_{ij} + \bar{\tau}_{ij}^{sgs}] + \bar{F}_i + \overline{s_{v,i}^{p-f}} \quad (1.62)$$

$$\frac{\partial \bar{\rho}\tilde{Y}_k}{\partial t} + \frac{\partial \bar{\rho}\tilde{u}_j\tilde{Y}_k}{\partial x_j} = -\frac{\partial}{\partial x_i} [\bar{J}_{j,k} + \bar{J}_{j,k}^{sgs}] + \bar{\omega}_k + \overline{s_{m,k}^{p-f}} \quad (1.63)$$

$$\frac{\partial \bar{\rho}\tilde{E}}{\partial t} + \frac{\partial \bar{\rho}\tilde{E}\tilde{u}_j}{\partial x_j} = -\frac{\partial}{\partial x_j} [\bar{p}u_j - \bar{\tau}_{ij}u_i + \bar{q}_j + \bar{q}_j^{sgs}] + \bar{\omega}_T + \bar{Q} + \rho \sum_k Y_k \overline{f_{j,k}(u_j + V_{k,j})} + \overline{s_e^{p-f}} \quad (1.64)$$

Les équations sont résolues pour la vitesse filtrée. Des termes faisant intervenir l'action des échelles non résolues doivent être modélisés.

Par ailleurs, des simplifications peuvent être effectuées sur certains termes en négligeant les termes de corrélation qui apparaissent dans un développement formel. Ces approximations reviennent à considérer la viscosité μ constante à l'échelle du filtre. Ainsi, le tenseur de contraintes visqueuses peut être simplifié :

$$\overline{\tau_{ij}} = 2\mu s_{ij} - \frac{2}{3}\mu s_{ll}\delta_{ij} \quad (1.65)$$

$$\overline{\tau_{ij}} \approx 2\bar{\mu}\tilde{s}_{ij} - \frac{2}{3}\bar{\mu}\tilde{s}_{ll}\delta_{ij} \quad (1.66)$$

De même, le coefficient de diffusion de l'espèce k D_k peut être considéré constant à l'échelle du filtre. Le flux de diffusion des espèces peut être alors simplifié :

$$\overline{J_{i,j}} = -\rho \left(D_k \frac{W_k}{W} \frac{\partial X_k}{\partial x_i} - Y_k V_{k,i}^c \right) \quad (1.67)$$

$$\overline{J_{i,j}} \approx -\bar{\rho} \left(\bar{D}_k \frac{W_k}{W} \frac{\partial \tilde{X}_k}{\partial x_i} - \tilde{Y}_k \tilde{V}_{k,i}^c \right) \quad (1.68)$$

La conductivité thermique λ peut elle aussi être supposée constante à l'échelle du filtre. Le flux de chaleur peut alors être simplifié en :

$$\overline{q_i} = -\lambda \overline{\frac{\partial T}{\partial x_i}} + \sum_k J_{i,k} h_{s,k} \quad (1.69)$$

$$\overline{q_i} \approx -\bar{\lambda} \frac{\partial \widetilde{T}}{\partial x_i} + \sum_k \overline{J_{i,k} h_{s,k}} \quad (1.70)$$

Une partie des échelles de l'écoulement est filtrée dans l'approche LES. Il convient de modéliser les effets de ces échelles sur l'écoulement. Les deux effets fondamentaux doivent être pris en compte : dissipation d'énergie cinétique et augmentation des phénomènes de diffusion dus au mélange turbulent. L'avantage de la LES comparée au RANS est que les plus petites échelles ont un caractère isotrope potentiellement plus facilement modélisable.

Les termes non-résolus du tenseur de contraintes visqueuses ressemblent beaucoup au termes du tenseur de Reynolds dans les équations RANS. Pour les fermer, des modèles pour la turbulence de sous-maille doivent être employés comme le modèle de Smagorinsky ou le modèle Wale. Ces modèles reposent sur l'utilisation d'une viscosité turbulente μ_t représentant la dissipation de sous-maille liée à la turbulence.

$$\overline{\tau_{ij}^{sgs}} = -\bar{\rho}(\widetilde{u_i u_j} - \widetilde{u_i} \widetilde{u_j}) = 2\overline{\mu_t s_{ij}} - \frac{2}{3}\overline{\mu_t s_{ll}} \delta_{ij} \quad (1.71)$$

Dans le cadre du modèle de Smagorinsky [127], la viscosité turbulente est exprimée selon l'équation suivante :

$$\mu_t = (C_S \overline{\Delta})^2 \sqrt{2\overline{s_{ij} s_{ij}}} \quad (1.72)$$

où C_S est une constante de valeur comprise entre 0.1 et 0.18. Les termes de diffusion d'espèce et de diffusion de chaleur sont modélisés en introduisant un nombre de Schmidt et un nombre de Prandtl turbulent.

$$\overline{J_{i,k}^{sgs}} = \bar{\rho}(\widetilde{u_i Y_k} - \widetilde{u_i} \widetilde{Y_k}) = -\bar{\rho} \left(D_k^t \frac{W_k}{W} \frac{\partial \widetilde{X_k}}{\partial x_i} - \widetilde{Y_k} V_i^{c,t} \right) \quad (1.73)$$

$$D_k^t = \frac{\nu_t}{Sc_t} \quad (1.74)$$

$$\widetilde{V_i^{c,t}} = \sum_{k=1}^N D_k^t \frac{W_k}{W} \frac{\partial \widetilde{X_k}}{\partial x_i} \quad (1.75)$$

$$\overline{q_i^{sgs}} = \bar{\rho}(\widetilde{u_i E} - \widetilde{u_i} \widetilde{E}) = -\lambda_t \frac{\partial \widetilde{T}}{\partial x_i} + \sum_k \overline{J_{i,k}^{sgs} h_{s,k}} \quad (1.76)$$

$$\lambda_t = \frac{\nu_t \bar{c}_p}{Pr_t} \quad (1.77)$$

1.2.2.c) Lois de paroi

Proche des parois, les échelles de la turbulence sont très petites. Ainsi, pour résoudre correctement la couche limite turbulente, des mailles de très petite taille proche des parois sont nécessaires. Ces contraintes imposent un coût calcul proche de la DNS pour réaliser une LES avec des parois résolues.

Afin de limiter le coût de calcul, il est possible d'utiliser des lois de paroi. Pour plus de précisions sur le sujet, il est possible de se référer à Chassaing [23], Cousteix [30] et Pope [108].

Dans le cadre d'un écoulement de couche limite, l'écoulement est supposé proche de l'écoulement dans un canal plan turbulent :

- Les grandeurs (vitesse, pression, température ...) ne dépendent pas de la direction transversale.
- Les gradients axiaux sont petits par rapport aux gradients normaux à la paroi :

$$\frac{\partial}{\partial x} \ll \frac{\partial}{\partial y} \quad (1.78)$$

- Le gradient de pression axial est supposé négligeable.
- La courbure de la surface est supposée négligeable.

Ces approximations peuvent conduire à une mauvaise estimation des pertes de charge dans un écoulement présentant des gradients de pression et des effets de courbure, comme par exemple l'écoulement dans un tourbillonneur en entrée de chambre de combustion.

Des grandeurs de paroi adimensionnelles sont utilisées. La vitesse de paroi est définie comme :

$$u^+ = \frac{u}{u_\tau} \quad (1.79)$$

où

$$u_\tau = \sqrt{\frac{\tau_w}{\rho_w}} \quad (1.80)$$

avec

- τ_w les contraintes en paroi
- ρ_w la masse volumique du gaz à la paroi

La longueur de paroi est définie comme :

$$y^+ = \frac{yu_\tau}{\nu_w} \quad (1.81)$$

avec

- y la distance à la paroi
- ν_w la viscosité à la paroi

Plusieurs zones peuvent être distinguées dans la région interne d'une couche limite :

- La sous-couche visqueuse correspond à la zone $y^+ < 5$. L'action de la viscosité prédomine dans cette zone et le profil de vitesse suit une loi linéaire.

$$u^+ = y^+ \quad (1.82)$$

- La zone tampon correspond à la zone $5 < y^+ < 40$. Il s'agit d'une zone intermédiaire entre la sous-couche visqueuse et la zone logarithmique.
- La zone logarithmique ou zone inertielle correspond à $40 < y^+$ et $y/\delta < 0.2$ où δ correspond à l'épaisseur de la couche limite. Dans cette zone, le profil de vitesse suit une loi logarithmique :

$$u^+ = \frac{1}{\kappa} \ln y^+ + C \quad (1.83)$$

avec

- $\kappa = 0.41$ la constante de Von Karman.
- C une constante comprise entre 5.2 et 5.5.

La modélisation du taux de réaction chimique filtrée $\overline{\omega_k}$ est l'un des aspects les plus importants des modèles de combustion turbulentes. Dans la partie suivante, une description de la combustion et de la manière de la modéliser sera effectuée.

1.3 Description et modélisation de la combustion

1.3.1 Flamme de diffusion et flamme de pré-mélange

Une distinction fondamentale en combustion peut être effectuée entre les flammes de pré-mélange et les flammes de diffusion.

1.3.1.a) Flamme de pré-mélange

Une flamme de pré-mélange est une flamme où l'oxydant et le carburant sont mélangés en amont du front de flamme. La richesse du mélange peut être définie par :

$$\phi = s \frac{Y_F}{Y_{ox}} = \frac{Y_F/Y_{ox}}{(Y_F/Y_{ox})_{st}} \quad (1.84)$$

où s est le nombre de kilogramme d'oxydant nécessaire pour brûler 1 kilogramme de combustible. D'après cette définition :

- $\phi = 1$ à la stœchiométrie,
- $\phi < 1$ si l'oxydant est en excès : la combustion est dite pauvre,
- $\phi > 1$ si le carburant est en excès : la combustion est alors qualifiée de riche.

Dans une flamme de pré-mélange, un front de flamme mince (entre 0.1 et 1 mm) peut être observé. Ce front de flamme sépare les gaz frais constitués d'un mélange d'oxydant et de combustible des gaz brûlés constitués des produits de combustion. Une propagation du front de flamme peut être observée et quantifiée via la notion de vitesse de flamme notée S_l . Plusieurs définitions peuvent être utilisées [107] :

- La vitesse absolue correspond à la vitesse du front de flamme par rapport à un référentiel fixe.
- La vitesse de déplacement correspond à la vitesse du front de flamme par rapport à l'écoulement.
- La vitesse de consommation évalue la vitesse à laquelle les réactifs sont consommés. Elle peut être évaluée par l'expression suivante pour une flamme unidimensionnelle :

$$S_t = \frac{1}{\rho_0(Y_F^1 - Y_F^0)} \int_{-\infty}^{+\infty} \dot{\omega}_F dx \quad (1.85)$$

où 0 indique que la quantité est évaluée dans les gaz frais et 1 indique qu'elle est évaluée dans les gaz brûlés.

Par définition, la vitesse absolue et la vitesse de déplacement sont des grandeurs locales, donc dépendantes du point où elles sont calculées alors que la vitesse de consommation est une grandeur globale.

Cette propagation du front de flamme est due à deux phénomènes simultanés. Les gaz brûlés chauffent les gaz frais par diffusion thermique dans une zone dite de pré-chauffage. Les gaz frais échauffés réagissent dans la zone de réaction. Cette réaction de combustion dégage de la chaleur qui contribue au réchauffement des gaz frais dans la zone de pré-chauffage.

Une épaisseur de flamme peut être définie pour une flamme de prémélange. Plusieurs définitions existent. Une définition très utilisée est l'épaisseur thermique de flamme notée δ_l [107] et définie par :

$$\delta_l = \frac{T_1 - T_0}{\max(|\nabla T|)} \quad (1.86)$$

Cette distance nécessite d'avoir obtenu un premier profil de température pour la flamme. Une bonne estimation de l'épaisseur de flamme a priori peut être fournie par l'épaisseur de Blint δ_l^b [107] qui est évaluée par :

$$\delta_l^b = 2 \frac{D_{th}^0}{S_L} \left(\frac{T_1}{T_0} \right)^{0.7} \quad (1.87)$$

Les flammes de pré-mélange peuvent présenter des risques de sécurité. En effet, la flamme peut se propager dans l'ensemble de la chambre et peut remonter dans le système d'injection car le mélange injecté est dans des conditions stœchiométriques favorables à la propagation du front de flamme. Ce phénomène est qualifié de retour de flamme ou "flashback" en anglais [49]. Un autre risque de sécurité potentiel est le risque d'auto-allumage non souhaité du mélange.

1.3.1.b) Flamme de diffusion

Une flamme de diffusion est une flamme où le carburant et l'oxydant ne sont pas mélangés avant le front de flamme. Dans une telle flamme, trois étapes de combustion sont observées simultanément. Premièrement, les réactifs vont se mélanger via des phénomènes diffusifs. Deuxièmement, si la température est suffisamment importante, une réaction de combustion va se produire et former des gaz brûlés. Troisièmement, ces gaz brûlés vont être transportés par diffusion dans les réactifs frais où ils vont contribuer au pré-chauffage des différents réactifs. Ainsi, dans une flamme de diffusion, le taux de consommation des réactifs va être limité par des phénomènes de diffusion et de mélange plutôt que

par des phénomènes de cinétique chimique, sauf dans des cas proches de l'extinction de la flamme où l'étirement de celle-ci est très important. Il n'est pas possible de définir une vitesse et une épaisseur de flamme pour une flamme de diffusion.

Un avantage des flammes de diffusion est leur sécurité. Le risque de retour de flamme ou d'auto-allumage du carburant ou de l'oxydant est nulle. En effet, dans l'injection de combustible, le mélange est trop riche pour brûler. Inversement, dans l'injection d'oxydant, le mélange est trop pauvre. Cependant, le taux de dégagement de chaleur atteignable par une flamme de diffusion est plus faible que pour une flamme de pré-mélange, ce qui limite l'intérêt des flammes de diffusion pour de nombreuses applications industrielles.

1.3.1.c) Flamme partiellement pré-mélangée

Dans les écoulements plus complexes se produisant dans les chambres de combustion industrielles, le combustible et l'oxydant sont injectés séparément et se mélangent plus ou moins uniformément en amont de la flamme. Il est possible d'observer localement des flammes de pré-mélange ou des flammes de diffusion selon le niveau local de mélange entre les réactifs.

Dans les applications pratiques récentes, on essaie de privilégier des flammes pré-mélangées ou partiellement pré-mélangées de manière à limiter la production de suie ou de NOx et à améliorer l'efficacité des chambres de combustion [49].

1.3.2 Modélisation de la combustion turbulente

En régime turbulent, plusieurs termes doivent être modélisés pour prendre en compte la combustion. Pour ce faire plusieurs familles de modèles existent. Une mention très brève de quelques modèles de combustion sera effectuée. Un état de l'art plus complet peut être trouvé dans la revue de Veynante et Vervisch [137] et dans la thèse de Savre [120].

1.3.2.a) Modèles statistiques

Dans les modèles statistiques, une fonction de densité de probabilité ou *probability density function* (PDF) est utilisée. Cette fonction $P(\Psi)$ décrit la probabilité que la variable Ψ soient compris dans l'intervalle $[\Psi < Y < \Psi + d\Psi]$ en un point, cette probabilité valant $P(\Psi)d\Psi$. Pour un écoulement turbulent réactif, Ψ est un vecteur contenant les fractions massiques des différentes espèces et la température. Dans ces modèles, il est nécessaire d'estimer la PDF. Une première possibilité est de présumer sa forme avec des observations expérimentales ou des calculs DNS. Une autre possibilité est de résoudre une équation de transport pour la PDF. Cette approche est plus coûteuse mais permet d'avoir un modèle plus général [120].

1.3.2.b) Modèles géométriques

Dans les modèles géométriques pour la combustion pré-mélangée, on fait l'hypothèse que le front de flamme est d'épaisseur nulle. Le front de flamme est donc représenté comme une discontinuité entre gaz brûlés et gaz frais. Dans les approches "level-set" ou G-equation, une fonction $G(x, t)$ est introduite telle que $G = G_0$ à la position du front de flamme, $G < G_0$ dans un mélange non-brûlé et $G > G_0$

dans les produits de réaction [105]. Cette méthode se rapproche de celles utilisées dans des problèmes d'atomisation. Une fonction similaire à la fonction G y est introduite pour repérer l'interface liquide-gaz qui s'apparente à une discontinuité du fait de la forte variation des propriétés physiques telles que la masse volumique ou la viscosité.

Les modèles à densité de surface de flamme introduisent une équation de conservation de la densité de surface de flamme Σ définie comme la surface de la flamme divisée par le volume. Le taux de réaction moyen du carburant est évaluée en multipliant Σ par un taux de réaction laminaire par unité de surface. Suivant les modèles, différentes hypothèses de fermeture sont faites. Une revue de différents modèles à densité de surface de flamme peut être trouvée chez Duclos [37].

La plupart de ces modèles de combustion ne sont valables que pour une gamme limitée de régimes de combustion. Ainsi, les modèles à densité de surface de flamme ne sont valides que pour un régime de flammes où le front de flamme est faiblement affecté par la turbulence. Dans un régime de flamme épaissie, certaines structures turbulentes pénètrent à l'intérieur de la zone de pré-chauffage et de la zone de réaction, ce qui modifie de manière importante le comportement de la flamme. Des modèles algébriques de combustion valides en régime de flammes mais aussi en régime de flamme épaissie ont été développés par Mura et al.[94].

1.3.2.c) Modèle de flamme épaissie

La méthode utilisée dans cette thèse est appelée modèle de flamme épaissie (TF) [47]. Le front de flamme y est épaissi artificiellement pour pouvoir être résolu sans raffinement excessif du maillage. Pour ce faire, le changement de variable suivant est effectué [27] :

$$x' = Fx \quad (1.88)$$

$$t' = Ft \quad (1.89)$$

Ce changement de variable revient à modifier les termes sources de la manière suivante :

$$\bar{\omega} = \frac{\dot{\omega}}{F} \quad (1.90)$$

$$\bar{D} = FD \quad (1.91)$$

avec F le facteur d'épaississement. La vitesse de flamme n'est pas modifiée par ces transformations [140] :

$$S_t \propto \frac{D}{\delta_l} = \frac{FD}{F\delta_l} \quad (1.92)$$

$$S_l \propto \sqrt{D\dot{\omega}} \quad (1.93)$$

Par contre, ces modifications altèrent l'interaction entre le front de flamme et la turbulence. Un front de flamme épaissi est moins plissé par la turbulence. Pour corriger cet effet, on utilise une fonction d'efficacité E telle que [27] :

$$\frac{S_t}{S_l} = E \quad (1.94)$$

où S_t est une vitesse de flamme en régime turbulent. Les modifications suivantes sont alors effectuées :

$$\bar{\omega} = \frac{E\dot{\omega}}{F} \quad (1.95)$$

$$\bar{D} = FED \quad (1.96)$$

Ce modèle modifie la dynamique des phénomènes de diffusion, ce qui peut influencer la dynamique de l'écoulement. Pour limiter l'impact de ce modèle, un senseur est utilisé pour détecter les zones où se produisent la combustion et limiter les modifications à ces zones là. Ce modèle est baptisé modèle de flamme épaissie dynamique (*Dynamically Thickened Flame* ou DTF en anglais). Dans ce modèle l'épaississement F n'est plus constant mais dépend du senseur de flamme S suivant l'équation :

$$F = 1 + (F_{max} - 1)S \quad (1.97)$$

où F_{max} est la valeur maximale de l'épaississement.

Ici, une pseudo-réaction chimique est utilisée pour repérer la zone réactive :

$$S = \tanh\left(\beta' \frac{\Omega}{\Omega_0}\right) \quad (1.98)$$

$$\Omega = Y_F^{n_F} Y_O^{n_O} \exp\left(-\Gamma \frac{E_a}{RT}\right) \quad (1.99)$$

avec β' et Γ des constantes modifiant la sensibilité du senseur, Ω_0 un taux de réaction de référence correspondant au maximum de Ω dans une flamme 1D pré-mélangée dans les mêmes conditions, Y_F et Y_O les fractions massiques de carburant et d'oxydant, n_F et n_O les coefficients de réaction pour le carburant et l'oxydant, E_a l'énergie d'activation, R la constante des gaz parfaits et T la température.

Colin et al.[27] ont réalisé des DNS d'interactions de flammes planes avec une paire de tourbillons contra-rotatifs afin d'évaluer l'impact de l'épaississement sur les interactions entre la flamme et la turbulence. La fonction d'efficacité E reproduit le plissement qu'aurait la flamme si il n'y avait pas de modèle d'épaississement mais aussi le plissement par la turbulence de sous-maille. D'après Colin [27], le plissement Ξ peut être évalué par :

$$\Xi = 1 + \alpha \frac{\Delta_e}{S_l} \langle a_T \rangle_s \quad (1.100)$$

avec α une constante du modèle, Δ_e la taille de la maille, S_l la vitesse de flamme laminaire et $\langle a_T \rangle_s$ le taux de déformation de la flamme. $\langle a_T \rangle_s$ peut être évalué par

$$\langle a_T \rangle_s = \Gamma_{Co} \frac{u'_{\Delta_e}}{\Delta_e} \quad (1.101)$$

avec Γ_{Co} une fonction dépendant de la taille de maille Δ_e , de l'épaisseur de flamme épaissie δ_l^1 , de u'_{Δ_e} la vitesse turbulente de sous-maille et de S_l la vitesse de flamme laminaire.

$$\Gamma_{Co} \left(\frac{\Delta_e}{\delta_l^1}, \frac{u'_{\Delta_e}}{S_l} \right) = 0.75 \exp \left[\frac{1.2}{(u'_{\Delta_e}/S_l)^{0.3}} \right] \left(\frac{\Delta_e}{\delta_l^1} \right)^{2/3} \quad (1.102)$$

α peut être obtenu par :

$$\alpha = \beta_{Co} \frac{2 \ln(2)}{0.84(Re_t^{1/2} - 1)} \quad (1.103)$$

avec β_{Co} une constante entre 0 et 1 et Re_t un nombre de Reynolds turbulent :

$$Re_t = \frac{u' L_t}{\nu} \quad (1.104)$$

avec u' la fluctuation de vitesse, L_t la longueur intégrale de la turbulence et ν la viscosité cinématique

Finalement, la fonction d'efficacité E est calculée en faisant le ratio du plissement non-épaissi $\Xi(\delta_l^0)$ par le plissement épaissi $\Xi(\delta_l^1)$

$$E = \frac{\Xi(\delta_l^0)}{\Xi(\delta_l^1)} = \frac{1 + \alpha \Gamma_{Co}(\Delta_e/\delta_l^0, u'_{\Delta_e}/S_l) u'_{\Delta_e}/S_l}{1 + \alpha \Gamma_{Co}(\Delta_e/\delta_l^1, u'_{\Delta_e}/S_l) u'_{\Delta_e}/S_l} \quad (1.105)$$

Charlette et al. ont proposé une autre formulation pour le plissement de sous-maille [22] à partir des DNS réalisées par Colin et al. [27] :

$$\Xi \left(\frac{\Delta_e}{\delta_l^0}, \frac{u'_{\Delta_e}}{S_l}, Re_{\Delta_e} \right) = \left(1 + \min \left[\frac{\Delta_e}{\delta_l^0}, \Gamma_{Ch} \frac{u'_{\Delta_e}}{S_l} \right] \right)^{\beta_{Ch}} \quad (1.106)$$

avec β_{Ch} une constante valant 0.5 et Re_{Δ_e} un nombre de Reynolds de sous-maille :

$$Re_{\Delta_e} = \frac{u'_{\Delta_e} \Delta_e}{\nu} \quad (1.107)$$

Un fit analytique de la fonction Γ_{Ch} est proposé par Charlette et al. [22] La fonction d'efficacité E est calculée de la même manière que dans le modèle de Colin :

$$E = \frac{\Xi(\delta_l^0)}{\Xi(\delta_l^1)} \quad (1.108)$$

La formulation de Charlette n'utilise pas de nombre de Reynolds turbulent sur l'échelle intégrale L_t , il y a donc un paramètre de moins à fournir au modèle.

Une formulation dynamique du modèle de flamme épaissie a été proposée par Veynante et Moureau [136]. Dans cette formulation, le paramètre β de la formulation de Charlette peut être évalué à partir des grandeurs résolues de la flamme filtrées en LES et filtrées avec un filtre test supplémentaire. Cette formulation n'a pas été utilisée dans cette thèse par manque de temps pour implémenter ce modèle dans le code CEDRE.

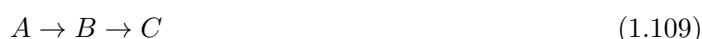
1.3.3 Modélisation de la chimie

Les réactions de combustion des carburants usuels tels l'essence et le kérosène sont généralement très complexes. Elles peuvent compter plus d'une centaine d'espèces et plus d'un millier de réactions chimiques différentes. Intégrer des mécanismes réactionnels aussi détaillés dans des codes de simulation numérique 3D n'est pas possible pour des raisons de coûts de calculs. En effet, pour chaque espèce chimique, une équation de transport supplémentaire doit être résolue. De plus, certaines réactions peuvent provoquer des problèmes de raideur numérique à cause de leur temps caractéristique très court par rapport aux échelles de temps caractéristiques de l'écoulement turbulent [77]. Ces problèmes pouvant mener à une réduction drastique du pas de temps utilisé dans les calculs.

Pour résoudre ces difficultés, il convient de réduire le nombre de réactions et d'espèces mises en jeu. Deux types de mécanismes réactionnels peuvent être obtenus par réduction de mécanismes chimiques : les mécanismes squelettiques et les mécanismes globaux. Plus de détails sur ces différentes méthodes sont disponibles dans la thèse de Franzelli [47] ou celle de Vicquelin [138]. Un mécanisme squelettique est obtenu à partir d'un mécanisme détaillé dans lequel les espèces et les réactions ayant une influence négligeable sur la combustion sont éliminés. Il s'agit souvent d'espèces radicalaires dont la concentration reste quasiment nulle. Le nombre d'espèces reste encore trop grand pour un code de simulation numérique 3D mais un schéma squelettique peut être utilisé comme base pour construire un mécanisme plus réduit ou pour générer une table de mécanisme chimique [47].

Il est possible d'employer des mécanismes globaux contenant moins d'une dizaine d'espèces et de réactions. Ces mécanismes sont construits de manière à reproduire certaines caractéristiques importantes de la combustion telle la vitesse de flamme, la température de flamme, le temps d'auto-allumage, si possible sur une large gamme de richesse et de pression différentes [48]. Pour ce faire, les différents paramètres du mécanisme, par exemple les constantes pré-exponentielles et les ordres de réaction, sont ajustés pour retrouver les valeurs désirées de vitesse de flamme, etc. Plus un mécanisme global contient de réactions, plus le nombre de degrés de liberté et ainsi de paramètres pouvant être reproduits correctement augmente. Jaouen et al. [65] ont développé des schémas cinétiques réduits de manière analytique pour des mélanges de méthane et d'air et Felden et al. [44] en ont développé pour des mélanges de kérosène et d'air.

Une autre approche consiste à réduire le nombre de paramètres permettant de décrire le mécanisme réactionnel de façon à pouvoir tabuler les différentes grandeurs en fonction de ces paramètres [138]. Ces méthodes sont souvent appelées méthode de réduction par génération de variété (*reduction by manifold generation* en anglais). Ces méthodes sont par exemples utilisées dans l'approche FPI (Flame Prolongation of Intrinsic Low-dimension Manifold) créée par Gicquel [55] et améliorée par Fiorina et al. [45]. Une approche similaire intitulée FTACLES (Filtered Tabulated Chemistry for LES) a été utilisée pour la LES par Fiorina et al. [46]. Certaines réactions chimiques se déroulent très rapidement par rapport aux autres, ce qui peut permettre d'appliquer l'approximation des états quasi-stationnaires, tels que décrits par Peters [106]. Par exemple, en considérant la réaction :



avec les lois cinétiques :

$$\frac{d[A]}{dt} = -k_1[A] \quad (1.110)$$

$$\frac{d[B]}{dt} = k_1[A] - k_2[B] \quad (1.111)$$

$$\frac{d[C]}{dt} = k_2[B] \quad (1.112)$$

Si la réaction de formation de C est beaucoup plus rapide que celle de formation de B, la concentration de B restera à peu près constante. Les lois cinétiques se simplifient en :

$$\frac{d[A]}{dt} = -k_1[A] \quad (1.113)$$

$$[B] \approx \frac{k_1}{k_2}[A] \quad (1.114)$$

$$\frac{d[C]}{dt} = k_2[B] \approx k_1[A] \quad (1.115)$$

Ainsi, l'équation différentielle 1.111 a été remplacée par l'équation algébrique 1.114. Le système chimique peut alors être réduit d'une espèce. Contrairement à ce qui se passe avec l'utilisation d'un schéma réduit, des informations sur les espèces supprimées du schéma cinétique sont toujours disponibles via des relations algébriques. Pour plus de précisions sur cette approche, le lecteur est renvoyé à Peters et Rogg [106].

Dans cette thèse, des mécanismes globaux sont utilisés. Ils seront détaillés avant leur utilisation dans les parties ultérieures. Le carburant est injecté sous forme liquide dans les moteurs aéronautiques. La combustion est donc précédée par l'atomisation, la dispersion en brouillard du carburant et son évaporation. Certains de ces phénomènes seront pris en compte ici et détaillés dans la prochaine section.

1.4 Description et modélisation de la phase dispersée

Dans cette partie, les termes gouttes et particules seront utilisés avec le même sens. De même, la phase dispersée et le brouillard de gouttes désignent la même entité.

Par la suite, les équations et modèles permettant de décrire une phase particulière dispersée dans un fluide porteur sont présentés.

1.4.1 Fonction de densité de probabilité du spray

Dans de nombreuses applications industrielles, une description déterministe de chaque inclusion n'est ni envisageable du fait de leur nombre ni souhaitable puisqu'on souhaite essentiellement évaluer des propriétés moyennes et leurs variances. Ainsi, il est préférable voire nécessaire de baser la description du brouillard de particules sur une approche stochastique. On définit à ce titre un jeu de variables permettant la description complète de l'évolution du brouillard. Pour la simulation d'écoulements diphasiques réactifs, ces variables sont la position \mathbf{x} , la vitesse \mathbf{v} , le rayon r et la température θ des inclusions. On introduit ensuite la fonction de densité de probabilité $f(t, \mathbf{x}, \mathbf{v}, r, \theta)$ telle que $f(t, \mathbf{x}, \mathbf{v}, r, \theta) d\mathbf{x}d\mathbf{v}drd\theta$ représente le nombre moyen de gouttes ayant à l'instant t une position \mathbf{x} comprise dans $[\mathbf{x}, \mathbf{x} + d\mathbf{x}]$, une vitesse dans $[\mathbf{v}, \mathbf{v} + d\mathbf{v}]$, un rayon dans $[r, r + dr]$ et une température dans $[\theta, \theta + d\theta]$.

Une équation de transport de la distribution des particules de type Boltzmann peut être obtenue en considérant les phénomènes influant sur l'état de la goutte [38, 140] :

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \nabla_{\mathbf{x}} \cdot (\mathbf{v}f) + \nabla_{\mathbf{v}} \cdot (\mathbf{F}f) + \frac{\partial(Kf)}{\partial r} + \frac{\partial(Rf)}{\partial \theta} = \Gamma(f) + Q(f) \quad (1.116)$$

avec :

- $\frac{\partial f}{\partial t} + \nabla_{\mathbf{x}} \cdot (\mathbf{v}f)$ le transport d'une goutte à la vitesse \mathbf{v}
- \mathbf{F} les forces appliquées sur la particule et $\nabla_{\mathbf{v}}$ le gradient par rapport à la vitesse de la particule
- K le terme lié au changement de taille de la goutte, par exemple à cause de l'évaporation et de la dilatation.

- R le terme lié au changement de température de la goutte via les échanges de chaleur avec l'écoulement
- $\Gamma(f)$ le terme dues à des phénomènes de fragmentation des gouttes
- $Q(f)$ le terme lié à la coalescence et à la collision des particules

Les membres de droite modélisent des variations brusques des propriétés particulières. Par exemple, la taille des gouttes change brutalement en cas de fragmentation ou de coalescence de gouttes.

Dans les calculs réalisés dans le cadre de cette thèse, la fraction volumique particulière aura des niveaux suffisamment faibles pour négliger les collisions. De même on aura recours à une méthode d'injection simplifiée qui ne tient pas compte des phénomènes d'atomisation primaire et secondaire pouvant se produire à cet endroit. Ainsi, le terme de fragmentation peut être négligé.

1.4.1.a) Approche eulérienne

Dans l'approche eulérienne, des intégrales dans l'espace des phases sont réalisées afin d'obtenir des valeurs moyennes des grandeurs de la phase dispersée. Par exemple, pour la densité moyenne de particule qui représente le nombre de particules de rayon r à la position \mathbf{x} au temps t , on a :

$$n(\mathbf{x}, r, t) = \int_{\mathbf{v}} \int_{\theta} f(t, \mathbf{x}, \mathbf{v}, r, \theta) d\mathbf{v} d\theta \quad (1.117)$$

Ainsi on peut intégrer l'équation d'évolution de densité de probabilité du spray sur l'espace des vitesses et des températures pour obtenir l'équation d'évolution du nombre moyen de particules :

$$\frac{\partial n}{\partial t} + \nabla_{\mathbf{x}} \cdot (\bar{v}n) + \frac{\partial}{\partial r} \left(\int_{\mathbf{v}} \int_{\theta} K f d\mathbf{v} d\theta \right) = \int_{\mathbf{v}} \int_{\theta} \Gamma(f) d\mathbf{v} d\theta + \int_{\mathbf{v}} \int_{\theta} Q(f) d\mathbf{v} d\theta \quad (1.118)$$

avec

$$\bar{v}(\mathbf{x}, r, t) = \frac{1}{n(\mathbf{x}, r, t)} \int_{\mathbf{v}} \int_{\theta} \mathbf{v} f d\mathbf{v} d\theta \quad (1.119)$$

On peut ainsi construire un système d'équations décrivant l'évolution des quantités moyennes du spray. Ces équations font cependant apparaître des termes qu'il convient de fermer.

De façon générale, les approches eulériennes présentent plusieurs avantages. Elles sont indépendantes du nombre de particules simulées puisque ce sont des équations de transport eulériennes pour les variables d'intérêt du spray qui sont résolues. Un autre avantage est la simplicité de couplage entre phases continues et phases dispersées puisque les variables d'intérêt sont disponibles aux mêmes points de la grille de calcul. De plus, le respect de certaines contraintes sur la forme du système d'équations eulériennes garantit son hyperbolicité et la possibilité d'utiliser les mêmes méthodes numériques que pour la phase porteuse [38]. Finalement, la parallélisation est identique à celle du solveur de phase principale.

Cependant, il convient de remarquer que la formulation de modèles est généralement plus complexe dans un cadre eulérien puisque seules des quantités moyennes sont disponibles. Certains phénomènes physiques nécessitent la prise en compte de plusieurs vitesses moyennes, par exemple l'interaction de particules avec une paroi ou le croisement de deux brouillards dilués. Il est possible d'étendre la formulation afin de modéliser localement deux vitesses [86].

1.4.1.b) Approche lagrangienne

Dans l'approche lagrangienne, la fonction de probabilité est représentée par une somme de fonctions Dirac :

$$f(t, \mathbf{x}, \mathbf{v}, r, \theta) = \sum_i \omega_{p,i} \delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}_{p,i}) \delta(\mathbf{v} - \mathbf{v}_{p,i}) \delta(r - r_{p,i}) \delta(\theta - T_{p,i}) \quad (1.120)$$

avec $\omega_{p,i}$ le poids numérique de la particule i .

En utilisant l'expression 1.120 dans l'équation d'évolution de la PDF 1.116, il est possible de montrer en utilisant des propriétés de la fonction Dirac que la description de la fonction de densité de probabilité se réduit aux équations suivantes pour chaque inclusion :

$$\frac{dx_{p,i}}{dt} = v_{p,i} \quad (1.121)$$

$$\frac{dm_p v_{p,i}}{dt} = F_i \quad (1.122)$$

avec F_i les forces exercées sur la particule.

$$\frac{dm_p}{dt} = \dot{m}_p \quad (1.123)$$

avec \dot{m}_p la variation de masse

$$\frac{dm_p h_{s,p}}{dt} = \dot{\Phi}_p \quad (1.124)$$

avec $\dot{\Phi}_p$ la variation d'enthalpie de la goutte

1.4.2 Forces agissant sur une particule

Les forces agissant sur une particule sont déterminées par l'intégrale de la pression et du tenseur des contraintes à sa surface. Comme l'écoulement autour des inclusions particulières n'est pas explicitement résolu, il est nécessaire de calculer analytiquement ou d'approcher cette intégrale. Dans le cas où le nombre de Reynolds particulaire Re_p est faible, les forces peuvent être exprimées en fonction de grandeurs ponctuelles comme la vitesse particulaire locale, la vitesse fluide vue par la particule ainsi que l'accélération de ces quantités. Ce sont les équations de Basset [13], Boussinesq [17] et Osen [101] ou équations BBO. Maxey et Riley [89] et Gatignol [53] ont corrigé quelques incohérences relatives à la dérivation de ces équations.

Le nombre de Reynolds particulaire Re_p est défini comme :

$$Re_p = \frac{d_p \|\tilde{\mathbf{u}} - \mathbf{v}_p\|}{\nu} \quad (1.125)$$

avec

- d_p le diamètre de la particule
- $\tilde{\mathbf{u}}$ la vitesse du gaz non perturbée par la particule considérée, les perturbations liées à d'autres particules présentes dans l'écoulement devant être prises en compte.

Par simple analyse dimensionnelle, il est possible de montrer que pour les applications traitées dans le cadre de cette thèse, les forces prédominantes à considérer sont les forces de traînée et de gravité. La force de traînée peut s'écrire sous la forme suivante pour de faibles nombres de Reynolds particulières :

$$F_i^{drag} = \frac{\pi}{8} \rho d_p^2 C_d \|\check{\mathbf{u}} - \mathbf{v}_p\| (\check{u}_i - v_{p,i}) \quad (1.126)$$

Dans cette expression, C_d le coefficient de traînée est donnée par :

$$C_d = \frac{24}{Re_p} \quad (1.127)$$

En pratique, des corrélations empiriques comme celle de Schiller-Naumann [121] permettent d'étendre la validité de l'équation de traînée pour des Reynolds particulières importants :

$$C_d = \frac{24}{Re_p} (1 + 0.15 Re_p^{0.687}) \quad \text{pour } Re_p \leq 1000 \quad (1.128)$$

$$C_d = 0.44 \quad \text{pour } Re_p \geq 1000 \quad (1.129)$$

La force de gravité peut être écrite :

$$F_i^{grav} = (m_p - m_g) g_i \quad (1.130)$$

avec

- m_p et m_g la masse de la particule et la masse du volume de gaz déplacé par la particule
- g_i la projection de la gravité suivant l'axe i

1.4.3 Échange de masse et d'énergie d'une particule isolée avec son environnement

Dans cette partie, on cherche à évaluer les échanges de masse et d'énergie entre une particule et le fluide porteur. Pour plus de détails, le lecteur est invité à consulter la thèse de Laurent [75].

Différentes notations sont utilisées et peuvent être situées sur la figure 1.2 pour localiser les différentes propriétés :

- S désigne la surface de la goutte
- ∞ désigne les propriétés du gaz non perturbées par la présence de la particule, à l'infini pour un gaz au repos ou en dehors de la couche limite entourant la goutte en présence d'écoulement

Les hypothèses suivantes sont effectuées :

- Le gaz est supposé quasi-stationnaire. Cela signifie que les transferts dans le film gazeux autour de la goutte s'adaptent instantanément aux changements de conditions aux limites.

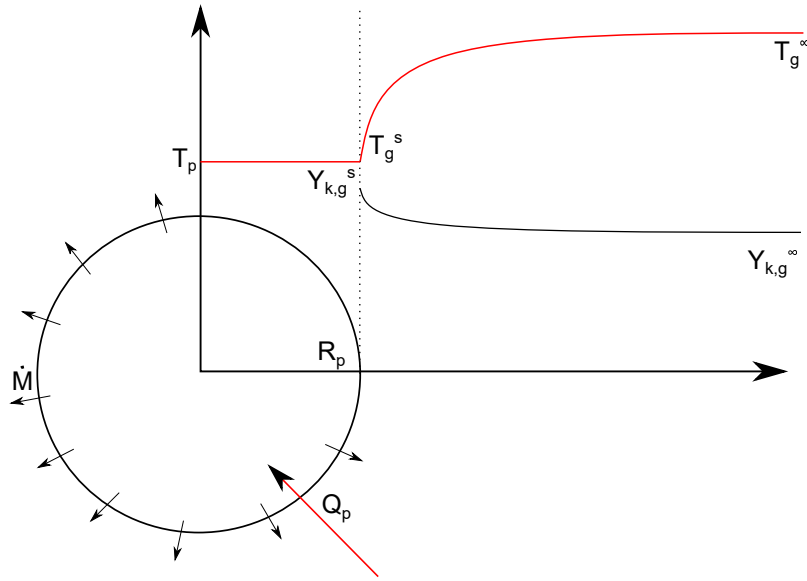


Figure 1.2 : Schéma d'une goutte avec la position des différentes grandeurs et du flux de chaleur et de masse

- Les gouttes sont supposées sphériques et le problème à symétrie sphérique.
- Les gouttes ne contiennent qu'une seule espèce nommée espèce k . L'extension des dérivations ci-dessous au cas multi-composant est décrite dans la thèse de Laurent [75].
- Les propriétés physiques sont considérées constantes dans le film gazeux autour de la goutte. Elles peuvent être évaluées à l'aide de la règle du tiers [64] :

$$T_g^{ref} = \frac{2}{3}T_g^s + \frac{1}{3}T_g^\infty \quad (1.131)$$

$$Y_{k,g}^{ref} = \frac{2}{3}Y_{k,g}^s + \frac{1}{3}Y_{g,k}^\infty \quad (1.132)$$

- Les propriétés physiques sont supposées uniformes dans la goutte.
- La pression est supposée uniforme.
- Les conditions thermodynamiques sont loin des points critiques du liquide.
- L'interface entre le liquide et le gaz est supposé à l'équilibre thermodynamique.
- Les transferts radiatifs sont négligés.

1.4.3.a) Flux massique

Pour calculer les flux massiques il faut intégrer les équations de conservation des espèces à la surface de la goutte.

Le flux massique est défini par :

$$\dot{M} = 4\pi r^2 \rho_g u_{g,r} \quad (1.133)$$

avec $u_{g,r}$ la vitesse radiale du gaz

L'équation de conservation de l'espèce k avec les hypothèses de symétrie sphérique et de quasi-stationnarité devient :

$$\dot{m}_k = \rho_g Y_{g,k} u_{g,r} - \rho_g D_{g,k} \frac{dY_{g,k}}{dr} \quad (1.134)$$

avec $D_{g,k}$ le coefficient de diffusion de l'espèce k dans le gaz. En intégrant cette équation à la surface de la goutte, on obtient :

$$\dot{M} = \dot{M} Y_{g,k} - 4\pi r^2 \rho_g D_{g,k} \frac{dY_{g,k}}{dr} \quad (1.135)$$

qui peut être intégrée pour obtenir

$$\frac{\dot{M}}{4\pi \rho_g D_{g,k} r_p} = \ln(1 + B_M) \quad (1.136)$$

avec B_M le nombre de Spalding massique défini de la manière suivante

$$B_M = \frac{Y_{g,k}^S - Y_{g,k}^\infty}{1 - Y_{g,k}^S} \quad (1.137)$$

En introduisant le nombre de Sherwood Sh qui correspond à l'adimensionnement du gradient de concentration de l'espèce vapeur :

$$Sh = \frac{2r_p}{Y_{g,k}^\infty - Y_{g,k}^S} \left(\frac{\partial Y_k}{\partial r} \right)_S \quad (1.138)$$

il est possible d'écrire le débit d'évaporation \dot{M} sous la forme suivante :

$$\dot{M} = 2\pi r_p \rho_p D_{g,k} Sh \ln(1 + B_M) \quad (1.139)$$

Pour un écoulement au repos, le nombre de Sherwood prend la valeur 2. Pour une goutte dans un écoulement en mouvement, on peut utiliser les corrélations de Ranz-Marshall 1.140 ou d'Abramzon-Sirignano 1.141 :

$$Sh = 2 + 0.57 Re_p^{1/2} Sc^{1/3} \quad (1.140)$$

$$Sh = 1 + \max(1, Re_p^{0.077})(1 + Re_p Sc)^{1/3} \quad (1.141)$$

avec Sc le nombre de Schmidt de la vapeur.

Un nombre de Sherwood modifié Sh^* peut être introduit pour prendre en compte l'épaississement de la couche limite autour de la goutte dû à l'évaporation. Ces nombres sont reliés par la relation suivante selon Abramzon et Sirignano [1] :

$$Sh^* = 2 + \frac{Sh - 2}{F_M(B_M)} \quad (1.142)$$

avec

$$F_M(B) = (1 + B)^{0.7} \frac{\ln(1 + B)}{B} \quad (1.143)$$

Finalement, le débit d'évaporation en tenant compte de l'effet de soufflage de la couche limite peut être obtenu par :

$$\dot{M} = 2\pi r_p \rho_p D_{g,k} Sh^* \ln(1 + B_M) \quad (1.144)$$

La fraction massique de vapeur à la surface de la goutte $Y_{g,k}^S$ peut être calculée via la loi de Clausius-Clapeyron :

$$p_k^S = p^{cc} \exp \left(\frac{W_k L_{ev}(T_g^{ref})}{R} \left(\frac{1}{T_g^{cc}} - \frac{1}{T_g^S} \right) \right) \quad (1.145)$$

où

- Les exposants cc indiquent que la propriété est évaluée en un point arbitraire de la courbe de saturation
- W_k est la masse molaire de la vapeur
- $L_{ev}(T_g^{ref})$ est la chaleur latente d'évaporation à la température de référence

La pression partielle de vapeur p_k^S permet de calculer la fraction molaire X_k^S via la loi de Raoult :

$$p_k^S = X_k^S p = X_{l,k} p_k^{sat} \quad (1.146)$$

Pour une goutte monocomposant, $X_{l,k} = 1$. Avec X_k^S , il est possible d'obtenir la fraction massique à la surface de la particule Y_k^S .

1.4.3.b) Flux de chaleur

Plusieurs modèles peuvent être utilisés pour décrire la conduction de chaleur dans une goutte.

- Dans un modèle dit de conduction infinie, la température de la goutte est supposée uniforme à chaque instant
- Dans un modèle dit de "conduction effective", la forme du profil de température est supposée ; une approximation courante étant un profil parabolique

Avec les hypothèses de symétrie sphérique et de quasi-stationnarité, l'équation de conservation de l'énergie peut être décrite par :

$$\frac{d}{dr} (r^2 T c_{p,g} \dot{m}) - \frac{d}{dr} \left(r^2 \lambda_g \frac{dT}{dr} \right) = 0 \quad (1.147)$$

avec λ_g la conductivité thermique dans le gaz.

Cette équation peut être intégrée pour obtenir :

$$\dot{M} c_{p,k} T_g - 4\pi r^2 \lambda_g \frac{dT}{dr} = \dot{M} c_{p,k} T_g^S - 4\pi r^2 \lambda_g \left(\frac{\partial T_g}{\partial r} \right)_S \quad (1.148)$$

avec

- \dot{M} le taux d'évaporation massique obtenu via l'équation 1.144
- $c_{p,k}$ la chaleur spécifique à pression constante de la vapeur de l'espèce k
- $c_{p,g}$ la chaleur spécifique à pression constante du gaz

- $4\pi r^2 \lambda_g \left(\frac{\partial T_g}{\partial r} \right)$ correspond aux flux de chaleur de conduction dans le gaz noté \dot{Q}_g

Certains nombres sans dimension peuvent être introduits :

- Nu le nombre de Nusselt qui correspond à l'adimensionnement du gradient de température à l'interface liquide-gaz :

$$Nu = \frac{2r_p}{T_g^\infty - T_g^S} \left(\frac{\partial T}{\partial r} \right)_S \quad (1.149)$$

- B_T le nombre de Spalding thermique défini comme suit

$$B_T = \frac{c_{p,k}(T_{g,\infty} - T_{g,s})}{-\frac{\dot{Q}_g}{M}} \quad (1.150)$$

Ces nombres peuvent être utilisés dans l'équation 1.148 pour obtenir :

$$\dot{M} = 2\pi Nu \lambda_g r_p \frac{1}{c_{p,k}} \ln(1 + B_T) \quad (1.151)$$

Le nombre de Nusselt vaut 2 pour une particule dans un écoulement au repos. Pour une goutte dans un écoulement, il peut être obtenue via les corrélations de Ranz-Marshall 1.152 [110] ou d'Abramzon-Sirignano 1.153 [1] :

$$Nu = (2 + 0.57 Re_p^{1/2} Pr^{1/3}) \quad (1.152)$$

$$Nu = (2 + \max(1, Re_p^{0.077})(1 + Re_p Pr)^{1/3} - 1) \quad (1.153)$$

Le nombre de Nusselt peut être modifié pour tenir compte de l'écoulement de Stephan. Le nombre modifié Nu^* est relié au nombre de Nusselt classique par la relation suivante [1] :

$$Nu^* = 2 + \frac{Nu - 2}{F_T(B_T)} \quad (1.154)$$

où la fonction F est définie dans l'équation 1.143. Ainsi, l'équation 1.151 devient :

$$\dot{M} = 2\pi Nu^* \lambda_g r_p \frac{1}{c_{p,k}} \ln(1 + B_T) \quad (1.155)$$

B_T peut être lié au nombre de Spalding massique :

$$B_T = (1 + B_M)^\Phi - 1 \quad (1.156)$$

avec

$$\Phi = \frac{c_{p,k} Sh}{c_{p,g} Nu} Le_k \quad (1.157)$$

avec Le le nombre de Lewis qui compare la diffusion thermique à la diffusion massique pour l'espèce vapeur k :

$$Le_k = \frac{Sc_k}{Pr_k} \quad (1.158)$$

Dans le modèle de conduction infinie, la température est uniforme à tout instant dans la goutte. Ainsi,

$$T_s = T_p \quad (1.159)$$

Le bilan d'énergie sur la particule permet d'obtenir :

$$m_p c_{p_p} \frac{dT_p}{dt} = \dot{Q}_g + \dot{m}_p L_v(T_s) = \dot{Q}_p \quad (1.160)$$

Ainsi, il est possible d'obtenir en utilisant la définition du nombre de Spalding thermique

$$\dot{Q}_p = -\dot{m}_p \frac{c_{p,k}}{B_T} \left(T_g - T_s - \frac{B_T L_v(T_s)}{c_{p,v}} \right) \quad (1.161)$$

1.4.4 Échange entre le gaz et la phase dispersée

Comme vu précédemment, le gaz exerce une force de traînée sur les particules. En réaction, les particules exercent une force opposée sur le gaz. Résoudre complètement la force exercée par la particule demanderait de résoudre complètement l'interface entre le gaz et la particule, ce qui est très coûteux et n'est pas réalisé dans l'approche lagrangienne présentée ci-contre.

Pour approcher la force exercée par la particule sur le gaz, une décomposition multipolaire peut être effectuée pour un écoulement de Stokes. Pour plus de détails, il est possible de se référer à Maxey et Pattel [88] ou Saffman [117]. En arrêtant cette décomposition au premier ordre, on obtient l'approximation du point source :

$$\mu \frac{\partial^2 u_i}{\partial x_i^2} - \frac{\partial p}{\partial x_i} = - \sum_{n=1}^{N_p} F_{p,i} \delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}_p) \quad (1.162)$$

Avec cette approximation, chaque particule est vue comme un point et sa contribution est représentée par une distribution de Dirac centrée sur le centre de gravité de la particule. Cette approximation est valide pour calculer les perturbations loin de la particule par rapport à son rayon. Ainsi, dans une simulation numérique, cette approximation est valide si les cellules du maillage sont bien plus grandes que les particules. Elle permet de reproduire exactement le champ de vitesse autour d'une sphère en régime de Stokes au delà de son rayon.

Dans le cadre de cette approximation, le terme source de masse provenant de l'évaporation des particules peut être écrit :

$$s_{m,k}^{p-f} = - \sum_{p=1}^N \dot{M}_p \delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}_p) \delta_{kv} \quad (1.163)$$

avec :

- N le nombre de particules dans la cellule.
- δ_{kv} le symbole de Kronecker pour dire que l'évaporation affecte uniquement l'espèce vapeur v .

Le terme source de quantité de mouvement peut être écrit :

$$s_{v,i}^{p-f} = - \sum_{p=1}^N \left[\frac{dm_p}{dt} v_{p,i} + F_{p,i} \right] \delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}_p) \quad (1.164)$$

Le terme source d'énergie peut être écrit :

$$s_e^{p-f} = \sum_{p=1}^N \left[-F_{p,i} v_{p,i} - \dot{M}_p \left(L_{ev} + \frac{1}{2} v_{p,i}^2 \right) - Q_g \right] \delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}_p) \quad (1.165)$$

1.4.5 Interactions avec la turbulence

Dans cette partie une brève description des interactions pouvant exister entre la turbulence et la phase dispersée sera effectuée. Une revue plus complète a été effectuée par Balachandar et Eaton [7].

La phase dispersée interagit avec la turbulence de plusieurs manières. D'une part, les gouttes ont tendance à dissiper une partie de l'énergie cinétique turbulente à cause des frottements avec leurs surfaces. D'autre part, la formation de tourbillons dans le sillage des gouttes a tendance à augmenter la turbulence locale [15].

La turbulence peut également conduire à une ségrégation préférentielle des gouttes. Selon leur nombre de Stokes St les particules ne vont pas être affectées de la même manière. Le nombre de Stokes est défini comme un rapport du temps de relaxation des particules τ_p et d'un temps convectif représentatif de l'écoulement gazeux τ_c :

$$St = \frac{\tau_p}{\tau_c} \quad (1.166)$$

Les petites gouttes pour lesquelles $St \ll 1$ sont plus affectées par la turbulence. Ainsi, les petites gouttes ne peuvent pas pénétrer à l'intérieur des structures turbulentes alors que les grosses gouttes sont très peu affectées. Au final, les gouttes de petites tailles vont se retrouver en plus grande proportion dans des emplacements à faible vorticit   moyenne [7].

Les particules sont affect  es diff  remment par les diff  rentes   chelles de la turbulence. Dans le cadre d'une LES, les plus petites   chelles de la turbulence ne sont pas r  solv  es. Le r  le d'un mod  le LES d'interaction entre les particules et la turbulence est donc de mod  liser l'interaction des plus petites   chelles turbulentes avec la phase dispers  e. La mod  lisation de la dissipation par les particules aux   chelles non r  solv  es ainsi que la reconstruction des fluctuations de sous-maille doivent   tre effectu  es.

Dans cette th  se, aucun mod  le d'interaction avec la turbulence n'est utilis  . En effet, aucun mod  le LES n'  tait impl  ment   dans le code CEDRE au d  but de cette th  se et l'influence d'un tel mod  le a   t   jug   moins importante que celle du mod  le d'injection de la phase dispers  e et du mod  le de combustion en pr  sence d'une phase dispers  e. Ainsi, ces deux derniers mod  les ont   t   privil  gi  s.

1.4.6 Diam  tres caract  ristiques d'un spray

La granulom  trie d'un spray peut   tre caract  ris  e par des rapports de diff  rents moments de la distribution de taille   lev  s    une puissance permettant d'obtenir une   chelle de longueur. Ces moments

peuvent être décrits de façons discrète :

$$d_{mn} = \left(\frac{\sum_{i=1}^N d_{p,i}^m}{\sum_{i=1}^N d_{p,i}^n} \right)^{\frac{1}{m-n}} \quad (1.167)$$

ou décrits de façon continue si la fonction de densité de probabilité en taille $f(d_p)$ décrivant la probabilité de présence d'une particule de diamètre d_p est connue.

$$d_{mn} = \left(\frac{\int_0^\infty f(d_p) d_p^m dd_p}{\int_0^\infty f(d_p) d_p^n dd_p} \right)^{\frac{1}{m-n}} \quad (1.168)$$

Cette fonction est généralement inconnue et souvent approchée par des fonctions à deux paramètres, par exemple des distributions log-normale ou de Rosin-Rammler [6]. Le diamètre le plus utilisé est le diamètre moyen arithmétique d_{10} des gouttes. Pour N particules, il s'écrit :

$$d_{10} = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N d_{p,i} \quad (1.169)$$

Le diamètre moyen de Sauter noté d_{32} est souvent utilisé en pratique :

$$d_{32} = \frac{\sum_{i=1}^N d_{p,i}^3}{\sum_{i=1}^N d_{p,i}^2} \quad (1.170)$$

Le diamètre moyen de Sauter est un paramètre important pour l'évaporation du spray car il s'agit d'un rapport entre le volume moyen caractérisant les termes d'inertie et la surface moyenne caractérisant les échanges entre la goutte et le gaz.

Après cette description de quelques phénomènes liés à la présence d'une phase dispersée, la section suivante présentera les interactions entre la phase dispersée et la combustion.

1.5 Description et modélisation de la combustion diphasique

1.5.1 Combustion diphasique laminaire

1.5.1.a) Structure d'une flamme diphasique laminaire

La présence d'une phase liquide peut modifier la structure et les propriétés d'un front de flamme. Il est important de préciser que la combustion s'effectue toujours dans la phase gazeuse et jamais dans la goutte directement. En première approche, une comparaison d'échelles de temps caractéristiques d'évaporation des gouttes et de temps convectif de la phase porteuse est effectuée. Généralement, deux types de flammes diphasiques sont distingués lors de l'interaction d'un spray avec un front de flamme [140] :

- Les flammes homogènes : Dans ce régime, le temps d'évaporation des gouttes est inférieur aux temps de résidence des gouttes dans la zone dite de préchauffage.

$$\tau_{pch} = \frac{\delta_{pch}}{\bar{v}_p} \quad (1.171)$$

avec

- δ_{pch} l'épaisseur de la zone de préchauffage
- \bar{v}_p la vitesse moyenne des gouttes dans la zone de préchauffage.

Comme le temps d'évaporation est plus faible que le temps de préchauffage, les gouttes de carburant s'évaporent avant d'atteindre la zone de combustion. Les interactions entre spray et combustion sont donc limitées à l'apport de vapeur liée à l'évaporation des gouttes.

- Les flammes hétérogène : Dans ce régime, le temps d'évaporation des gouttes est inférieur au temps de résidence des gouttes dans la zone dite de préchauffage. Ainsi, le spray atteint la zone de réaction. Il existe deux types de flammes hétérogènes [124] :
 - Les flammes ancrées : Le mélange de gaz frais n'est pas saturé en amont du front de flamme. Selon les propriétés des gaz frais, une évaporation importante peut avoir lieu avant que les particules n'arrivent dans la zone de préchauffage (voir section 1.4). Ainsi la composition des gaz frais ne sera pas figée et la vitesse gazeuse dépendra de la distance entre l'injection des particules et le front de flamme. En effet, plus la distance parcourue est importante, plus la richesse gazeuse sera importante. Or, la vitesse de flamme dépend fortement de la richesse gazeuse.
 - Les flammes saturées : Le mélange de gaz frais est saturé en vapeur de carburant, par conséquent l'évaporation est figée. La composition du mélange est fixe et une vitesse de flamme peut être définie.

Une flamme laminaire diphasique possède une structure particulière. Silverman et al. [126] proposent de la décrire en 5 zones distinctes à partir d'une comparaison des temps caractéristiques d'évaporation et de convection par la phase gazeuse. Ces cinq zones sont visibles sur la figure 1.3 :

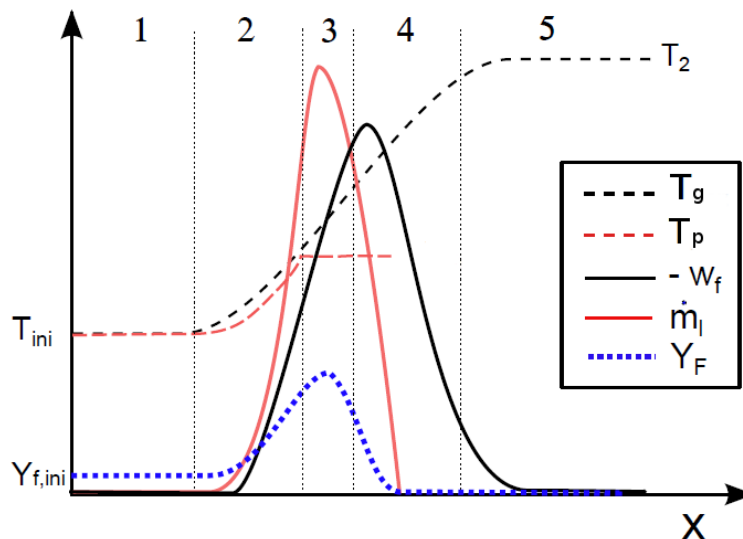


Figure 1.3 : Schéma d'une flamme laminaire 1D diphasique pour un mélange amont à richesse pauvre à saturation [19] : température du gaz T_g , du carburant liquide T_p , taux de réaction w_f , débit d'évaporation du carburant \dot{m}_l , fraction massique de carburant Y_F en fonction de la distance suivant x

1. Zone d'évaporation primaire : les gouttes s'évaporent si le mélange n'est pas saturé. Les termes de réactions chimiques peuvent être négligés.
2. Zone de préchauffage : la chaleur provenant du front de flamme chauffe les gouttes jusqu'à ce qu'elles atteignent la température d'ébullition. Les réactions chimiques peuvent y être négligés.
3. Zone de réaction homogène ou zone du front de flamme : une réaction de combustion a lieu entre l'oxydant et le carburant gazeux évaporé dans les zones précédentes. Cette zone est mince avec une épaisseur proche de celle d'un front de flamme purement gazeux.
4. Zone de combustion de gouttes : les gouttes qui ne s'étaient pas complètement évaporées avant le front de flamme continuent de s'évaporer et le gaz ainsi évaporé brûle au fur et à mesure dans un régime de combustion de goutte isolée.
5. Zone d'évaporation secondaire : si le mélange est riche, le défaut d'oxydant ne permet plus la combustion et les gouttes restantes s'évaporent dans les gaz brûlés.

1.5.1.b) Combustion de goutte isolée

La combustion d'une goutte isolée est le phénomène le plus élémentaire pour étudier la combustion diphasique. La goutte va s'évaporer partiellement, créant une couche de carburant gazeux à sa surface qui va diffuser sous l'effet des gradients de concentration de l'espèce vapeur. Une flamme de diffusion peut s'installer autour de la goutte, soit par auto-allumage si la température est suffisamment élevée, soit par propagation du front de flamme entourant une goutte voisine. Dans le cas d'un auto-allumage, un délai d'allumage correspondant au temps séparant l'arrivée de la goutte dans un environnement chaud et l'allumage de la goutte peut être mesuré [3]. Ce délai d'allumage peut être séparé en un délai physique incluant le temps de chauffage de la goutte, l'évaporation et la diffusion de vapeur de carburant et un délai chimique tenant compte du temps nécessaire à l'apparition de l'emballement des réactions chimiques.

Une présentation plus complète de la combustion de goutte isolée peut être trouvée dans la thèse de Paulhiac [103]. Un point intéressant est qu'en absence de modèle spécifique pour prendre en compte le phénomène de combustion de goutte isolée au sein d'une LES, ce phénomène risque d'être sous-résolu et les réactions chimiques risquent d'être sous-estimées. Si une petite goutte est présente dans la maille, la LES va prédire un taux d'évaporation et un taux de réaction volumique sur la maille. Mais en régime de combustion de goutte isolée, une combustion de sous-maille peut se produire avec un gradient de concentration de carburant différent de la concentration moyenne de carburant dans l'ensemble de la maille. Pour mieux résoudre le gradient de carburant proche de la goutte, on pourrait être tenté d'utiliser des mailles de plus petite taille. Mais l'approximation du point source effectuée dans l'approche lagrangienne nécessite des mailles bien plus grandes que le diamètre des gouttes pour rester valide. Pour prendre en compte ce phénomène de combustion de goutte isolée, Paulhiac a implémenté un modèle appelé Mustard qui remplace le modèle d'évaporation simple si la goutte est en situation de combustion de goutte isolée afin d'essayer de prendre en compte la différence locale de richesse autour de la goutte [103].

1.5.1.c) Régimes de combustion dans un spray

Comme décrit précédemment, la structure d'un front de flamme diphasique est conditionnée par l'évaporation du carburant. Ainsi, la structure du front de flamme est dépendante des paramètres fondamentaux pilotant l'évaporation, en particulier l'espace inter-gouttes (gradients de fraction massique de vapeur) et la température du gaz (pression de vapeur saturante à l'interface goutte-gaz). Par exemple, si la température du gaz est plus faible, le taux d'évaporation sera plus faible. Umemura et Takamori [132] proposent une classification des modes de propagation d'une flamme entre gouttes en fonction de la température du gaz adimensionnée par la chaleur latente d'évaporation et du rapport de l'espace inter-gouttes S sur le diamètre d de la particule. Cette classification a été réalisée à partir d'expériences en micro-gravité et de simulations numériques. Elle est visible sur la figure 1.4.

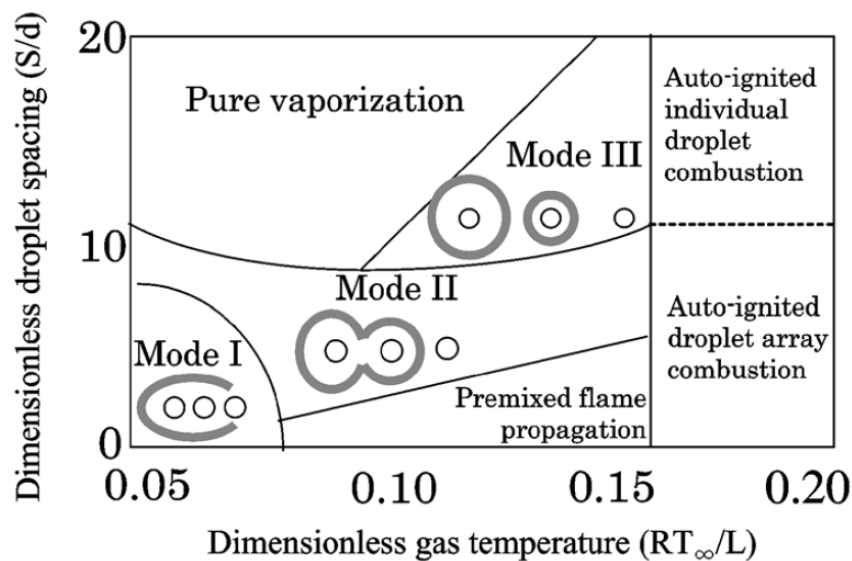


Figure 1.4 : Mode de propagation de flamme entre gouttes d'après Umemura et al. [132]

Si l'espace inter-gouttes est faible comparé au diamètre de flamme autour d'une goutte isolée, le front de flamme de diffusion va englober une goutte voisine. Ce front de flamme va causer une augmentation de température, qui va causer une augmentation de l'évaporation de cette goutte. Cette goutte va devenir une nouvelle source de carburant permettant à la flamme de diffusion d'englober d'autres gouttes. Ce comportement de flamme est appelée le mode I par Umemura et Takemori [132].

Si la température est plus importante, la pression de vapeur saturante va augmenter et l'évaporation sera suffisamment importante pour former un mélange de vapeur de carburant et d'oxydant à une richesse suffisante pour qu'une flamme de pré-mélange s'y propage. Cette flamme se propage comme une flamme de prémélange gazeuse, mais avec quelques différences. Le front de flamme est généralement plus épais à cause de la présence d'une zone de préchauffage et d'évaporation. La vitesse de flamme est également différente comparée à une vitesse de flamme purement gazeuse.

Si l'espacement inter-gouttes est plus important, la flamme autour d'une goutte ne va pas envelopper une autre goutte. Par contre, l'augmentation de température liée à l'approche du front de flamme peut être suffisante pour déclencher l'auto-allumage d'une goutte voisine. Cette goutte va être la

source d'une nouvelle flamme de diffusion qui peut ensuite fusionner avec la flamme de diffusion déjà présente. Ce mode de propagation est nommé le mode II par Umemura et Takemori [132].

Pour une grande distance inter-gouttes, les flammes de diffusion autour des gouttes ne peuvent pas fusionner. Chaque goutte est entourée d'une flamme de diffusion distincte. Dans ce cas, la flamme de diffusion va chauffer les gouttes voisines et provoquer leur auto-allumage. C'est ce qu'Umemura et Takemori nomment le mode III.

Ces différents modes de propagation de flammes entre gouttes vont provoquer différents régimes de combustion. Pour identifier le régime de combustion du spray, le nombre de combustion de groupe noté G est utilisé. Candel et al. [20] ont montré que l'expression analytique suivante est généralement valide :

$$G \approx 5N^{2/3} \frac{a_f}{l} = \frac{5N^{2/3}}{S} \quad (1.172)$$

avec N le nombre total de gouttes, a_f le diamètre de flamme d'une goutte isolée, l la distance entre gouttes et $S = a_f/l$ le nombre de séparation évaluant la distance entre les gouttes du nuage.

Une illustration des différents régimes de combustion pouvant apparaître suivant la valeur de G est fournie par Annamalai et Ryan [5] et peut être observée sur la figure 1.5.

La figure 1.6 est un schéma de la classification des différents régimes de combustion en fonction du nombre de combustion de groupe G , du nombre de gouttes N et du nombre de séparation S .

- Pour un grand nombre de séparation S , c'est-à-dire pour un nuage de gouttes très espacées les unes avec les autres, un régime de combustion de gouttes isolées peut être observé. Ce régime peut également être délimité par des valeurs de G inférieures à 0.01.
- Quand la valeur de G augmente, ou autrement dit quand S diminue, une combustion de groupe commence à apparaître à cause de l'espace plus restreint entre les gouttes. Pour $0.01 < G < 0.1$, une combustion de groupe interne est présente. Un coeur de gouttes non brûlées est présent à l'intérieur du spray. Ce coeur est entouré par une flamme de diffusion. Les gouttes en dehors du coeur brûlent en régime de combustion de gouttes isolées.
- Pour $0.1 < G < 100$, un régime de combustion de groupe externe est observé. Le nuage est suffisamment dense pour que le front de flamme ne puisse pas exister au coeur du nuage.
- Pour $G > 100$, le nuage de gouttes est suffisamment dense pour qu'au coeur du nuage les gouttes ne s'évaporent pas. Dans ce cas, seules les gouttes situées près de la surface de flamme s'évaporent et contribuent à l'apport de carburant de la combustion.

Dans cette partie, des différences de comportement entre une flamme monophasique et une flamme diphasique ont été décrites. Dans le cas d'un écoulement diphasique, de nouveaux régimes de combustion apparaissent. Dans la prochaine partie, les interactions avec la turbulence seront décrites.

1.5.2 Combustion diphasique turbulente

Plusieurs études ont été menées afin de caractériser la dynamique d'une flamme diphasique turbulente. Réveillon et Vervisch [113] ont effectué des simulations de la combustion d'un spray dans un jet faiblement turbulent. Ces simulations étaient des DNS couplées avec un solveur lagrangien pour la

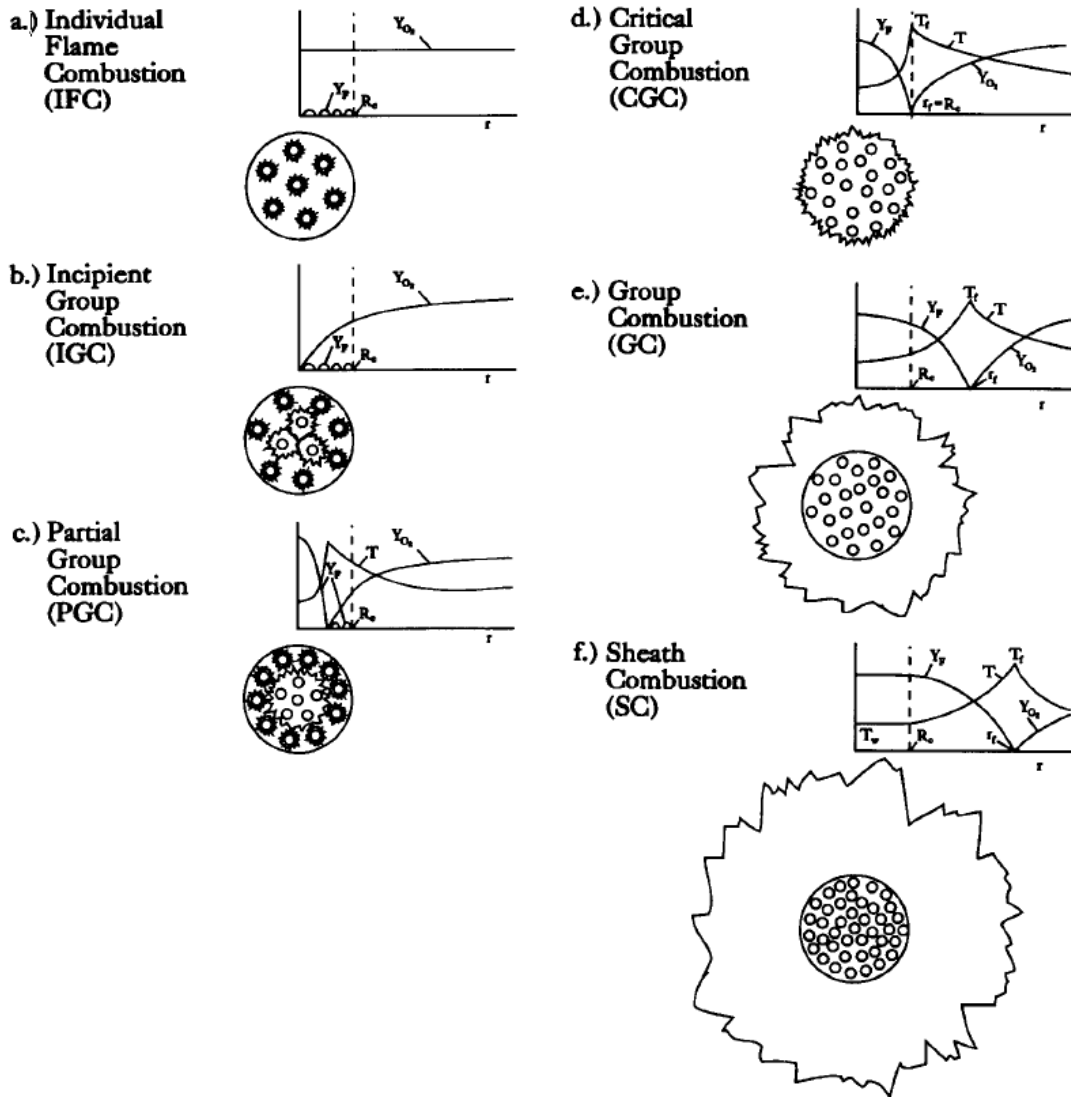


Figure 1.5 : Dénomination des régimes de combustion de groupe [5] et illustrations du profil de température et d'espèces

phase liquide. La richesse initiale et la dilution du spray ont été variées afin d'analyser leur influence sur les régimes de combustion. Trois régimes principaux ont été identifiés :

- Le régime de combustion externe présente un front de flamme continu. Il peut être subdivisé en deux sous-régimes. Dans une combustion externe fermée, un seul front de flamme englobe l'ensemble des gouttes. Dans une combustion externe ouverte, deux zones de réactions se forment de part et d'autre du jet central.
- Le régime de combustion de groupe présente plusieurs fronts de flamme. Les gouttes forment des groupes dont la combustion s'effectue séparément.

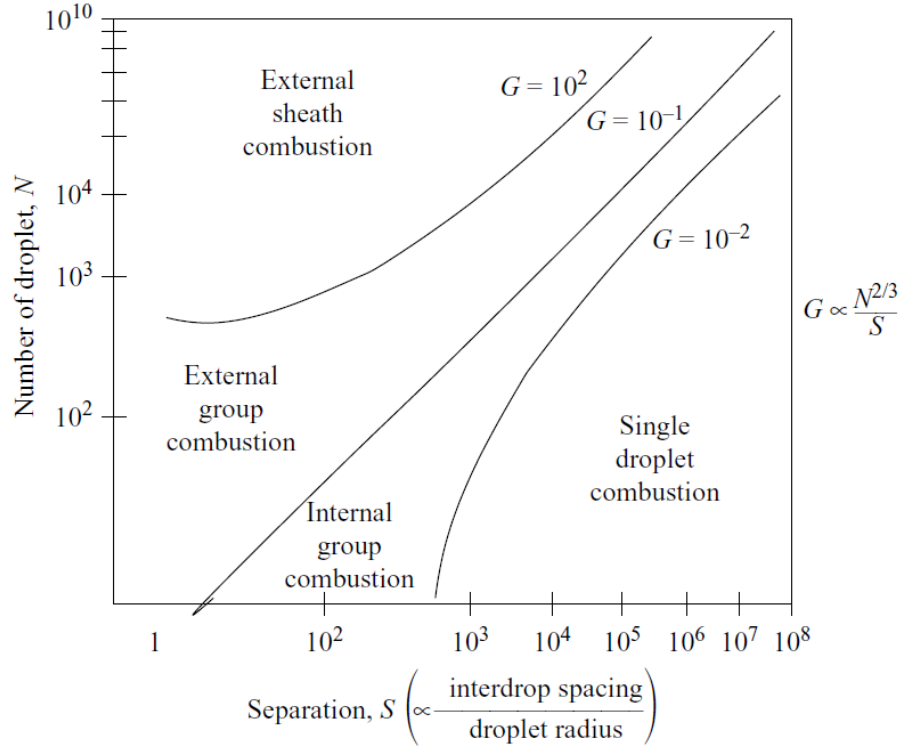


Figure 1.6 : Régimes de combustion en fonction du nombre de combustion de groupe G , du nombre de gouttes N et du nombre de séparation S tiré de Réveillon et Vervisch [113] d'après Chigier [26] et Kuo [67]

- Le régime de combustion hybride présente des caractéristiques des deux régimes précédents. Plusieurs groupes de flammes prémélangées sont présents mais les flammes de diffusion forment deux fronts de flamme continus de part et d'autre du jet.

Ces différents régimes sont représentés de manière schématique sur la figure 1.7. Il est possible de remarquer que l'on retrouve une classification proche de celle des régimes de combustion laminaire dans un spray vu dans la section 1.5.1.c).

Pour déterminer quels régimes sont privilégiés, plusieurs paramètres doivent être considérés :

- Le rapport du temps d'évaporation τ_v sur le temps caractéristique de la flamme τ_f : τ_v/τ_f . Ces temps caractéristiques sont définis pour le temps d'évaporation par :

$$\tau_v = \frac{S_c}{4Sh_c} \frac{1}{\ln(B_0 + 1)} \frac{\rho_p s_0}{\pi \mu} \quad (1.173)$$

avec S_c le nombre de Schmidt, Sh_c le nombre de Sherwood, s_0 la surface de la goutte, μ la viscosité, B_0 le nombre de Spalding massique évalué pour des conditions infini à $T = T_b$, $Y_{g,k}^\infty = 0$ avec T_b la température adiabatique de flamme à la stoechiométrie.

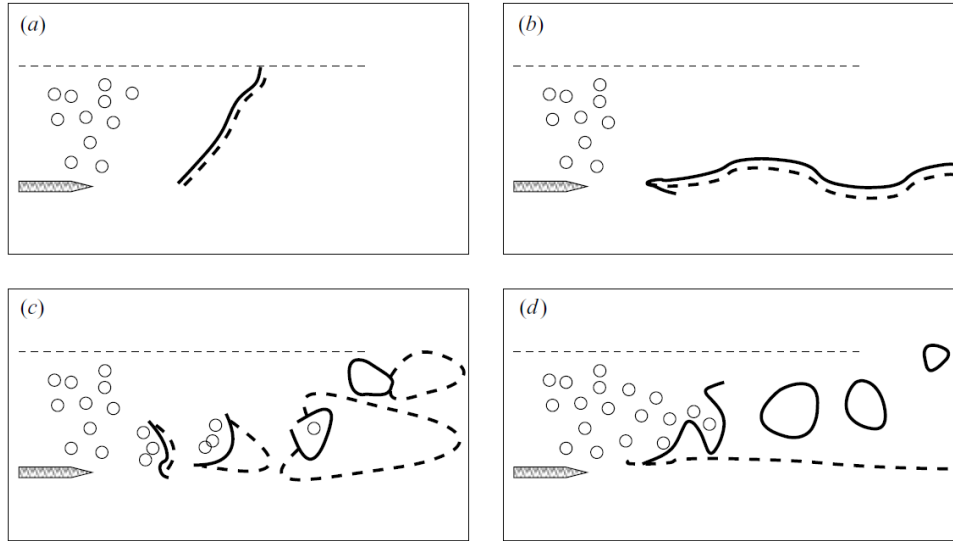


Figure 1.7 : Différents régimes de combustion par Réveillon et Vervisch [113]. Trait pointillé : flamme de diffusion. Trait plein : flamme de prémélange. (a) Combustion externe fermée, (b) combustion externe ouverte, (c) combustion de groupe, (d) combustion hybride

et pour le temps caractéristique de la flamme par :

$$\tau_f = \frac{\nu}{S_l^2} \quad (1.174)$$

avec S_l la vitesse de la flamme laminaire à la stoechiométrie

- Le rapport de la distance entre gouttes δ_s sur l'épaisseur de flamme δ_f : δ_s/δ_f définies par

$$\delta_f = \frac{Re_f \nu}{S_l} \quad (1.175)$$

avec Re_f le nombre de Reynolds de la flamme, d'une valeur de 4 dans ces simulations. δ_s est inversement proportionnel à la dilution du spray d^I :

$$\delta_s \propto \frac{1}{d^I} = \frac{\delta_f^3}{N} \quad (1.176)$$

avec N le nombre de gouttes

- La richesse du jet ϕ_{LO}^I

Un diagramme représentant les différents régimes de combustion en fonction de ces paramètres a été élaboré par Réveillon et Vervisch [113] et est visible sur la figure 1.8. Si le temps d'évaporation est très faible par rapport au temps caractéristique de la flamme, alors les gouttes seront évaporées avant d'atteindre le front de flamme. Pour des mélanges pauvres, une combustion externe fermée est observée. Quand le mélange devient légèrement riche, un régime de combustion de groupe où des poches de carburant sont brûlées apparaît. Si la richesse est plus importante, suffisamment de

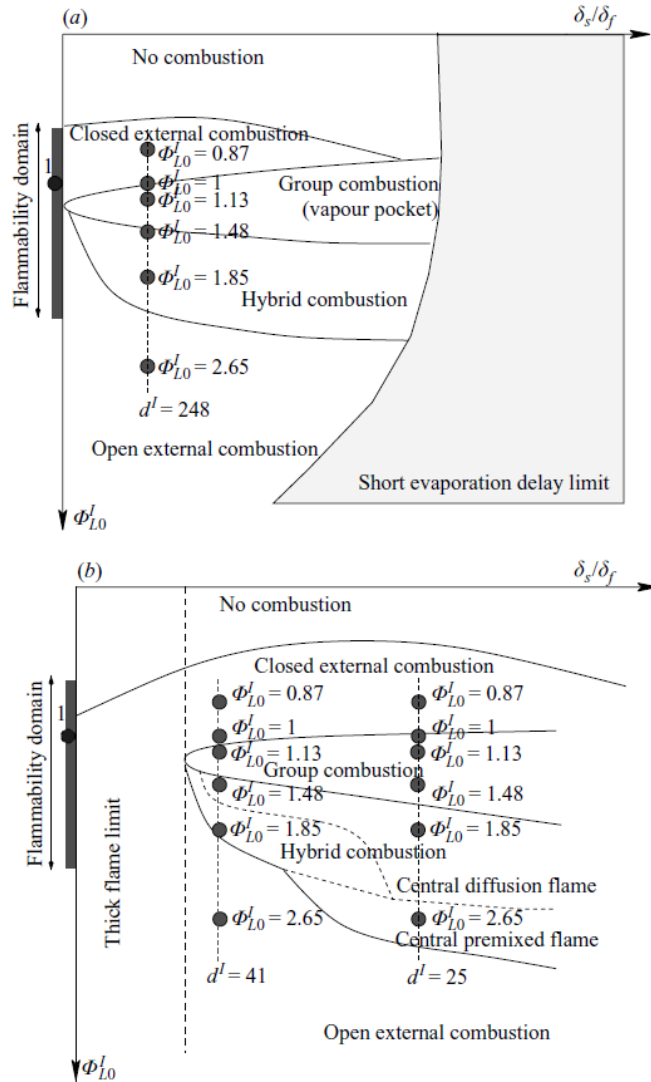


Figure 1.8 : Diagramme des régimes de combustion par Réveillon et Vervisch [113] pour différents temps d'évaporation : (a) très faible temps d'évaporation comparé au temps de flamme, (b) temps d'évaporation légèrement plus faible que le temps de flamme.

carburant sera présent pour produire une flamme de diffusion de part et d'autre du jet en plus de la combustion des poches de gaz. Dans ce cas, on observe une combustion hybride. Pour des mélanges très riches, aucune flamme ne peut se propager au coeur du jet. Par contre, deux fronts de flamme se forment de part et d'autre du jet : c'est le régime de combustion externe ouverte.

Si le temps d'évaporation est légèrement plus faible que le temps caractéristique de flamme, certaines gouttes peuvent atteindre le front de flamme et complexifier les interactions spray-flamme. Les mêmes régimes que précédemment peuvent être observés mais la structure de la flamme sera moins uniforme à cause de la perturbation du front de flamme par la traversée de gouttes.

Dans la prochaine section, le code de calcul et les méthodes numériques utilisés dans cette thèse

seront brièvement présentés.

1.6 Présentation du code CEDRE

CEDRE est une plateforme de calcul constituée d'un solveur Navier-Stokes multi-espèces et multiphasique compressible appelé CHARME, d'un solveur phase dispersée lagrangien nommé SPARTE, d'un solveur phase dispersée eulérien SPIREE, d'un solveur pour les films liquides appelé FILM, d'un solveur de conduction thermique ACACIA ainsi que de deux solveurs de rayonnement, l'un basé sur la méthode des ordonnées discrètes appelée REA et l'autre sur la méthode de Monte-Carlo appelé ASTRE. Ses applications principales concernent l'énergétique et la propulsion. Par la suite, on présentera les deux solveurs utilisés dans cette thèse, le solveur eulérien CHARME et le solveur lagrangien pour la phase dispersée SPARTE.

Le code CEDRE utilise des maillages non structurés avec des éléments polyédriques quelconques. L'utilisation d'éléments quelconques permet une grande souplesse dans le maillage de géométrie complexes. Par ailleurs, des fonctionnalités de déformations de maillages et d'intersections de maillages conservatives sont présentes dans les solveurs eulériens de CEDRE.

1.6.1 Le solveur CHARME

CHARME est le solveur eulérien principal de CEDRE. Il résout les équations de Navier-Stokes ou d'Euler compressibles dans un mélange multi-espèces et multiphasique. Ici, seul le cas d'un mélange ne contenant qu'une seule phase sera présenté. Le lecteur est renvoyé au manuel théorique CEDRE pour plus de détails [100].

1.6.1.a) Discrétisation spatiale

Pour réaliser la discrétisation spatiale des équations, CHARME utilise une méthode volume finis. Cette approche est couramment utilisée en mécanique des fluides. Dans cette approche, des bilans des quantités conservées sont effectués sur chaque volume de contrôle du maillage. Dans la formulation cell-centered utilisée dans CHARME, les volumes de contrôle correspondent aux cellules du maillage.

Un bilan des quantités conservées q peut être effectuée sur une cellule V_i :

$$\int_{V_i} \frac{\partial q}{\partial t} d\bar{\omega} = - \int_A (\mathbf{f} + \boldsymbol{\phi}) \cdot \mathbf{n} d\sigma + \int_{V_i} S d\bar{\omega} \quad (1.177)$$

avec :

- V_i le volume de la cellule où l'on effectue le bilan
- q les quantités conservées du gaz :

$$q = \begin{bmatrix} \rho \mathbf{Y} \\ \rho \mathbf{u} \\ \rho e_t \end{bmatrix} \quad (1.178)$$

avec :

- ρ la masse volumique
- \mathbf{Y} les fractions massiques des différentes espèces
- \mathbf{u} la vitesse
- e_t l'énergie totale
- A la surface de la cellule i
- \mathbf{f} la densité de flux hyperbolique ou Euler :

$$\mathbf{f} = \begin{bmatrix} \rho \mathbf{u} \mathbf{Y} \\ \rho \mathbf{u} \otimes \mathbf{u} + p \mathbf{I} \\ \rho \mathbf{u} e_t + p \mathbf{u} \end{bmatrix} \quad (1.179)$$

avec :

- \mathbf{I} la matrice identité
- p la pression
- ϕ la densité de flux diffusifs ou Navier-Stokes :

$$\phi = \begin{bmatrix} -\mathbf{J} \\ -\boldsymbol{\tau} \\ \mathbf{q}_c + \sum_k h_k \mathbf{J}_k - \boldsymbol{\tau} \cdot \mathbf{u} \end{bmatrix} \quad (1.180)$$

avec :

- \mathbf{J} le flux de diffusion d'espèce
- $\boldsymbol{\tau}$ le tenseur des contraintes visqueuses
- \mathbf{q}_c le flux de chaleur
- $\sum_k h_k \mathbf{J}_k$ les flux d'enthalpies partielles
- $\boldsymbol{\tau} \cdot \mathbf{u}$ la puissance des forces visqueuses
- \mathbf{n} la normale à la surface
- S les sources volumiques

Pour réaliser l'interpolation spatiale des flux hyperboliques, une méthode MUSCL (Monotonic Upstream Schemes for Conservative Laws) d'ordre 2 [135] est employée. Dans cette méthode, un schéma décentré résout le problème de Riemann de manière approchée. Dans cette thèse, un schéma de Roe [116] est utilisé. Un limiteur de type Van Leer [133] a été employé afin de limiter les gradients moyens de maille pour éviter des solutions non physiques de type choc de détente. Les méthodes MUSCL sont instables si les cellules ne possèdent pas assez de voisins [59]. Pour remédier à ce problème, une méthode de reconstruction stable des gradients qui élargit l'interpolation au deuxième voisinage de la cellule, c'est-à-dire aux cellules voisines des cellules voisines, a été employée. Plus d'informations sur cette méthode sont disponibles dans la thèse d'Haider [59]. Les flux diffusifs sont directement calculés à partir des valeurs évaluées aux interfaces. Des schémas d'interpolation spatiale d'ordre 3 et 4 ont été implémentés par Haider [60], mais leur utilisation reste pour l'instant limitée à des cas académiques (convection de gaussiennes, Taylor-Green Vortex, Turbulence Homogène Isotrope, etc.). Ainsi, ils n'ont pas pu être utilisés dans le cadre de cette thèse.

1.6.1.b) Discrétisation temporelle

L'interpolation temporelle est appliquée sur les équations discrétisées spatialement. Elle peut être exprimée par l'équation suivante :

$$MQ = F(Q, \nabla Q, t) \quad (1.181)$$

avec :

- M la matrice de masse. Il s'agit d'une matrice diagonale par blocs contenant les volumes V_i des cellules i .
- Q la matrice colonne des quantités conservées pour l'ensemble des cellules
- F contient la somme des flux Euler et Navier-Stokes et des termes sources

La discrétisation temporelle consiste à remplacer la solution exacte $Q(t)$ par une suite de valeurs discrètes à différents instants. Pour obtenir la solution Q^{n+1} à un instant t^{n+1} , il faut avancer temporellement la solution Q^n en évaluant la relation suivante :

$$M \frac{Q^{n+1} - Q^n}{\Delta t} = \frac{1}{\Delta t} \int_{t^n}^{t^{n+1}} F(Q, \nabla Q, t) dt \quad (1.182)$$

avec $\Delta t = t^{n+1} - t^n$

Deux grandes familles de méthodes de discrétisation temporelle existent : les méthodes implicites et les méthodes explicites. Dans une méthode explicite, la solution au temps $n+1$ est obtenue directement à partir de la solution au temps n . Un exemple de schéma explicite sont les méthodes de Runge-Kutta. Dans ces méthodes, un certain nombre d'états intermédiaires sont évalués avant de calculer la solution au temps $n+1$:

$$Q^{(1)} = Q^n \quad (1.183)$$

$$Q^{(2)} = Q^n + \Delta t \alpha_2 H(Q^{(1)}) \quad (1.184)$$

$$Q^{(3)} = Q^n + \Delta t \alpha_3 H(Q^{(2)}) \quad (1.185)$$

$$Q^{(K)} = Q^n + \Delta t \alpha_K H(Q^{(K-1)}) \quad (1.186)$$

$$Q^{n+1} = Q^n + \Delta t \sum_{k=1}^K \beta_k H(Q^{(k)}) \quad (1.187)$$

avec

$$\sum_{k=1}^K \beta_k = 1 \quad (1.188)$$

$H(Q^{(k)})$ est une fonction de $Q^{(k)}$ indépendante du temps. Le principal inconvénient des schémas explicites est la limitation du pas de temps utilisable par la condition CFL (Courant-Friedrichs-Lewy). Pour que ces méthodes restent stables, le pas de temps doit respecter la condition suivante :

$$\Delta t < CFL \frac{\Delta x}{|u| + c} \quad (1.189)$$

avec

- Δt le pas de temps
- Δx la taille de la maille
- CFL un nombre dépendant du schéma utilisé, généralement inférieur à 1 pour un schéma explicite
- u la vitesse du gaz
- c la vitesse du son dans le gaz.

Dans une méthode implicite, la solution au temps $n + 1$ nécessite le temps n et $n + 1$. Un exemple de ces méthode est le θ -schéma :

$$M \frac{Q^{n+1} - Q^n}{\Delta t} = F[\theta Q^{n+1} + (1 - \theta)Q^n] \quad (1.190)$$

avec θ un nombre compris entre 0 et 1. Pour résoudre cette équation, on commence par linéariser le second membre de l'équation afin de pouvoir résoudre plus facilement le système. L'équation du θ -schéma peut être écrite :

$$(M - \theta \Delta t J^n) \frac{Q^{n+1} - Q^n}{\Delta t} = F(Q^n) \quad (1.191)$$

avec J^n la matrice jacobienne des seconds membres :

$$J^n = \left(\frac{\partial F}{\partial Q} \right)_n \quad (1.192)$$

Ensuite, la matrice jacobienne est approximé à l'ordre 1. Enfin, le système linéaire est résolu de manière itérative par des méthodes GMRES ou BICG (Bi-Conjugate Gradient).

Les méthodes implicites ont une gamme de stabilité élargie : leur nombre de CFL est généralement largement supérieur à 1.

Dans cette thèse, une méthode de RKI2 (Runge-Kutta implicite d'ordre 2) et une méthode RK3 (Runge-Kutta d'ordre 3) sont employées. Il est très difficile d'impliciter les termes sources lagrangiens liés à la rétroaction des particules sur le gaz. Ainsi, quand les réactions chimiques deviennent importantes et que la température du gaz augmente, les termes sources lagrangiens deviennent significatifs et une méthode explicite est employée pour l'avancement en temps.

1.6.1.c) Loi de paroi

Dans le solveur CHARME, les lois de paroi reviennent à évaluer un coefficient α qui relie le frottement au paroi τ_w aux grandeurs au centre de la première maille indicée avec 1.

$$\tau_w = \left(\mu \frac{\partial u}{\partial y} \right)_w = (1 + \alpha) \mu \frac{u_1}{y_1} \quad (1.193)$$

Le coefficient α permet de tenir compte du fait que y_1 peut se trouver dans n'importe quelle région interne de la couche limite, aussi bien dans la sous-couche visqueuse que dans la zone logarithmique. Dans cette thèse, la loi suivante est utilisée pour décrire α :

$$\alpha = \frac{f_c}{1 + f_c} \left(\frac{Re_\Delta}{447} \right)^{0.825} \quad (1.194)$$

avec

$$f_c = \frac{Re_\Delta}{80} + \left(\frac{Re_\Delta}{120} \right)^2 \quad (1.195)$$

et

$$Re_\Delta = \frac{u_1 \Delta}{\nu} \quad (1.196)$$

avec Δ la taille de la maille.

1.6.2 Le solveur SPARTE

SPARTE est le solveur lagrangien décrivant une phase dispersée dans CEDRE. Ce solveur utilise une approche lagrangienne stochastique pour décrire l'évolution d'un brouillard de gouttes.

L'évolution des gouttes est décrite par les équations suivantes pour l'évolution de la position :

$$\frac{dx_{p,i}}{dt} = v_{p,i} \quad (1.197)$$

avec

- $x_{p,i}$ la position de la particule selon l'axe i
- $v_{p,i}$ la vitesse de la particule selon l'axe i

l'évolution de la vitesse :

$$\frac{dv_{p,i}}{dt} = \frac{u_{g@p,i}(x_{p,i}, t) - v_{p,i}}{\tau_p} + g_i \quad (1.198)$$

avec

- $u_{g@p,i}(x_{p,i}, t)$ la vitesse du gaz à la position de la particule
- τ_p le temps d'équilibre des particules défini par :

$$\tau_p = \frac{8\rho_p r_p}{3C_d(Re_p)\rho_g \|\mathbf{U}_{g@p} - \mathbf{v}_p\|} \quad (1.199)$$

avec $C_d(Re_p)$ défini dans les équations 1.127 et 1.128.

- g_i la composante selon l'axe i de la gravité

l'évolution du rayon :

$$\frac{dr_p^2}{dt} = -K_{ev} \quad (1.200)$$

avec

- r_p le rayon de la particule
- K_{ev} la constante d'évaporation définie comme :

$$K_{ev} = \frac{\mu_g Sh}{\rho_p Sc} \ln(1 + B_M) \quad (1.201)$$

avec

- μ_g la viscosité du gaz
- Sh le nombre de Sherwood
- ρ_p la masse volumique de la particule
- Sc le nombre de Schmidt
- B_M le nombre de Spalding massique

l'évolution de la température :

$$\frac{dT_i}{dt} = \frac{T_g - T_i}{\tau_c} \quad (1.202)$$

avec

- T_i la température de la particule i
- T_g la température du gaz à la position de la particule
- τ_c le temps de chauffage de la particule défini comme :

$$\tau_c = \frac{2r_p^2 c_{p,p} \rho_p}{3Nu\lambda_g} \quad (1.203)$$

avec

- $c_{p,p}$ la chaleur massique à pression constante de la particule
- Nu le nombre de Nusselt
- λ_g la conductivité thermique dans le gaz

Plus de détails peuvent être trouvés dans la section 1.4.

Le schéma temporel utilisé dans SPARTE est un schéma du premier ordre. En notant Δt le pas de temps, on obtient :

$$\mathbf{x}_i^{n+1} = \mathbf{x}_i^n + \Delta t(\mathbf{u}_g)_i + (\tau_p)_i^n (1 - \alpha_i^n)[\mathbf{v}_i^n - (\mathbf{u}_g)_i] + (\tau_p)_i^n [\Delta t - (1 - \alpha_i^n)(\tau_p)_i^n]g \quad (1.204)$$

$$\mathbf{v}_i^{n+1} = (\mathbf{u}_g)_i + \alpha_i^n[\mathbf{v}_i^n - (\mathbf{u}_g)_i] + (\tau_p)_i^n (1 - \alpha_i^n)g \quad (1.205)$$

$$T_i^{n+1} = (T_g)_i^n + \beta_i^n [T_i^n - (T_g)_i^n] \quad (1.206)$$

$$r_i^{n+1} = [\min(0, (r_i^n)^2 - \Delta t(K_{ev})_i^n)]^{1/2} \quad (1.207)$$

avec

$$\alpha_i^n = \exp\left(-\frac{\Delta t}{(\tau_p)_i^n}\right) \quad (1.208)$$

$$\beta_i^n = \exp\left(-\frac{\Delta t}{(\tau_c)_i^n}\right) \quad (1.209)$$

Les propriétés du gaz à la position des particules sont obtenues par une interpolation linéaire prenant en compte les valeurs dans les cellules voisines de la cellule où se situe la particule.

$$\mathbf{u}_{g@p}(\mathbf{x}_p, t) = \mathbf{u}_g(\mathbf{x}, t) + \nabla \mathbf{u}_g(\mathbf{x}_p - \mathbf{x}) \quad (1.210)$$

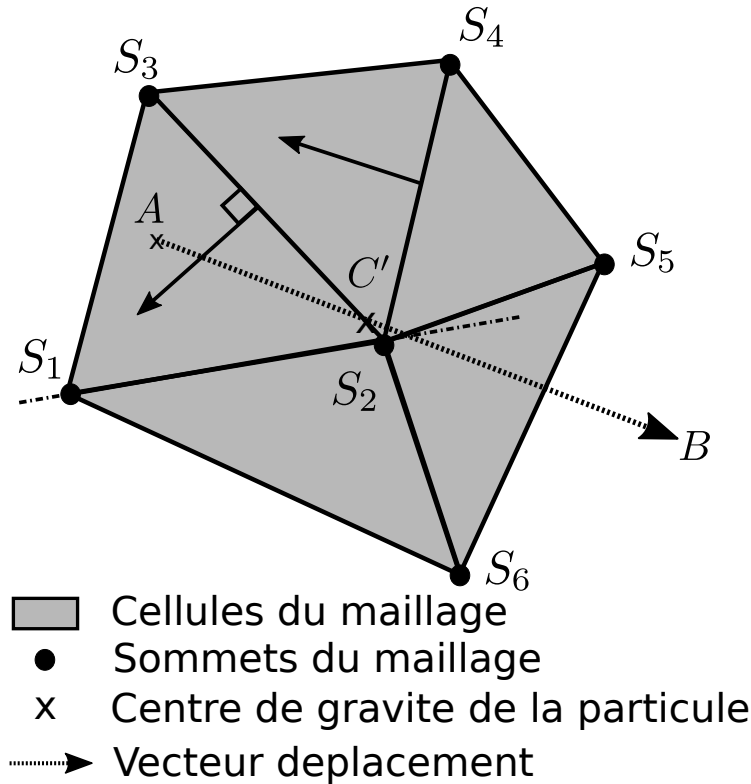


Figure 1.9 : Schéma de la trajectoire d'une particule dans un maillage

avec \mathbf{x} la position du centre de la maille.

La cellule où se situe la particule est obtenue par un algorithme de localisation des particules. Les différentes notations utilisées dans les explications sont visibles sur le schéma 1.9. Premièrement, le produit scalaire entre le vecteur déplacement de la particule \mathbf{x}_{AB} et les normales entrantes des faces de la maille où se trouvait la cellule est calculée.

$$\mathbf{x}_{AB} \cdot \mathbf{n}_{S_2S_3} < 0 \quad (1.211)$$

Si l'un des produits scalaires est négatif, il faut vérifier si le vecteur déplacement intersecte la face correspondante soit S_2S_3 dans notre exemple. Pour cela, la droite \mathbf{x}_{AB} est représenté sous une forme paramétrique :

$$\mathbf{x} = \mathbf{x}_A + f\mathbf{x}_{AB} \quad (1.212)$$

On recherche le paramètre f tel que le point de la droite AB intersecte le plan formé par S_2S_3 . Ce point est nommé C' dans notre exemple. Si $0 < f < 1$, alors la particule sort de la cellule. Si $f > 1$, alors la particule reste dans la cellule. Il reste à vérifier que le point C' appartient bien à S_2S_3 . Pour ce faire, on vérifie que :

$$\mathbf{x}_{S_2C'} \cdot \mathbf{x}_{S_2S_3} < 1 \quad (1.213)$$

Si tel est le cas, la particule sort de la cellule au point C' pour aller dans la cellule voisine partageant la face S_2S_3 . Le type de la face S_2S_3 est déterminé. Si la face est une face interne, on recommence les mêmes opérations dans la cellule voisine. Si la face est une frontière de partitions, les informations

sur la trajectoire de la particule sont stockées et envoyées au processeur voisin qui recommence les opérations de l'algorithme. Si la face est une sortie, la particule sort du domaine de calcul. Si la face est une paroi, le comportement de la particule dépend du modèle d'interaction au paroi. La particule peut rebondir sur la paroi ou être déposée sur la paroi. jusqu'à ce qu'aucun point d'intersection ne soit trouvé. À ce moment, la maille contenant la position d'arrivée de la particule a été déterminée.

Différents modèles d'interaction entre une particule et une paroi sont disponibles dans le solveur SPARTE. Le modèle de paroi avec rebond est principalement adapté pour des particules solides. Deux sous-modèles peuvent être utilisés : le modèle de rebond inélastique et le modèle de rebond fusant. Dans le modèle de rebond inélastique, les composantes normales et tangentielles \mathbf{v}_i^n et \mathbf{v}_i^t de la vitesse \mathbf{v}'_i de la particule i après collision sont obtenues par les relations suivantes pour une paroi fixe :

$$\mathbf{v}_i^n = -(e_n \mathbf{v}_i \cdot \mathbf{n}_f) \mathbf{n}_f \quad (1.214)$$

$$\mathbf{v}_i^t = e_t (\mathbf{v}_i - \mathbf{v}_i^n) \quad (1.215)$$

avec

- e_n le coefficient de restitution normal
- \mathbf{n}_f la normale au point de collision
- e_t le coefficient de restitution tangentiel
- \mathbf{v}_i la vitesse de la particule i avant la collision

Dans le modèle de rebond fusant, la particule rebondit suivant un angle aléatoire compris entre une valeur minimale et maximale à spécifier. La norme de la vitesse après le rebond v'_i est obtenue par la relation suivante :

$$v'_i = \sqrt{\xi} v_i \quad (1.216)$$

avec ξ le coefficient de restitution énergétique.

Dans le modèle de paroi avec dépôt, les particules disparaissent du calcul après contact avec la paroi. Un couplage avec le solveur FILM peut être effectué pour résoudre le film liquide formé en paroi.

Le modèle de paroi complexe mis au point par Garcia-Rosa [51] permet de prendre en compte de manière plus réaliste l'interaction d'une goutte avec la paroi. Suivant les paramètres de l'impact, un rebond, un dépôt ou un éclaboussement peuvent être observés. Une température de paroi adimensionnée T^* est utilisée dans ce modèle :

$$T^* = \frac{T_W - T_B}{T_L - T_B} \quad (1.217)$$

avec

- T_W la température de la paroi
- T_B la température d'ébullition
- T_L la température de Leidenfrost

Le nombre de Mundo-Sommerfeld-Tropea K est utilisé pour caractériser la collision :

$$K = WeOh^{-0.4} \quad (1.218)$$

avec

- We le nombre de Weber pour la vitesse normale d'impact à la paroi :

$$We = \frac{\rho_i \|\mathbf{v}_i \cdot \mathbf{n}_f\| d_p}{\sigma_i} \quad (1.219)$$

avec σ_i la tension de surface de la particule

- Oh le nombre d'Ohnesorge :

$$Oh = \sqrt{\frac{\mu_i}{\rho_i d_i \sigma_i}} \quad (1.220)$$

Les différents régimes peuvent être classés en fonction de T^* et K comme visibles sur la figure 1.10. Le régime de rebond utilise un modèle de rebond fusant. Dans le régime d'éclaboussement, la goutte

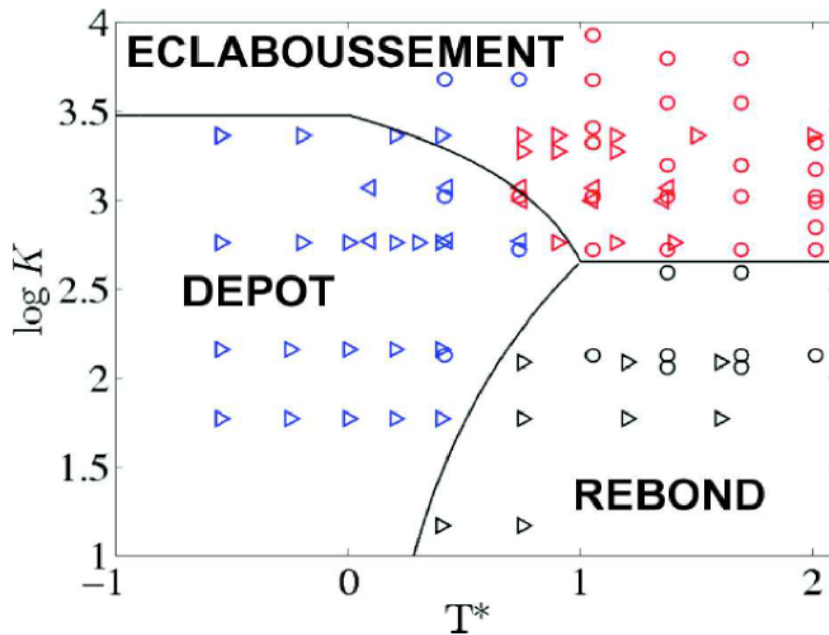


Figure 1.10 : Classification des régimes d'interaction goutte paroi en fonction de la température adimensionnée T^* et du nombre K [51]

est fragmentée en plusieurs gouttes plus petites selon une distribution log-normale.

Deuxième partie

Modèles pour la simulation de l'allumage

Chapitre 2

Dépôt d'énergie et expansion de noyaux de flamme dans un écoulement laminaire

Dans ce chapitre, on veut évaluer la capacité d'une méthode simplifiée de dépôt d'énergie à reproduire l'expansion du noyau de flamme à la suite d'un allumage par bougie électrique.

La première étape consiste à présenter les phénomènes se produisant pendant un allumage par bougie. Ensuite, une présentation de différents modèles existants pour représenter ces phénomènes est effectuée. Cette présentation permet de justifier le choix de l'utilisation d'une méthode de dépôt d'énergie dans cette thèse.

Une deuxième partie présente l'implémentation de cette méthode dans le code CEDRE. Pour cela, les propriétés thermodynamiques des différentes espèces sont étendues à haute température. Les vitesses de flammes fournies par les schémas cinétiques simplifiés utilisés sont vérifiées via des flammes laminares unidimensionnelles. Enfin, cette méthode de dépôt d'énergie est complétée par l'ajout d'un terme source instationnaire à l'équation d'énergie.

Une troisième partie présente la validation de cette méthode. Pour cela, une simulation de l'expérience de Renou et Boukhalfa [111] est effectuée. Cette simulation permet de comparer l'expansion du noyau de flamme à celle observée expérimentalement et numériquement par Enaux avec le code AVBP [39].

Une quatrième partie décrit l'allumage d'un mélange diphasique d'air et de kérosène. Une analyse qualitative des modifications liées à la présence d'une phase dispersée est réalisée.

Sommaire

2.1	Présentation du phénomène d'allumage et de sa modélisation	60
2.1.1	<i>Différents moyens d'allumage</i>	60
2.1.2	<i>Physique de l'allumage par bougie</i>	60
2.1.3	<i>Énergie minimale d'allumage</i>	63
2.1.4	<i>Influence de l'aspect diphasique</i>	63

2.1.5	<i>Modélisation du noyau d'allumage</i>	64
2.2	Implémentation de la méthode de dépôt d'énergie dans CEDRE	66
2.2.1	<i>Extension de la validité des propriétés thermodynamiques</i>	66
2.2.2	<i>Vérification des vitesses de flamme en écoulement purement gazeux</i>	71
2.2.3	<i>Ajout d'un terme source d'énergie volumique instationnaire</i>	73
2.3	Validation de l'expansion du noyau de flamme	75
2.3.1	<i>Simulation de l'allumage d'un mélange air-propane en écoulement laminaire</i>	75
2.3.2	<i>Vérification de l'expansion du noyau de flamme</i>	76
2.4	Étude de l'allumage d'un mélange diphasique	80
2.5	Conclusion	82

2.1 Présentation du phénomène d'allumage et de sa modélisation

2.1.1 Différents moyens d'allumage

Dans un allumage forcé, l'allumage du mélange carburant/oxydant est provoqué par un apport d'énergie extérieur. Cette énergie peut être fournie de différentes manières. La technologie la plus couramment employée est celle de l'allumage par bougie. Dans ce système, une énergie électrique suffisamment importante est délivrée entre deux électrodes. Cette énergie va déclencher le claquage de la bougie et la formation d'une étincelle, c'est à dire d'une zone contenant un gaz ionisé à très haute température.

D'autres méthodes moins courantes encore au stade expérimental peuvent être utilisées [34] :

- Un laser peut fournir l'énergie nécessaire pour former une étincelle.
- Des systèmes fonctionnant avec des jets de plasma peuvent aussi être employés. Dans ces systèmes, du plasma est produit dans une cavité par un premier claquage d'une bougie électrique. Puis une seconde décharge moins importante augmente suffisamment la pression dans la cavité pour expulser le plasma hors de sa cavité. Ils permettent d'éloigner le noyau de flamme des parois froides de la chambre de combustion et de l'électrode afin de limiter les pertes de chaleur par conduction.
- Des systèmes d'allumage par torches peuvent également servir à allumer une chambre de combustion. Une pré-chambre est allumée via une bougie électrique et va générer un jet de flamme dans la chambre principale. Ce système permet d'allumer des mélanges plus pauvres dans la chambre principale qu'un allumage directement dans la chambre principale.

2.1.2 Physique de l'allumage par bougie

Dans cette partie, la physique de l'allumage par bougie va être détaillée. En effet, cette thèse se concentre sur la simulation de l'allumage du banc MERCATO. Ce moyen d'essai permet de mener des études sur l'allumage et la combustion diphasique dans une configuration proche d'une chambre industrielle. En effet, l'injecteur et le tourbillonneur (*swirler*) du banc MERCATO sont représentatifs

des systèmes utilisés dans l'industrie. Le banc MERCATO étant allumé via une bougie électrique, il semble logique de présenter quelques caractéristiques de l'allumage par bougie.

Selon Maly et Vogel [85] l'allumage par bougie peut être décomposé en plusieurs phases visibles sur la figure 2.1 :

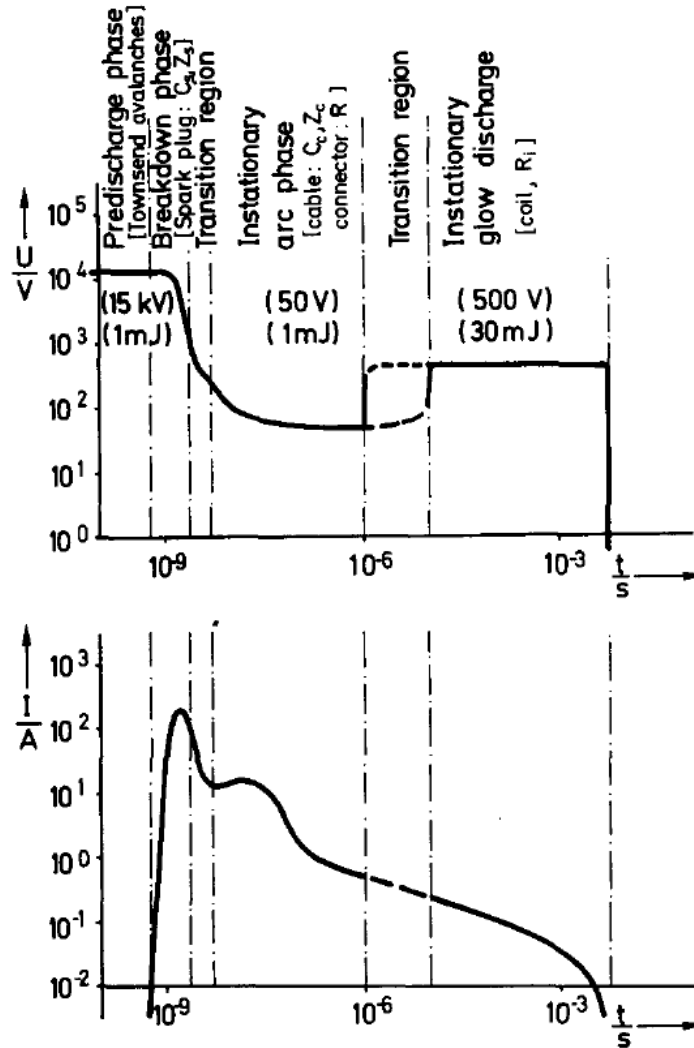


Figure 2.1 : Schéma du courant et de la tension aux bornes de la bougie durant la phase d'allumage [85]

- Phase de claquage (*breakdown*) : Durant cette phase, une très haute tension est appliquée pendant un bref instant aux bornes de l'électrode. Quand la tension dépasse la tension de claquage de l'air environnant un courant se forme entre les électrodes et l'air est ionisé. La température entre les électrodes est extrêmement élevée et peut dépasser plusieurs dizaines de milliers de kelvins dans des applications aéronautiques. Le plasma est à une très haute pression de l'ordre de 10 MPa. Une onde de choc se forme et contribue à l'expansion rapide du plasma. Le transfert d'énergie vers le plasma est efficace puisque plus de 90% de l'énergie électrique est fournie au

plasma.

- Phase d'arc : La tension entre les électrodes est plus faible (moins de 100 V). La température du plasma diminue autour de 6000 K. Cette phase dure quelques microsecondes. Les pertes d'énergie dans les électrodes sont importantes et environ la moitié de l'énergie électrique est transmise au plasma.
- Phase de décharge luminescente (*glow discharge*) : Durant cette phase, la tension est à peu près constante, d'environ 500 V. Le courant est très faible, moins de 200 mA. La température est autour de 3000 K. Cette phase est plus longue et peut durer plusieurs centaines de microsecondes. C'est pendant cette phase que la majeure partie de l'énergie transmise au gaz est fournie. Les pertes dans les électrodes deviennent très importantes et conduisent à un transfert d'énergie au gaz d'environ 30% de l'énergie apportée. Durant cette phase, un noyau de gaz chaud se forme et des réactions chimiques de combustion peuvent démarrer si la composition chimique du noyau y est favorable.

L'expansion du noyau de flamme peut être décomposée en deux temps. Au début, la croissance du noyau de flamme est dominée par l'onde de choc produite pendant la phase de claquage. Gebel et al. [54] ont étudié expérimentalement l'énergie de cette onde de choc dans le cadre d'un allumage par laser. Des simulations étudiant l'influence du plasma sur la combustion dans les premiers instants ont été effectuées par Miki et al. [92] et Castela et al. [21]. D'après Neophytou [95], cette phase dure entre 1 μ s et 10 μ s. Cette expansion rapide des gaz entraîne une croissance rapide du noyau de flamme. Pendant cette phase, la vitesse d'expansion du noyau diminue. Après une dizaine de microsecondes, la croissance du noyau est dominée par des effets de diffusion de l'énergie apportée par l'étincelle. Ensuite, à partir d'une centaine de microsecondes les réactions chimiques de combustion deviennent la source principale d'élévation de la température d'après Akindele [4]. Le noyau d'allumage n'est pas affecté par la turbulence juste après sa formation. D'après Bradley et Lung [18], il faut environ 200 μ s avant que la turbulence ne vienne plisser le noyau de flamme.

Dans une chambre de combustion industrielle, il faut considérer d'autres phases en plus de la phase d'allumage du noyau de flamme. Selon Mastorakos [87], trois phases peuvent être distinguées :

- La phase de génération du noyau de flamme. Pendant cette phase, le noyau de gaz chaud est formé par la bougie et les premières réactions de combustion se produisent si le mélange est propice, c'est-à-dire proche de la stoechiométrie.
- La phase de croissance de la flamme. Pendant cette phase, le noyau de flamme grandit dans la chambre. La flamme se propage principalement dans des zones où le mélange est dans des conditions proches de la stoechiométrie.
- La phase d'allumage de la chambre de combustion. Cette phase prend en compte l'établissement de la flamme à l'ensemble de la chambre de combustion et sa stabilisation. Par exemple, dans une chambre multi-secteur la flamme doit se propager à l'ensemble des secteurs et s'y stabiliser pour que l'allumage soit considéré comme réussi.

2.1.3 Énergie minimale d'allumage

Une grandeur souvent utilisée dans la littérature est l'énergie minimale d'allumage, abrégée MIE (Minimum Ignition Energy). Elle correspond à l'énergie nécessaire pour réussir à former un noyau de flamme de taille supérieure au diamètre de coincement (*quenching diameter*) [10]. Le diamètre de coincement est le diamètre à partir duquel le dégagement de chaleur compense les pertes par diffusion thermique.

Cette définition de la MIE est valable dans le cas d'un écoulement laminaire où l'allumage se produit de façon déterministe. Mais dans un écoulement turbulent, l'allumage devient un phénomène probabiliste. En effet, pour la même valeur d'énergie, le noyau de flamme va parfois s'allumer et parfois s'éteindre. Ce comportement provient du caractère aléatoire des fluctuations de vitesse et de richesse au niveau du noyau de flamme. D'après Akindele et al. [4], les noyaux de flamme qui ne parviennent pas à s'allumer ne parviennent pas à dépasser un rayon critique qui correspond au rayon de coincement. Dans le cas d'un écoulement turbulent, la MIE est définie comme l'énergie nécessaire pour obtenir une probabilité d'allumage de 50%.

2.1.4 Influence de l'aspect diphasique

Une revue plus complète de l'allumage dans un milieu diphasique a été effectuée par Mastorakos [87]. D'après cette revue [87] et comme vu dans la section 1.5.1, la vitesse de propagation d'une flamme dans un spray est influencée par les caractéristiques du spray. Premièrement, la vitesse de flamme dans un spray est généralement plus faible que la vitesse dans un écoulement purement gazeux à même richesse globale à cause principalement du temps d'évaporation [10]. Deuxièmement, dans un allumage, la propagation de la flamme commence généralement par une phase d'expansion sphérique avec un très fort étirement qui va diminuer la vitesse de flamme [57]. Troisièmement, plus le diamètre des gouttes est grand et plus la vitesse de flamme est faible [10].

Une des observations de la revue de Mastorakos [87] est que l'énergie minimale d'allumage est différente en diphasique et en purement gazeux. Trois phénomènes peuvent expliquer ces différences :

- Une part de l'énergie fournie est utilisée pour évaporer les gouttes autour de la bougie.
- La fraction de vapeur de carburant dans la chambre peut varier grandement.
- Le temps d'évaporation des gouttes doit être pris en compte pour déterminer la rapidité des réactions pendant l'allumage. Par exemple, si l'évaporation est insuffisante pour alimenter les réactions de combustion, l'allumage peut échouer.

Dans un écoulement diphasique, le diamètre des gouttes ainsi que la richesse globale et liquide du mélange ont une influence importante sur l'énergie minimum d'allumage. D'après Aggarwal [2], il existe un diamètre de goutte unique à richesse fixée (et une richesse unique à diamètre fixé) pour lequel la MIE est minimale. Cela provient de la différence entre la richesse globale du mélange et la richesse effective au niveau du noyau de flamme. La richesse effective correspond à la richesse locale gazeuse si la combustion n'avait pas été effectuée [19]. Cette richesse effective dépend donc directement de l'évaporation des gouttes de carburant. Ainsi, l'optimum de diamètre de goutte provient des conditions nécessaires pour que l'évaporation produise la richesse effective optimale au niveau du front de flamme, généralement égale à la stoechiométrie.

Une conclusion de la revue effectuée par Aggarwal [2] est que la limite d'allumage d'un mélange d'air et de carburant liquide est plus large que celle d'un mélange purement gazeux. Cette propriété provient des inhomogénéités de richesse présentes dans un mélange d'air et de carburant liquide.

D'après Ballal et Lefebvre [9], l'énergie minimum d'allumage augmente avec le diamètre moyen de Sauter des gouttes (SMD). La MIE diminue lorsque la part de carburant évaporé dans un mélange pauvre est augmentée. Ces résultats conduisent à penser que l'allumage d'un mélange diphasique est dominé par l'évaporation du carburant plus que par la cinétique chimique. En effet, le temps caractéristique d'évaporation des gouttes est grand comparé aux temps caractéristiques des réactions chimiques de combustion dans la plupart des cas.

Plus la vitesse de l'écoulement est importante et plus l'énergie minimale d'allumage sera importante. Selon Aggarwal [2] citant Ballal et Lefebvre [8], l'augmentation de la vitesse de l'écoulement provoque une augmentation du transfert convectif de chaleur du noyau vers l'extérieur. Le noyau nécessite donc un apport d'énergie plus important pour compenser ces pertes thermiques.

Comme vu dans la section 1.5.1.c), plusieurs régimes de combustion diphasique existent. Déterminer le mode de combustion diphasique principal est donc un point d'intérêt important. En effet, il peut être dominé par la combustion de goutte isolée ou la combustion de groupe de gouttes [2]. Plusieurs modes de combustion peuvent également cohabiter durant l'allumage d'un même spray. Par ailleurs, la limite d'allumage pourrait dépendre du régime principal de combustion, mais cela n'a pas encore été définitivement prouvé. Selon les DNS réalisées par Neophytou et al. [98], après le dépôt d'énergie, une combustion de goutte isolée est observée. De plus, des flammes peuvent se propager même à des richesses globales très importantes. Cette propagation est possible grâce à la présence entre les gouttes de zones à une richesse proche de la stoechiométrie. La présence de ces zones peut s'expliquer par la faiblesse de l'évaporation en dehors des zones où le dépôt d'énergie est effectué ainsi que par le temps nécessaire à l'évaporation des gouttes.

2.1.5 Modélisation du noyau d'allumage

La simulation des premiers instants de l'allumage d'une chambre de combustion présente de nombreuses difficultés. Des phénomènes physiques complexes impliquant une phase de plasma à haute température se produisent à des échelles spatio-temporelles petites comparées au processus de stabilisation de la flamme dans la chambre de combustion. Deux grandes approches sont possibles pour simuler ces premiers instants. Dans l'approche par dépôt de flamme, un module extérieur est chargé de simuler le développement des premiers instants du noyau d'allumage. Lorsque ce noyau a atteint un certain seuil, il est "réinjecté" dans le calcul principal. Dans l'approche par dépôt d'énergie, la simulation du noyau de flamme est effectuée directement dans le solveur principal. La formation du noyau est provoquée par l'ajout d'un terme source d'énergie.

2.1.5.a) Modèle de dépôt de flamme

De nombreux modèles différents existent dans la littérature. Certains de ces modèles emploient un couplage avec les équations de Maxwell pour déterminer l'énergie fournie au plasma et les forces exercées par le champ magnétique sur les espèces ionisées. Un tel couplage est par exemple mis en oeuvre par Thiele [130].

D'autres modèles ne résolvent pas les équations de Maxwell. L'influence du plasma est donc limitée

à un apport d'énergie permettant l'allumage. Le modèle RANS AKTIM (Arc and Kernel Tracking Ignition Model) a été développé au sein de l'IFPEN par Duclos et Colin [36]. Ce modèle commence pendant la phase d'arc. Il permet de modéliser le circuit électrique du système d'allumage pour évaluer l'énergie fournie à la bougie et la tension entre les électrodes. L'arc électrique est suivi par des marqueurs lagrangiens pour évaluer l'influence de l'écoulement sur l'étincelle. Les noyaux d'allumages sont représentés par des traceurs lagrangiens contenant une masse de gaz brûlés initialement nulle et un excès d'énergie. Si l'excès d'énergie dépasse une valeur critique, la masse de gaz brûlé devient égale à la valeur de la masse des gaz frais contenue dans le volume modélisé par le traceur. La géométrie des électrodes est prise en compte en imposant l'arrêt des marqueurs lagrangiens en contact avec les électrodes.

Ce modèle a ensuite été adapté par Colin et Truffin [28] pour fonctionner avec un solveur LES et devenir le modèle ISSIM-LES (Imposed Stretch Spark Ignition Model - Large Eddy Simulation). Dans ce dernier modèle, la combustion est résolue par un modèle à densité de surface de flamme appelée ECFM-LES conçu par Richard et al. [114]. La modélisation du circuit électrique reste la même que pour AKTIM. Par contre, la formation du noyau de flamme est représentée par l'ajout d'un terme source au modèle ECFM-LES. Pendant les premiers instants de l'expansion du noyau, ce dernier est trop petit pour pouvoir être résolu correctement par le maillage. Les équations tenant compte des effets de courbure de la flamme dans les premiers instants ont donc été modifiées pour inclure les termes non résolus. Ainsi, dans les premiers instants, les effets de courbure proviennent d'un modèle analytique. Une fois le noyau de flamme suffisamment étendu pour être résolu sur le maillage, les effets de courbure du front de flamme proviennent des termes résolus comme dans une LES classique [28].

Dahms et al. [31, 32] ont mis au point un modèle RANS baptisé SparkCIMM (Spark Channel Ignition Monitoring Model) qui se rapproche du modèle AKTIM. Au début, l'étincelle est modélisée par des marqueurs lagrangiens afin de suivre sa déformation due à l'écoulement. La température au niveau de chaque marqueur est comparée à une valeur critique. Si cette valeur est dépassée, un noyau de flamme est déposé et suivi par des marqueurs lagrangiens. Un modèle de flamme sphérique est utilisé pour la croissance du noyau de flamme. Une fois que le noyau a dépassé une taille suffisante pour permettre sa résolution et sa transition vers un front de flamme turbulent, le modèle SparkCIMM est désactivé et le front de flamme est suivi par une approche level-set de type G-equation [104].

Au sein de l'ONERA, un modèle de noyau d'allumage a été mis au point par Ouarti [102] puis amélioré par Garcia-Rosa [51] et Linassier [81]. Les conditions initiales du calcul d'allumage sont extraites d'un calcul de champ aérodynamique non-réactif convergé. Une sphère de gaz chaud de rayon correspondant au rayon observé sur des visualisations expérimentales de l'étincelle produite par le dispositif d'allumage est introduite dans le domaine. La simulation du noyau commence pendant la phase de décharge lumineuse, lorsque qu'il n'y a plus de plasma. La croissance du noyau de flamme est simulée suivant des équations unidimensionnelles. Une chimie simplifiée à deux étapes et une représentation thermodynamique simplifiée sont utilisées dans ce module. L'influence de la turbulence sur le noyau de flamme est négligée : le temps de simulation du noyau est supposé petit devant le temps caractéristique de la turbulence. Enfin, si le noyau présente un profil favorable à la formation d'une flamme capable de se propager, il est réintroduit dans le solveur principal CEDRE pour pouvoir simuler la propagation du front de flamme à l'ensemble de la chambre de combustion.

2.1.5.b) Modèle de dépôt d'énergie

L'approche par dépôt d'énergie consiste à ajouter un terme source d'énergie représentant l'énergie apportée par la bougie à l'écoulement. Le dépôt d'énergie va provoquer un échauffement qui déclenchera la réaction de combustion. La combustion va être suivie dès le début par le solveur principal, ce qui impose un maillage suffisamment raffiné autour de la source d'énergie et l'emploi de pas de temps très faibles dans les premiers instants de l'allumage. Cette méthode a été employée dans de nombreuses thèses au CERFACS comme par exemple celles d'Enaux [39], de Lacaze [69] et de Thobois [131]. Cette méthode simplifie la physique mise en jeu dans les phénomènes d'allumage, par exemple la phase de plasma n'est pas représentée. De plus, la même cinétique chimique que pour la combustion stabilisée est employée, même si elle peut être moins adaptée aux premiers instants de l'allumage que des modèles spécifiques. Malgré ces approximations, la taille, la composition, la croissance et la température du noyau de flamme simulé sont proches des données expérimentales disponibles pour des applications de type chambre de combustion et moteur à piston [39, 69, 131]. Cette approche est celle choisie dans cette thèse.

2.2 Implémentation de la méthode de dépôt d'énergie dans CEDRE

L'implémentation de la méthode de dépôt d'énergie dans le code CEDRE s'est effectuée en plusieurs étapes. Tout d'abord, la validité des propriétés thermodynamiques est étendue à de plus hautes température atteinte pendant la phase d'allumage. Ensuite, la vitesse de flamme pour une flamme de pré-mélange dans un écoulement laminaire purement gazeux est vérifiée en la comparant à des résultats expérimentaux [91, 122] et provenant des simulations d'Enaux [39]. Enfin, un terme source volumique instationnaire est ajouté à l'équation d'énergie.

2.2.1 Extension de la validité des propriétés thermodynamiques

Comme vu dans le chapitre précédent, les grandeurs thermodynamiques telles la capacité calorifique à pression constante c_p sont calculée à partir de fonctions polynomiales. Les polynômes implémentés par défaut dans le code CEDRE sont bien adaptés pour des températures comprises entre 200 K et 3000 K. Cette gamme de température est parfaitement adaptée pour des applications de combustion standard où la température maximale dépasse rarement les 2600 K. Mais dans les premiers instants après le dépôt d'énergie initial, la température peut atteindre plusieurs dizaines de milliers de kelvins. À ces très hautes températures, des phénomènes de dissociation et d'ionisation se produisent. Ces phénomènes vont eux aussi modifier la capacité calorifique du mélange. En effet, la définition de la capacité calorifique permet d'écrire :

$$c_p = \left(\frac{\partial h}{\partial T} \right)_P = \sum_{j=1}^{NS} n_j \left(\frac{\partial H_j^0}{\partial T} \right)_P + \sum_{j=1}^{NS} \left(\frac{\partial n_j}{\partial T} \right)_P H_j^0 \quad (2.1)$$

$$= \sum_{j=1}^{NS} n_j c_{p,j}^0 + \sum_{j=1}^{NS} \left(\frac{\partial n_j}{\partial T} \right)_P H_j^0 \quad (2.2)$$

$$= c_{p,f} + c_{p,r} \quad (2.3)$$

avec

- H_j^0 l'enthalpie molaire de l'espèce j
- n_j le nombre de mole de l'espèce j
- $c_{p,f}$ la composante de la capacité calorifique à pression constante et à composition constante. Cette composante est appelée c_p inerte ou *frozen* en anglais.
- $c_{p,r}$ la composante de la capacité calorifique à pression constante due aux changements de composition du mélange. Cette composante est appelée c_p réactive. Elle tient compte des phénomènes de dissociation et d'ionisation se produisant à hautes température.

L'évolution de la capacité calorifique à pression constante de l'azote en fonction de la température est visible sur la figure 2.2. Cette figure est obtenue grâce à l'outil CEARUN mis au point par l'équipe du centre Glenn de la NASA [90]. La capacité calorifique change brutalement au moment de la dissociation du diazote en atome d'azote. Néanmoins la composante inerte de la capacité calorifique ne présente pas de pics. Une fois que la dissociation est passée, la capacité calorifique totale redevient égale à la capacité calorifique inerte.

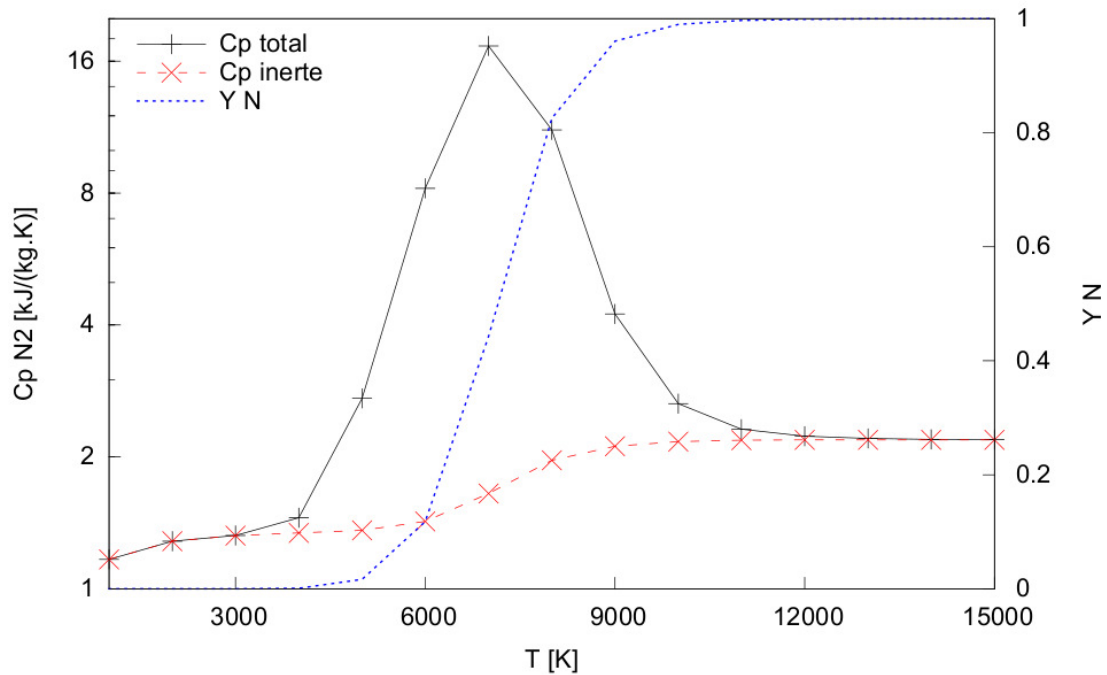


Figure 2.2 : Évolution de la capacité calorifique à pression constante de l'azote en tenant compte et sans tenir compte de la dissociation de N_2 en N sur l'échelle logarithmique de gauche. À droite, sur une échelle linéaire évolution de la fraction massique d'azote atomique N en pointillés bleus

Plusieurs possibilités existent pour prendre en compte les variations de c_p à haute température. Une première possibilité est d'employer plusieurs polynômes pour chaque espèce. Chaque polynôme est valide sur une certaine plage de température, mais en utilisant plusieurs polynômes, l'évolution du c_p peut être obtenue même pour des hautes températures. Cette approche ne permet pas de tenir compte des phénomènes de dissociation et d'ionisation qui se produisent dans le gaz, seul les changements de

c_p inertes sont pris en compte. Ces phénomènes peuvent par contre être pris en compte par des schémas cinétiques représentant les réactions de dissociation et d'ionisation.

Une autre possibilité est d'employer des propriétés thermodynamiques représentatives de l'air à très haute température. Ces propriétés ont été calculées analytiquement et tabulées par D'Angola et al. [35] pour de l'air. Ces propriétés prennent bien en compte tous les phénomènes modifiant le c_p de l'air telle la dissociation des molécules de O_2 en O et de N_2 en N ou l'apparition d'espèces ionisées à très hautes températures. Un inconvénient de cette méthode est que les pics de dissociation sont valides uniquement pour un mélange d'air classique, pas pour un mélange d'air et de carburant. Dans une simulation de combustion, l'air est représenté par du diazote et du dioxygène avec chacun leurs propres propriétés thermodynamiques. Utiliser une table de propriétés de l'air ne tient pas compte du changement de composition chimique dû à la combustion, par exemple la diminution de la fraction de dioxygène et l'augmentation de la fraction des produits de combustion : eau, monoxyde et dioxyde de carbone.

Dans cette thèse, la première approche a été employée en utilisant les polynômes obtenus par l'équipe de McBride au centre Glenn de la NASA [90]. Une comparaison de l'évolution de la capacité calorifique à pression constante en fonction de la température entre la formulation CEDRE standard et la formulation par polynôme généralisés de la NASA a été effectuée. Cette comparaison a été effectuée grâce à des simulations numériques avec CEDRE d'une cellule soumise à une augmentation de température due à un dépôt d'énergie. Les polynômes d'interpolation utilisés sont soit les polynômes standard de CEDRE soit les polynômes de l'équipe du centre Glenn de la NASA [90]. L'évolution des propriétés thermodynamiques du dioxygène et du diazote en fonction de la température de la cellule sont visibles sur la figure 2.3. Les polynômes prennent les mêmes valeurs pour des températures inférieures à 3000 K. Pour des températures plus importantes, l'interpolation par un polynôme standard ne fournit plus de résultats réalistes, contrairement à l'interpolation par plusieurs polynômes sur plusieurs gammes de température différentes.

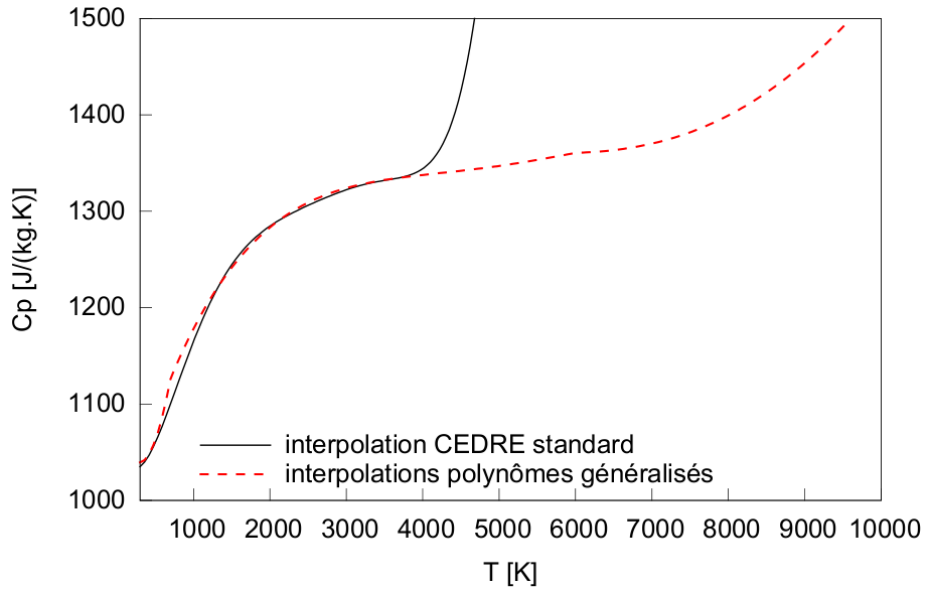
Les propriétés de transport restent décrites par les relations décrites dans la section 1.1.9. Une loi de Sutherland est utilisée pour la viscosité μ et la conductivité thermique d'espèce λ_k est calculée à partir d'un nombre de Prandtl fixé. D'Angola et al. [35] ont évalué les propriétés de transport pour de l'air à haute température. Un écart important est visible pour des températures supérieures à 3000 K comme illustrée sur la figure 2.4. Les valeurs des propriétés de transport obtenues avec les lois standard CEDRE restent raisonnables à haute température, contrairement aux valeurs des c_p .

Une autre raison pour ne pas modifier les valeurs standards des propriétés de transport est leur influence importante sur les vitesses de flamme laminaire. Cette influence peut être expliquée par le raisonnement qui suit [140]. En considérant une flamme de largeur δ , avec un taux de réaction du carburant ω_c et une chaleur de réaction $\Delta h_{f,c}^0$, alors l'énergie dégagée par unité de surface correspond à $\Delta h_{f,c}^0 \omega_c \delta$. La conduction thermique vers l'amont se fait selon :

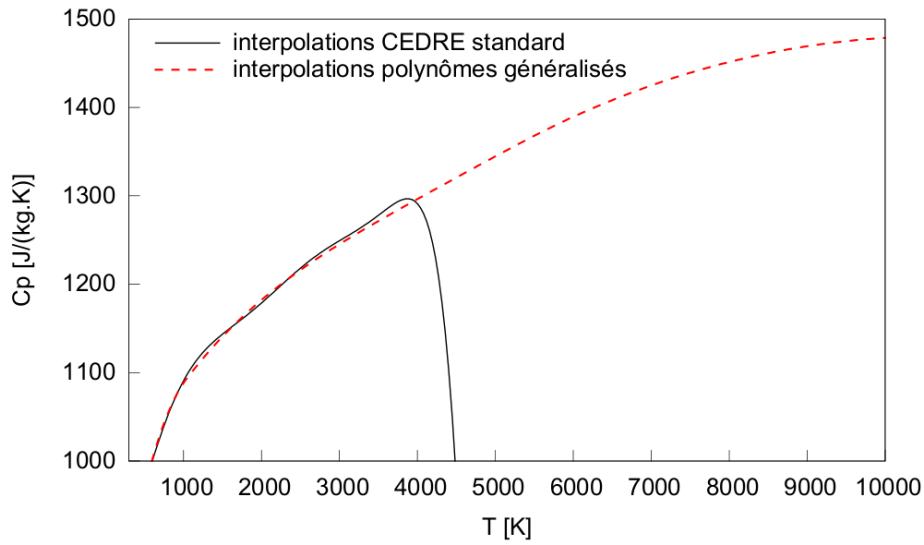
$$\lambda \frac{\partial T}{\partial x} \approx \lambda \frac{T_1 - T_0}{\delta} \quad (2.4)$$

En supposant que l'énergie de réaction chimique soit transmise intégralement au gaz, la conservation de l'énergie peut être écrite :

$$\Delta h_{f,c}^0 = c_p (T_1 - T_0) \quad (2.5)$$



(a)



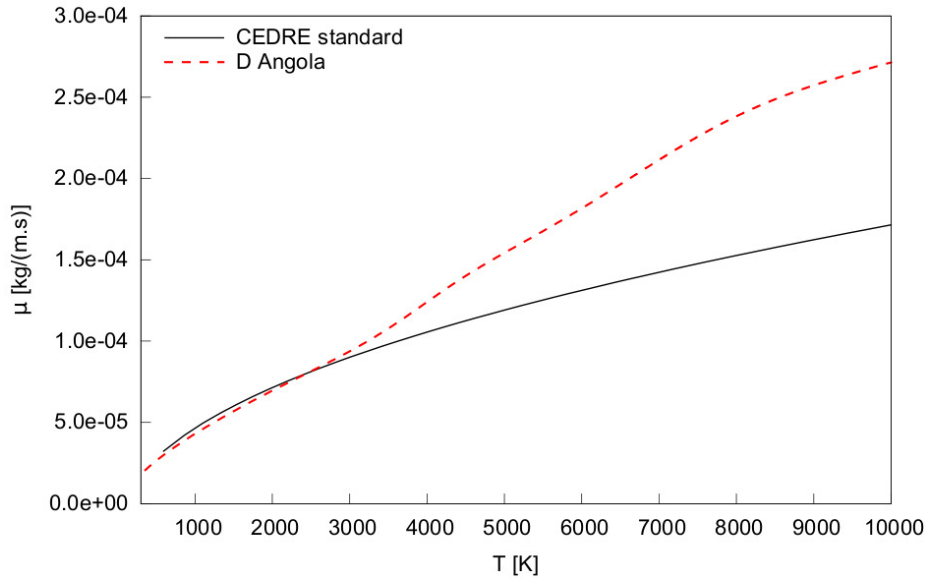
(b)

Figure 2.3 : Évolution de la capacité calorifique à pression constante du diazote N_2 2.3a et du dioxygène O_2 2.3b en fonction de la température d'après les polynômes standard et d'après les polynômes généralisés

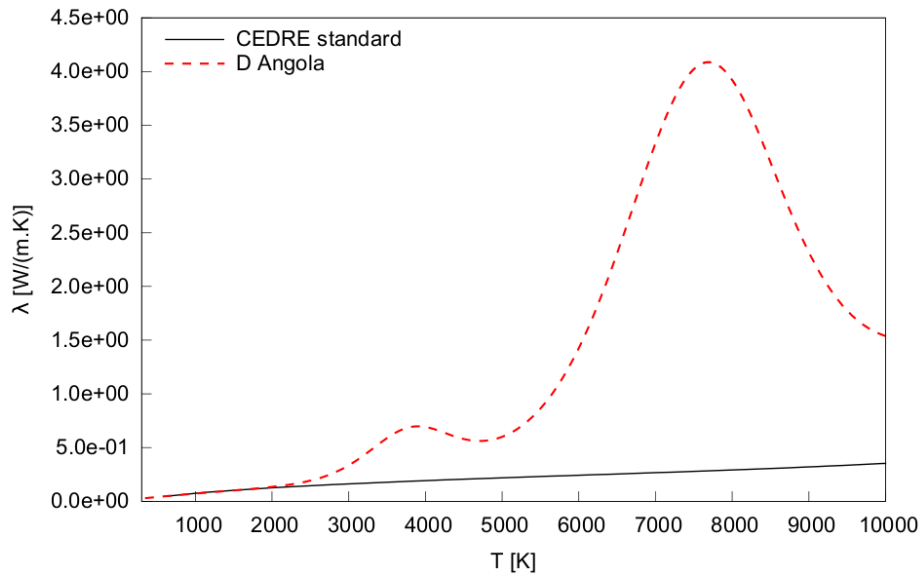
L'énergie de la réaction chimique est transportée en amont du front de flamme, ce qui donne :

$$\Delta h_{f,c}^0 \omega_c \delta \approx \lambda \frac{T_1 - T_0}{\delta} \quad (2.6)$$

$$c_p (T_1 - T_0) \omega_c \delta \approx \lambda \frac{T_1 - T_0}{\delta} \quad (2.7)$$



(a)



(b)

Figure 2.4 : Évolution de la viscosité dynamique de l'air 2.4a et de la conductivité thermique de l'air 2.4b en fonction de la température d'après les polynômes standard et d'après les tables de D'Angola [35]

d'où une expression de l'épaisseur de flamme en fonction des propriétés du gaz :

$$\delta \approx \sqrt{\frac{\lambda}{c_p \omega_c}} \quad (2.8)$$

Lorsque la flamme est à l'équilibre, la quantité $\rho_0 Y_{f,0} S_l$ de carburant apportée à la flamme est égale

à la quantité de carburant consommée par la réaction de combustion dans la flamme :

$$\rho_0 Y_{f,0} S_l = \omega_c \delta \quad (2.9)$$

Ainsi la vitesse de flamme peut être exprimée en fonction de la conductivité thermique du gaz λ [140] :

$$S_l \propto \frac{1}{\rho_0 Y_{f,0}} \sqrt{\frac{\lambda}{c_p} \omega_c} \quad (2.10)$$

Dans CEDRE, la conductivité thermique du gaz est obtenue à partir d'une loi de mélange. Ainsi, pour contrôler les vitesses de flamme obtenues il faut modifier la viscosité et la conductivité thermique de toutes les espèces présentes pour modifier les propriétés de transport du gaz. De plus, ces modifications doivent être cohérentes pour différentes richesses de flamme, donc pour différentes compositions du mélange. Ces modifications ont été jugées trop longues comparées à l'impact estimé faible d'une erreur sur les propriétés de transport à haute température. En effet, dans une chambre de combustion, ces très hautes températures ne sont atteintes que très brièvement au début de la phase d'allumage.

2.2.2 Vérification des vitesses de flamme en écoulement purement gazeux

Une fois établie la validité des propriétés thermodynamiques étendue à haute température, il est nécessaire de vérifier la vitesse de flamme laminaire en régime purement gazeux. En effet, pour simuler la croissance du noyau de flamme, il faut que la vitesse de flamme soit correctement reproduite.

Plusieurs paramètres peuvent influencer la vitesse de flamme laminaire. Premièrement, le schéma cinétique utilisé a une influence déterminante. Dans cette thèse un schéma global à deux étapes est employé. Les paramètres de ce type de schéma sont choisis pour reproduire correctement les vitesses de flamme et la température de fin de combustion. Dans cette première simulation, le schéma cinétique de réaction entre le propane et l'air conçu par Enaux [39] est utilisé. Ce schéma a été conçu pour reproduire la bonne vitesse de flamme à pression et température standard.

n°	Réaction	A	β	E_a
		cm ³ /mol sec		cal/mol
1	$C_3H_8 + 3.5O_2 \rightarrow 3CO + 4H_2O$ Sens direct : $n_{C_3H_8} = 0.9028$ $n_{O_2} = 0.6855$	$9.71 * 10^{11}$	0	$3.3 * 10^4$
2	$CO + 0.5O_2 \rightleftharpoons CO_2$ Sens direct : $n_{CO} = 1$ $n_{O_2} = 0.5$ Sens inverse : $n_{CO_2} = 1$	$4.51 * 10^{10}$	0	$1.2 * 10^4$

Tableau 2.1 : Schéma cinétique à deux étapes de la combustion du propane dans l'air

Deuxièmement, comme vu précédemment, les propriétés de transport influencent la vitesse de flamme. Deux configurations différentes pour la conductivité thermique ont été comparées :

- Un calcul de la conductivité thermique λ_k avec la corrélation d'Eucken [41]

$$\lambda_k = \mu_k \left(c_{p,k} + \frac{5R}{4W_k} \right) \quad (2.11)$$

- Un calcul de la conductivité thermique à partir d'un nombre de Prandtl fixé

$$\lambda_k = \frac{\mu_k c_{p,k}}{Pr} \quad (2.12)$$

Dans chaque cas, la conductivité thermique du mélange est obtenue par la relation 1.46 rappelée ici :

$$\lambda = \mu \sum_k Y_k \frac{\lambda_k}{\mu_k} \quad (2.13)$$

Troisièmement, la vitesse de flamme évolue en fonction de la richesse et de la température des gaz frais. C'est pour cela que la comparaison est effectuée pour différentes richesses à la même température de gaz frais.

Quatrièmement, la vitesse de flamme évolue en fonction de la courbure de la flamme. La courbure de la flamme K peut être évaluée par l'expression suivante [107] :

$$K = \frac{1}{A} \frac{dA}{dt} \quad (2.14)$$

où A est la surface de la flamme. Différentes études se sont intéressées à la relation entre la courbure et la vitesse de flamme. Le lecteur est invité à consulter l'article de Halter et al. [61] pour plus de détails sur cette relation. Généralement, la courbure de la flamme tend à diminuer sa vitesse.

Pour vérifier la vitesse de flamme laminaire, une simulation numérique d'un canal est effectuée. Ce canal ne contient qu'une seule maille dans la direction normale à la propagation du front de flamme car le problème à simuler est unidimensionnel. Un schéma illustrant la configuration est visible sur la figure 2.5 Les gaz frais sont injectés sur une limite du domaine à une vitesse proche de la vitesse de

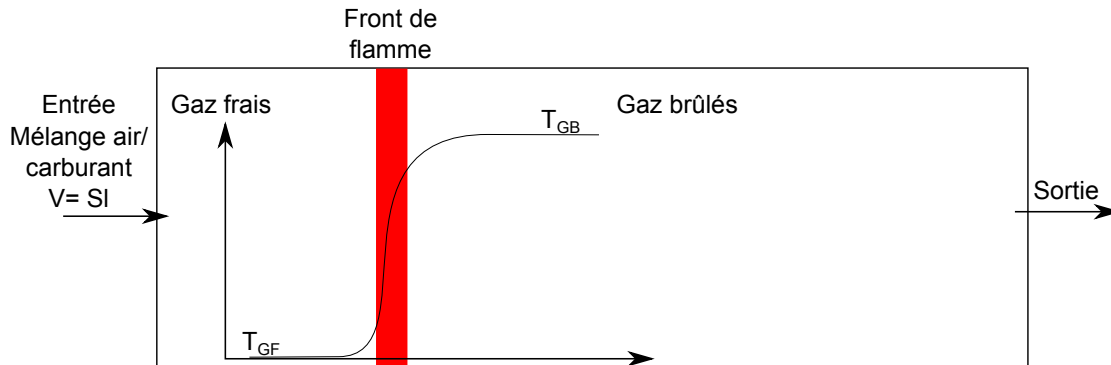


Figure 2.5 : Schéma de la configuration pour simuler une flamme laminaire pré-mélangée unidimensionnelle

flamme attendue. L'initialisation est effectuée avec une partie du domaine remplie de gaz frais et une partie remplie de gaz brûlés. La vitesse de flamme est évaluée par intégration du taux de réaction sur l'ensemble du domaine selon la définition de la vitesse de consommation [107]. Ensuite, la vitesse des gaz frais est ajustée à la même valeur. Normalement, le front de flamme obtenu ainsi doit être fixe par rapport au maillage car la vitesse du front de flamme correspond à la vitesse d'entrée des gaz frais.

Ces résultats sont comparés à des résultats expérimentaux obtenus par Metghalchi et Keck [91], Lowry et al. [82], Bosschaart et De Goey [16] et ceux de Law et al. [76] ainsi qu'aux simulations

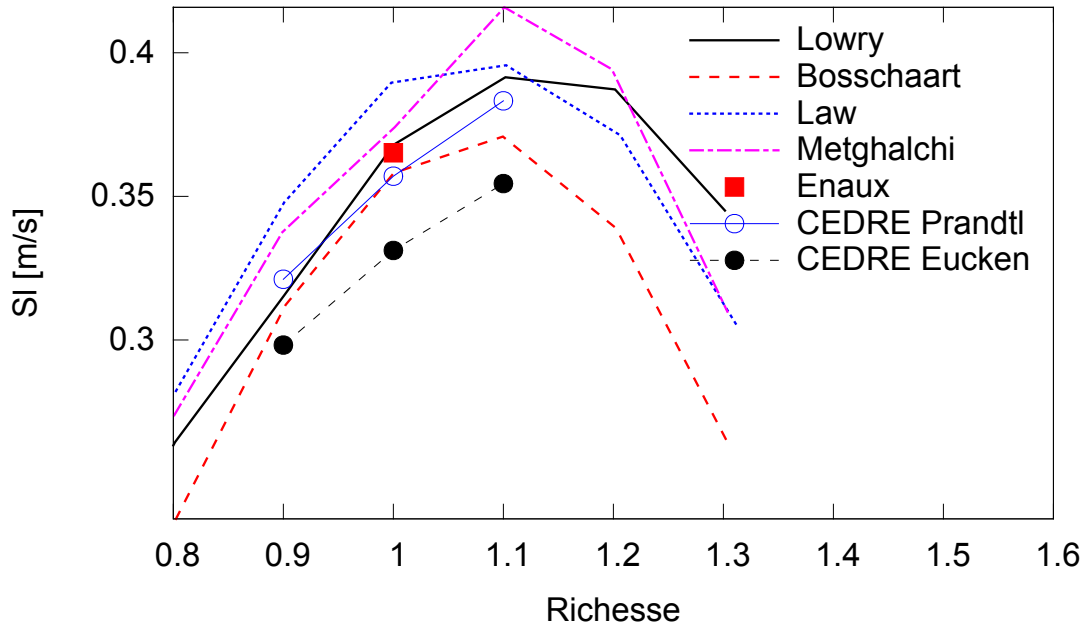


Figure 2.6 : Évolution de la vitesse de flamme d'un mélange d'air et de propane à température et pression atmosphérique en fonction de la richesse du mélange

d'Enaux [39]. La comparaison des vitesses de flamme peut être observée sur la figure 2.6. Des différences peuvent être remarquées entre les résultats expérimentaux obtenus par différentes équipes avec différentes techniques de mesures. Il est possible de remarquer que la vitesse de flamme fournie avec la corrélation d'Eucken est plus faible que celle obtenue avec un nombre de Prandtl fixé et que celle obtenue expérimentalement. La vitesse de flamme obtenue avec un nombre de Prandtl fixé est très proche de la valeur obtenue par Enaux, ce qui était attendu en utilisant le même schéma cinétique et des lois de transport très proches. Pour la suite, le calcul de la conductivité thermique sera effectué à nombre de Prandtl fixé pour mieux correspondre aux simulations d'Enaux.

Après avoir validé la vitesse de flamme laminaire, un terme source modélisant l'apport d'énergie de la bougie est ajouté à l'équation d'énergie.

2.2.3 Ajout d'un terme source d'énergie volumique instationnaire

Pour représenter l'apport d'énergie dû à la bougie, un terme source instationnaire est ajouté à l'équation de conservation de l'énergie selon la méthode développée par Lacaze [70]. L'objectif de ce terme source est de former un noyau de gaz chaud de taille comparable à ce qui est observé expérimentalement à un instant cohérent avec les expériences. Des observations expérimentales conduisent à penser que le noyau de gaz chaud peut être assimilé à une sphère au tout début de son existence. Ainsi, une forme sphérique est choisie pour la répartition du terme source d'énergie dans l'espace. L'énergie est répartie sous forme d'une gaussienne dans l'espace et dans le temps :

$$\dot{Q} = \frac{\epsilon_i}{4\pi^2\sigma_s^3\sigma_t} e^{-\frac{1}{2}\left(\frac{r}{\sigma_s}\right)^2} e^{-\frac{1}{2}\left(\frac{t-t_0}{\sigma_t}\right)^2} \quad (2.15)$$

avec :

- ϵ_i l'énergie déposée dans le gaz.
- σ_s et σ_t l'écart-type spatial et temporel du dépôt d'énergie. Ils sont définis par

$$\sigma_s = \frac{\Delta s}{2\sqrt{\ln(10^4)}} \quad (2.16)$$

$$\sigma_t = \frac{\Delta t}{2\sqrt{\ln(10^4)}} \quad (2.17)$$

Δs et Δt sont les intervalles spatial et temporel où 90% de l'énergie est déposée. Ils sont choisis pour correspondre aux données expérimentales disponibles.

- $r = \sqrt{(x - x_0)^2 + (y - y_0)^2 + (z - z_0)^2}$ la distance au point d'origine du dépôt d'énergie.
- t_0 l'instant initial du dépôt d'énergie.

Des simulations sont effectuées afin de vérifier que la bonne quantité d'énergie était fournie à l'écoulement. Sur la figure 2.7, il est possible de voir l'intégration du terme source d'énergie sur l'ensemble du maillage au cours du temps. Cette intégration a été réalisée dans le logiciel Paraview [128]. Dans cette simulation, la valeur désirée du terme source était de 14 mJ. Cette valeur est atteinte à la fin du dépôt d'énergie. Le terme source de forme gaussienne est visible à différents instants de la simulation

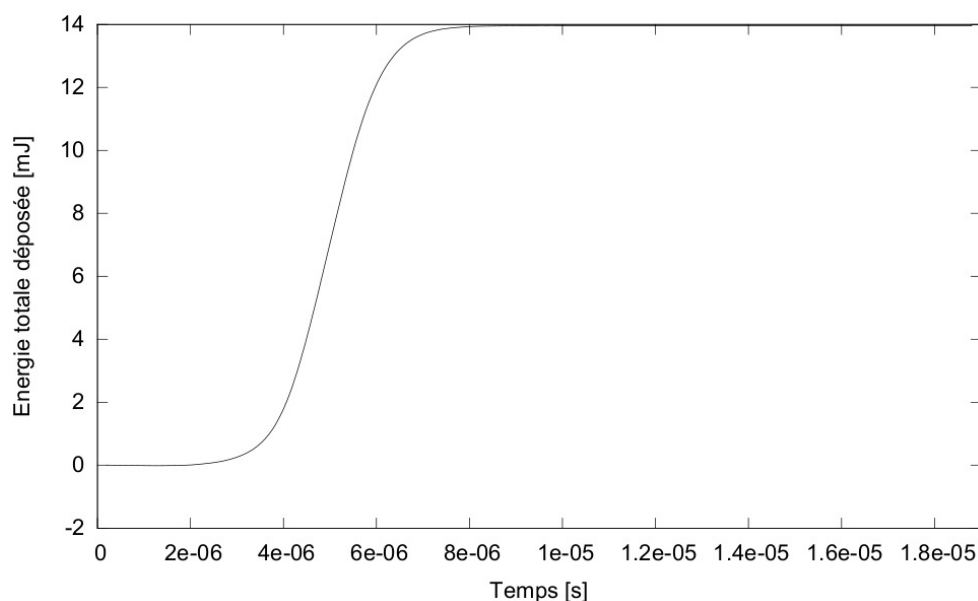


Figure 2.7 : Évolution de l'énergie totale déposée en fonction du temps

sur la figure 2.8. Le terme source conserve bien une allure gaussienne à chaque instant.

Avec cet outil de dépôt d'énergie, des simulations d'allumage vont pouvoir être effectuées. La première simulation permettra de valider cette méthode de simulation en reproduisant l'allumage d'un mélange d'air et de propane en écoulement laminaire.

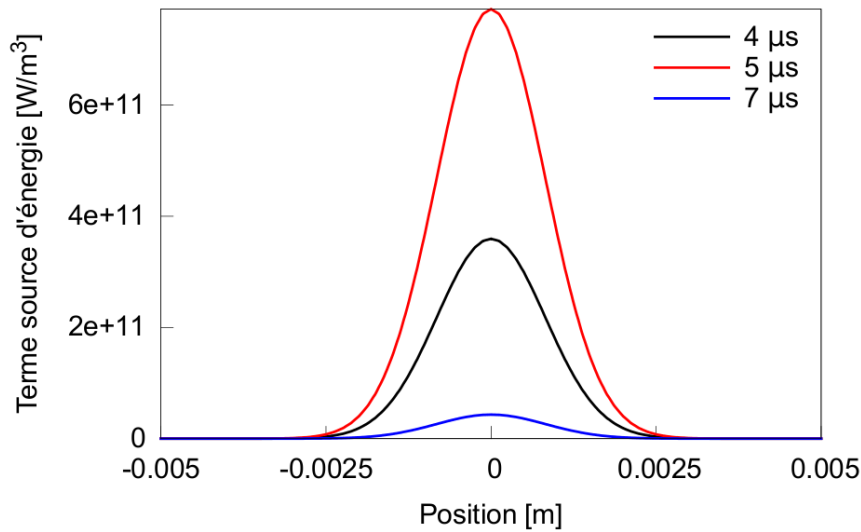


Figure 2.8 : Terme source d'énergie en fonction de l'espace à différents instants de la simulation

2.3 Validation de l'expansion du noyau de flamme

2.3.1 Simulation de l'allumage d'un mélange air-propane en écoulement laminaire

Afin de valider la méthode de simulation d'allumage par dépôt d'énergie, la simulation de l'allumage d'un mélange d'air et de propane en écoulement laminaire est réalisée. Le choix s'est porté plus précisément sur l'expérience de Renou et Boukhalfa [111]. Dans cette expérience, une bougie électrique crée un noyau de flamme dans une chambre de combustion rectangulaire transparente. Le taux de turbulence de l'écoulement peut être contrôlé à l'aide de grille. La taille du noyau est déterminée à partir de mesures optiques incluant des tomographies lasers et des photographies avec caméra rapide.

Cette expérience a été choisie car elle a été simulée par Enaux pendant sa thèse afin de valider la méthode de dépôt d'énergie dans le code AVBP du CERFACS [39].

Un seizième de sphère est maillée pour simuler le noyau de flamme. Il est visible sur la figure 2.9. 1 407 000 mailles de $2.5 \times 10^{-5}m$ de longueur moyenne sont utilisées pour décrire le noyau de flamme. La longueur moyenne a été déterminée par la racine cubique du volume moyen des mailles. Des conditions de symétrie sont imposées sur les côtés de la coupe de sphère et une condition de sortie non réfléchissante est employée sur la surface extérieure de la sphère. La sortie non réfléchissante permet d'atténuer presque totalement la réflexion de l'onde de choc due au dépôt d'énergie. Le mélange est initialement à température et pression atmosphérique avec des proportions stoechiométriques d'air et de propane. Pour le modèle de dépôt d'énergie, les mêmes paramètres que dans la simulation d'Enaux [39] sont employés et sont visibles dans le tableau 2.2. Ces paramètres sont cohérents avec les observations expérimentales de Renou [111].

L'intégration en temps a été réalisée soit avec un schéma implicite RKI2 soit explicite RK3 sans observer de différences dans les résultats. L'intégration spatiale a été réalisée selon un schéma de Roe [116] du même type que ceux présentés dans la section 1.6.1.a).

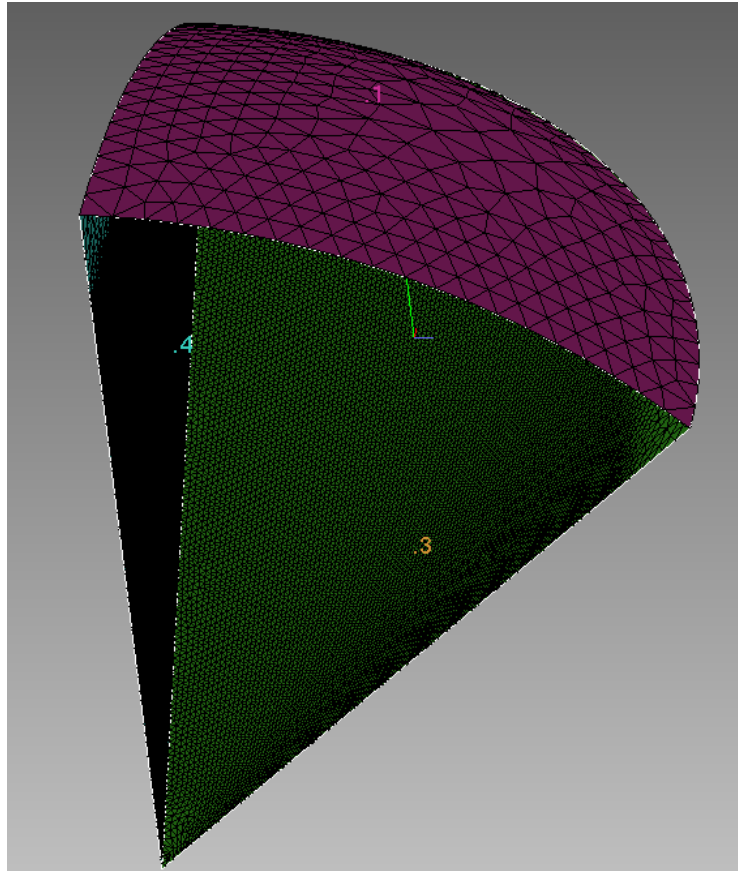


Figure 2.9 : Maillage pour la simulation de l'allumage. La face 1 correspond à la sortie. Les faces 2, 3 et 4 ont des conditions de symétrie.

2.3.2 Vérification de l'expansion du noyau de flamme

Afin de valider la simulation d'allumage, l'évolution du rayon du noyau de flamme au cours du temps est comparée entre les simulations numériques d'Enaux, celle de cette thèse et les résultats expérimentaux de Renou et Boukhalfa. Le rayon de flamme R est calculé en fonction de la proportion de gaz brûlés selon la relation suivante :

$$R = \left(\frac{12}{\pi} V_T \left(1 - \frac{Y_F^{moy}}{Y_F^0} \right) \right)^{\frac{1}{3}} \quad (2.18)$$

avec :

- V_T le volume total du domaine de calcul
- Y_F^{moy} la fraction massique moyenne de propane dans le domaine
- Y_F^0 la fraction massique moyenne de propane dans les gaz frais

Cette définition fournit une évaluation du rayon du noyau de flamme via la consommation de carburant.

	Simulation
T_0 [K]	300
P_0 [Pa]	10^5
Δ_s [mm]	2
Δ_t [μ s]	120
ϵ_i [mJ]	2.5

Tableau 2.2 : Paramètres pour la simulation

Il est possible de voir sur la figure 2.10 que l'évolution du noyau de flamme se passe en deux temps. Dans un premier temps, le noyau de flamme grandit très rapidement sous l'effet du dépôt d'énergie. En effet, sous l'effet des très hautes température, la vitesse de flamme devient très importante. Ce phénomène appelé sur-adiabaticité a été constaté par Enaux [39] et Lacaze [69]. Il se produit quand la température des gaz frais est très importante. Cette température des gaz frais très importante conduit à une température de flamme largement supérieure à la température de flamme adiabatique. Le taux de réaction du carburant augmente en valeur absolue de manière exponentielle avec la température. Ainsi, quand la température des gaz frais est très importante, le taux de réaction peut devenir très important et la vitesse de flamme peut devenir beaucoup plus grande que dans des circonstances usuelles avec des gaz frais à une température inférieure à 500 K. La pente quasi-verticale de l'évolution du noyau de flamme vient peut être aussi de la formule utilisée pour le calculer. En effet, la fonction racine cubique possède une pente verticale en zéro. Ainsi, quand le noyau de flamme est très petit, son évolution peut sembler très rapide. Dans un deuxième temps, le noyau de flamme grandit à une vitesse proche de la vitesse de flamme. Les résultats de notre simulation sont en très bon accord avec les simulations précédentes [39] et avec les expériences de Renou et Boukhalfa[111].

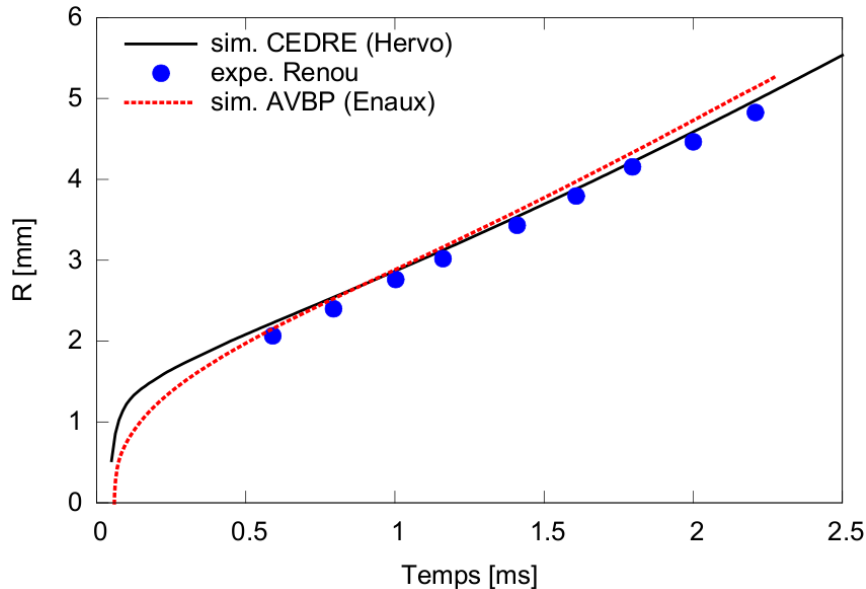


Figure 2.10 : Évolution du rayon du noyau de flamme en fonction du temps. Comparaison entre les résultats expérimentaux de Renou [111], les résultats issus de simulation d'Eaux [39] et les résultats de cette thèse

Une coupe représentant la pression avec en parallèle le taux de dégagement de chaleur sur la figure 2.11 permet de voir que l'onde de pression initiale provenant du dépôt d'énergie n'interagit pas de manière visible sur le taux de dégagement de chaleur. En effet, la zone où le taux de dégagement de chaleur est important ne suit pas la zone où l'onde de pression est présente.

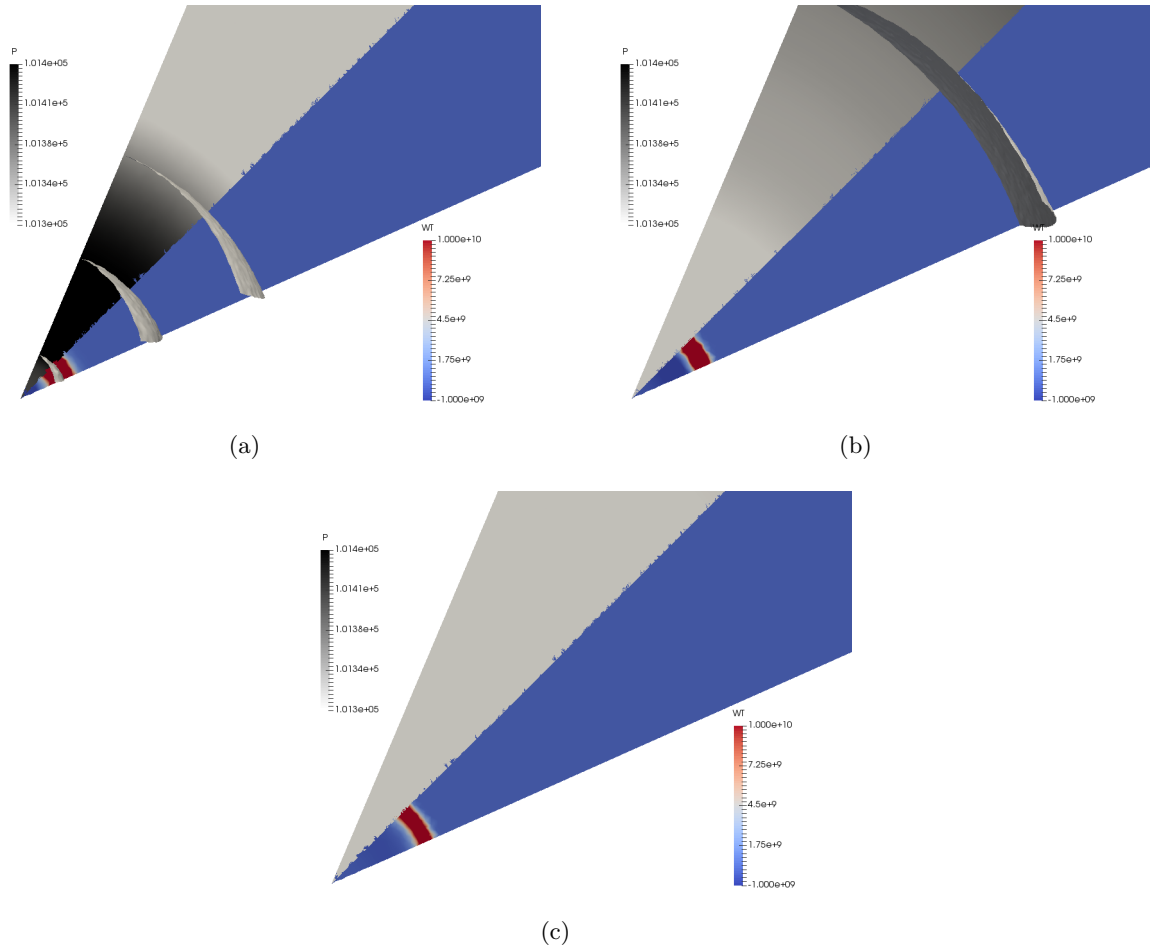


Figure 2.11 : Coupe colorée par la pression et le taux de dégagement de chaleur ainsi qu'un iso-contour de pression 101 350 Pa et 101 400 Pa à différents instants : 75 μ s 2.11a, 87 μ s 2.11b, 112 μ s 2.11c

La vitesse de flamme S_l est également analysée. Elle est calculée à partir de l'évolution du rayon du noyau de flamme R :

$$S_l = \frac{\rho_1}{\rho_0} \frac{dR}{dt} \quad (2.19)$$

avec :

- ρ_1 la masse volumique des gaz brûlés
- ρ_0 la masse volumique des gaz frais

Cette vitesse correspond donc à une vitesse de consommation. Elle est visible sur la figure 2.12. La

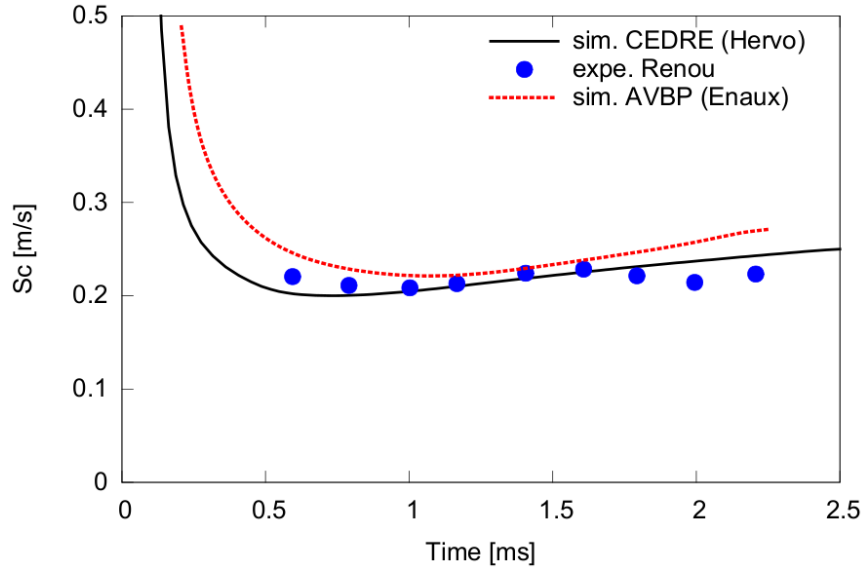


Figure 2.12 : Évolution de la vitesse de flamme en fonction du temps. Comparaison entre les résultats expérimentaux de Renou et Boukhalfa [111], les résultats issus de simulation d'Enaux [39] et les résultats de cette thèse

vitesse de flamme est en bon accord avec les simulations et expériences précédentes. La vitesse de flamme est très élevée au début puis se stabilise dans la deuxième phase d'expansion du noyau. La première phase correspond à une phase d'expansion des gaz chauds très rapide à cause du dépôt d'énergie. Cette expansion très rapide est due au phénomène de sur-adiabaticité présent quand la température des gaz frais est supérieure à la température adiabatique de flamme. La seconde phase correspond à l'expansion d'une flamme laminaire sphérique classique. La vitesse de flamme est plus faible que pour une flamme plane à cause de la courbure importante de la flamme. En effet, la courbure de la flamme tend à diminuer sa vitesse.

Un autre paramètre étudié est la courbure K du noyau de flamme. Il est calculé en fonction du rayon du noyau de flamme :

$$K = \frac{2}{R} \frac{dR}{dt} \quad (2.20)$$

La courbure est très forte dans les premiers instants mais diminue rapidement. Ici encore, un bon accord est observé avec les autres simulations et expériences comme visible sur la figure 2.13.

D'autres simulations réalisées avec un dépôt d'énergie initial différent montrent que le rayon de flamme obtenu à la fin de la première phase est différent. Cependant la vitesse de flamme se stabilise autour de la même valeur dans la deuxième phase. Ces résultats sont visibles sur la figure 2.14. Ils montrent l'importance de réaliser une évaluation raisonnable du dépôt d'énergie pour retrouver un noyau d'allumage de taille correcte.

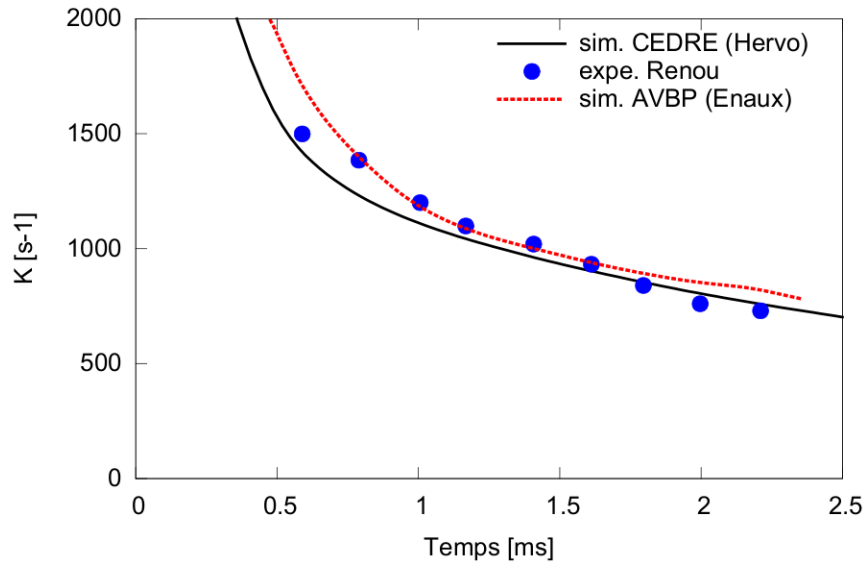


Figure 2.13 : Évolution de la courbure de la flamme en fonction du temps. Comparaison entre les résultats expérimentaux de Renou et Boukhalfa [111], les résultats issus de simulation d'Enaux [39] et les résultats de cette thèse

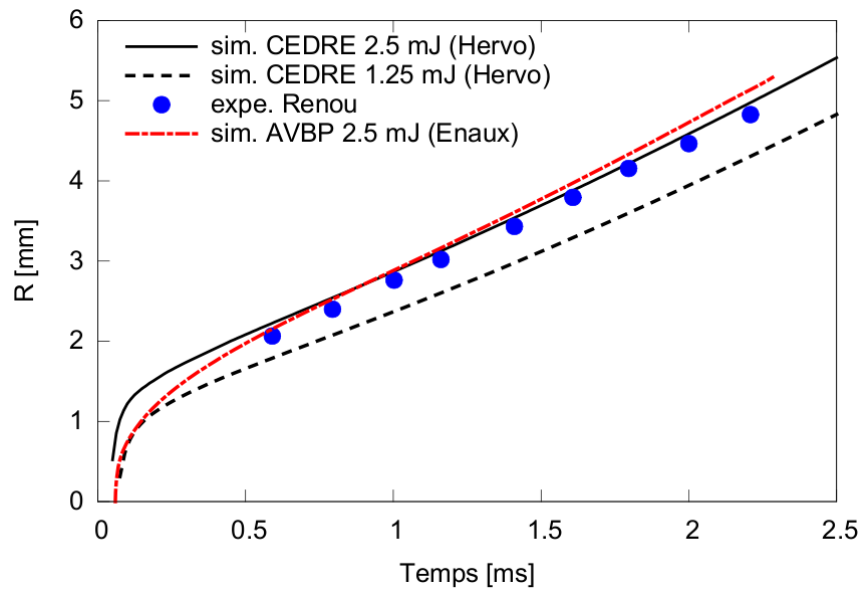


Figure 2.14 : Évolution du rayon du noyau de flamme en fonction du temps. Comparaison entre les résultats expérimentaux de Renou et Boukhalfa [111], les résultats issus de simulation d'Enaux [39] et les résultats de cette thèse pour deux valeurs d'énergie déposée

2.4 Étude de l'allumage d'un mélange diphasique

Une étude de l'impact de la présence d'une phase dispersée sur un allumage est effectuée. Pour cette étude, des simulations de l'allumage d'un mélange d'air et de kérosène sont réalisées sur la même

configuration que dans la section 2.3.1. La vérification de la vitesse de flamme monophasique et diphasique obtenue avec la cinétique globale à deux étapes KERO-BFER de Franzelli [48] a été effectuée et est présentée dans la section 5.1. Par rapport aux simulations précédentes, l'allumage d'un mélange d'air à pression ambiante et de gouttes de kérosène est simulée. Les gouttes de kérosène sont déposées de manière homogène dans la simulation. Plusieurs simulations avec différents diamètres de gouttes ont été effectuées. La force de traînée subie par les gouttes est obtenue via la corrélation de Schiller-Naumann 1.128. L'évaporation et le chauffage des gouttes sont fournis en utilisant la corrélation d'Abramzon-Sirignano 1.141 et 1.153.

Plusieurs remarques peuvent être effectuées. Le terme source d'énergie doit être plus important de manière à fournir l'énergie nécessaire à l'évaporation des gouttes pour former un mélange combustible. Ainsi, dans les simulations diphasiques, 20 mJ sont déposées contre 2.5 mJ dans le cas purement gazeux. L'onde de pression formée par l'expansion des gaz chauds liée au dépôt d'énergie peut interagir avec les gouttes. Une petite étude paramétrique a été effectuée en faisant varier le diamètre des gouttes déposées au début du calcul. Les petites gouttes de diamètre $10\ \mu\text{m}$ sont entraînées par l'onde de pression en dehors du front de flamme. Ces gouttes vont donc être dans une zone où la température est trop faible pour qu'une évaporation significative se produise. Ainsi, les réactions de combustion ne peuvent pas s'effectuer par manque de carburant à température suffisante pour initier une réaction de combustion. Par contre, les gouttes plus grandes restent dans la zone chauffée par le gaz chaud où elles s'évaporent. Cette situation est visible sur la figure 2.15 issue d'une simulation avec des gouttes de $25\ \mu\text{m}$ de diamètre. Cette évaporation permet d'alimenter un front de flamme se propageant vers

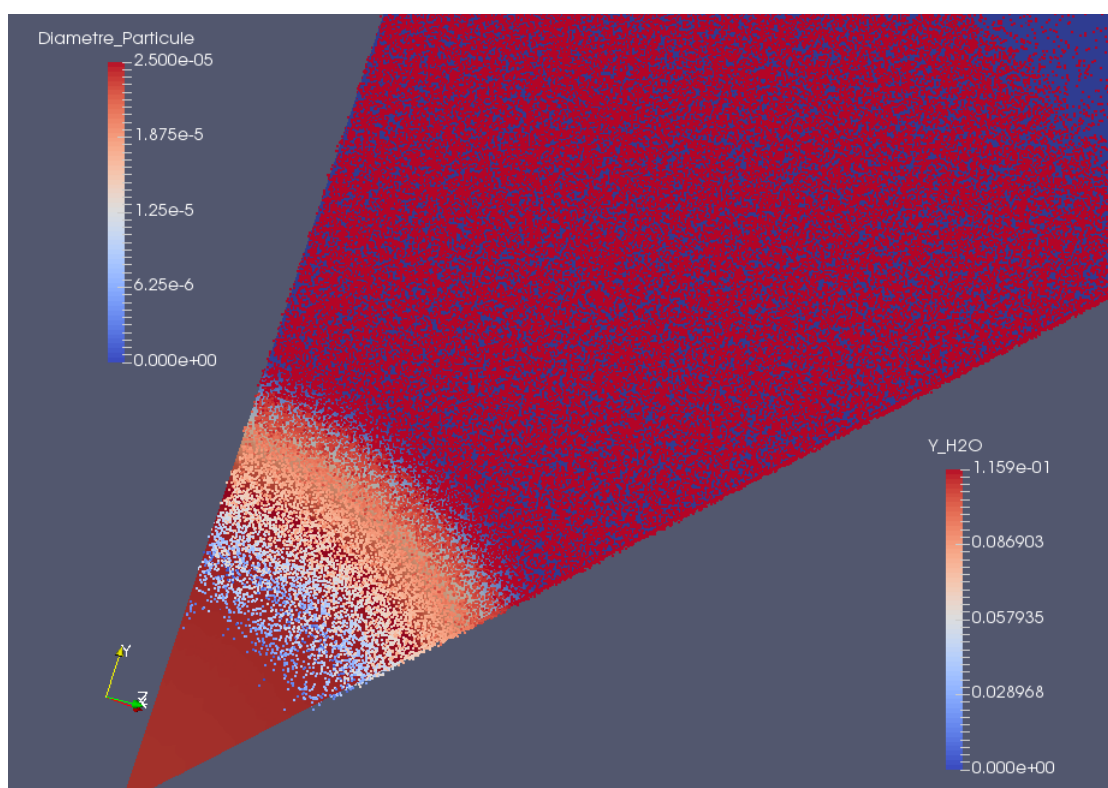


Figure 2.15 : Gouttes colorées par diamètre sur un champ de fraction massique d'eau

l'extérieur de la sphère. Pour des gouttes de grands diamètres supérieures à 50 μm , l'évaporation de carburant est très lente à cause de leur taille. De ce fait, la température du gaz dans le noyau de gaz chaud redescend à des températures trop faibles pour permettre des réactions de combustion. Ces différences de comportement s'expliquent par la différence dans l'inertie dynamique et thermique des gouttes. Les petites gouttes vont avoir un nombre de Stokes faible et vont être rapidement à l'équilibre avec le gaz. Elles vont donc être chassées en dehors du front de flamme par l'onde de pression et l'expansion des gaz chauds liées au dépôt d'énergie. Pour les très grandes gouttes, leur nombre de Stokes est élevé, donc elles ne sont presque pas affectées par l'expansion des gaz chauds. Mais leur taille fait que leur temps d'évaporation, proportionnel au carré du diamètre, est très grand comparé au temps de diffusion de la chaleur. Ainsi, il n'y aura pas assez de carburant évaporé pour initier des réactions de combustion pendant que le gaz est suffisamment chaud. Cette petite étude montre qu'il y a une étendue limitée de diamètres de goutte pour lesquelles l'allumage d'un mélange diphasique peut se produire.

Seule une analyse qualitative de ces simulations a été effectuée. En effet, aucune expérience détaillée d'allumage en écoulement laminaire diphasique n'a été trouvée dans la littérature scientifique existante. Il est en effet très difficile de réaliser un mélange assez homogène d'air et de carburant dans un gaz en écoulement laminaire.

2.5 Conclusion

Dans cette section, les phénomènes se produisant pendant une phase d'allumage ont été présentés. Différentes méthodes de simulation numérique de l'allumage ont été décrites et une méthode de simulation par dépôt d'énergie a été retenue. Bien que cette méthode ne reproduise pas l'ensemble des phénomènes physiques présents dans un allumage, elle permet de prédire correctement l'expansion du noyau de flamme dans la phase de décharge lumineuse.

L'implémentation de cette méthode de dépôt d'énergie dans le code CEDRE a été effectuée en plusieurs étapes. Tout d'abord, les polynômes décrivant les propriétés thermodynamiques ont été étendus à haute température. Les propriétés de transport n'ont pas été modifiées à cause de la difficulté de contrôler la vitesse de flamme en les modifiant. Ensuite, les vitesses de flamme en écoulement laminaire purement gazeux ont été vérifiées. Enfin, un terme source a été ajouté à l'équation d'énergie. Le dépôt du terme source a été validé au niveau de sa forme et du montant d'énergie déposée. Cette méthode de dépôt d'énergie a été validée par une comparaison de l'expansion du noyau de flamme et de sa courbure dans le cadre d'une simulation numérique réalisée avec CEDRE, d'une simulation réalisée avec AVBP [39] et d'une expérience réalisée par Renou et Boukhalfa [111]. Cette simulation a montré un très bon accord avec les résultats expérimentaux et les résultats simulés avec AVBP. Dans les premiers instants, une très importante vitesse de consommation a été observée. Ceci est dû à un phénomène de sur-adiabaticité, la vitesse des gaz frais étant supérieure à la température adiabatique de flamme. L'absence de prise en compte des phénomènes électriques se produisant pendant la phase de claquage et la phase d'arc dans la méthode de dépôt d'énergie conduit à une incertitude importante sur le montant d'énergie effectivement transmis au gaz. D'autres méthodes prenant en compte le plasma dans les simulations sont en cours de recherche à l'ONERA [74].

Une simulation d'allumage d'un mélange diphasique d'air et de kérosène a été effectuée. Elle a permis d'illustrer la nécessité d'augmenter le terme source d'énergie déposée. De plus, elle a permis

d'observer que les petites gouttes étaient entraînées par l'expansion des gaz chauds causée par le dépôt d'énergie. Ainsi, elles se retrouvent dans une zone à basse température ne permettant pas la création d'un mélange pouvant brûler. Les gouttes de grands diamètres restent dans une région où les gaz sont chauds et contribuent à apporter du carburant par évaporation pour former un mélange pouvant brûler. Une flamme peut ainsi se propager dans l'écoulement si suffisamment de gouttes avec un diamètre compris dans la bonne gamme de diamètre sont présentes près du dépôt d'énergie. Les gouttes de la bonne gamme de diamètre sont suffisamment grandes pour ne pas être entraînées par l'expansion des gaz chauds mais pas trop grandes pour que l'évaporation se produise rapidement par rapport à la diffusion de la chaleur.

Dans la prochaine section, l'écoulement gazeux non réactif dans la maquette mono-secteur du banc MERCATO va être simulé.

Troisième partie

Simulation de la maquette monosecteur du banc MERCATO

Chapitre 3

Simulations numériques de l'écoulement turbulent monophasique inerte de la configuration MERCATO

Dans ce chapitre, la capacité du code CEDRE à simuler un écoulement gazeux turbulent non-réactif est étudiée.

La première étape consiste à choisir une configuration à simuler avec suffisamment de données expérimentales disponibles pour valider une simulation numérique. La configuration mono-secteur du banc MERCATO a été choisie et est présentée dans une première partie.

Ensuite, la mise en place de la simulation numérique est détaillée. Les paramètres numériques, le maillage et la méthodologie utilisée sont présentés.

Enfin, une dernière partie présente les champs moyens obtenus dans la simulation numérique. Les profils de vitesse, les pertes de charge et la fréquence de l'instabilité principale de l'écoulement sont également comparés avec des données expérimentales et des simulations numériques précédentes.

Sommaire

3.1	Présentation du banc MERCATO	86
3.1.1	<i>Description du MERCATO et de la maquette mono-secteur</i>	86
3.1.2	<i>Travaux effectués précédemment sur le MERCATO</i>	87
3.2	Mise en place de la simulation de l'écoulement gazeux non-réactif	91
3.3	Comparaison des résultats numériques aux résultats expérimentaux	92
3.3.1	<i>Vitesses de l'écoulement gazeux</i>	92
3.3.2	<i>L'instabilité tourbillonnaire PVC</i>	95
3.3.3	<i>Pertes de charge</i>	99
3.4	Conclusion	101

3.1 Présentation du banc MERCATO

L'acronyme MERCATO (Moyen Expérimental et de Recherche en Combustion Aérobie par Techniques Optiques) désigne un banc d'essai conçu pour étudier les phénomènes de combustion diphasique et plus particulièrement l'allumage de chambre de combustion. Ce banc peut accueillir différentes maquettes : mono-secteur ou tri-secteur. Dans la suite, l'appellation MERCATO désignera le banc d'essai et la maquette mono-secteur.

3.1.1 Description du MERCATO et de la maquette mono-secteur

Le banc d'essai est équipé de systèmes permettant de chauffer ou de refroidir le gaz et de diminuer la pression en entrée de chambre de manière à reproduire des caractéristiques d'utilisations de chambre de combustion à pression ambiante ou dans des conditions de haute altitude. La température du kérosène peut elle aussi être diminuée pour reproduire ces mêmes conditions. Les conditions de pression et de température possibles dans le banc MERCATO sont récapitulés dans le tableau 3.1. Les points de fonctionnement des principaux points étudiés sont présentés dans le tableau 3.2.

Paramètres	Plages de Valeurs
T_{kero}	[250 K, T_{amb}]
T_{air}	[240 K, 475 K]
P_{air}	[0.4 bar, 3 bar]

Tableau 3.1 : Conditions expérimentales possibles dans le MERCATO

La maquette mono-secteur présente une forme de parallélépipède rectangle de 130 mm sur 130 mm sur 284 mm. Des hublots transparents sont aménagés sur les parois afin de permettre des accès optiques pour les mesures expérimentales. Cette maquette est visible sur la figure 3.1

L'air est injecté dans un plénum où il est tranquilisé. Ensuite, l'air passe par un tourbillonneur qui va imprimer un mouvement de rotation à l'air à l'entrée de la chambre de combustion. Le carburant est injecté via un injecteur Makila DLN conçu par Turbomeca (maintenant Safran Helicopter Engines) inclus dans le tourbillonneur. Le liquide est injecté sous forme de nappe conique swirlée qui se déstabilise pour former des ligaments. Ce phénomène est appelé atomisation primaire. La déstabilisation de la nappe conduit à la formation de ligaments qui vont être pulvérisés en gouttes par les forces aérodynamiques. Cette dernière étape est nommée atomisation secondaire. À la sortie de la chambre, l'air est évacué par une trompe permettant de maintenir la chambre en dépression.

Pour l'allumage de la chambre de combustion, une bougie électrique pouvant fournir une énergie électrique de 400 mJ est employée. La bougie est vissée sur les parois de la chambre et sa position peut être variée sur l'ensemble des parois de la chambre.

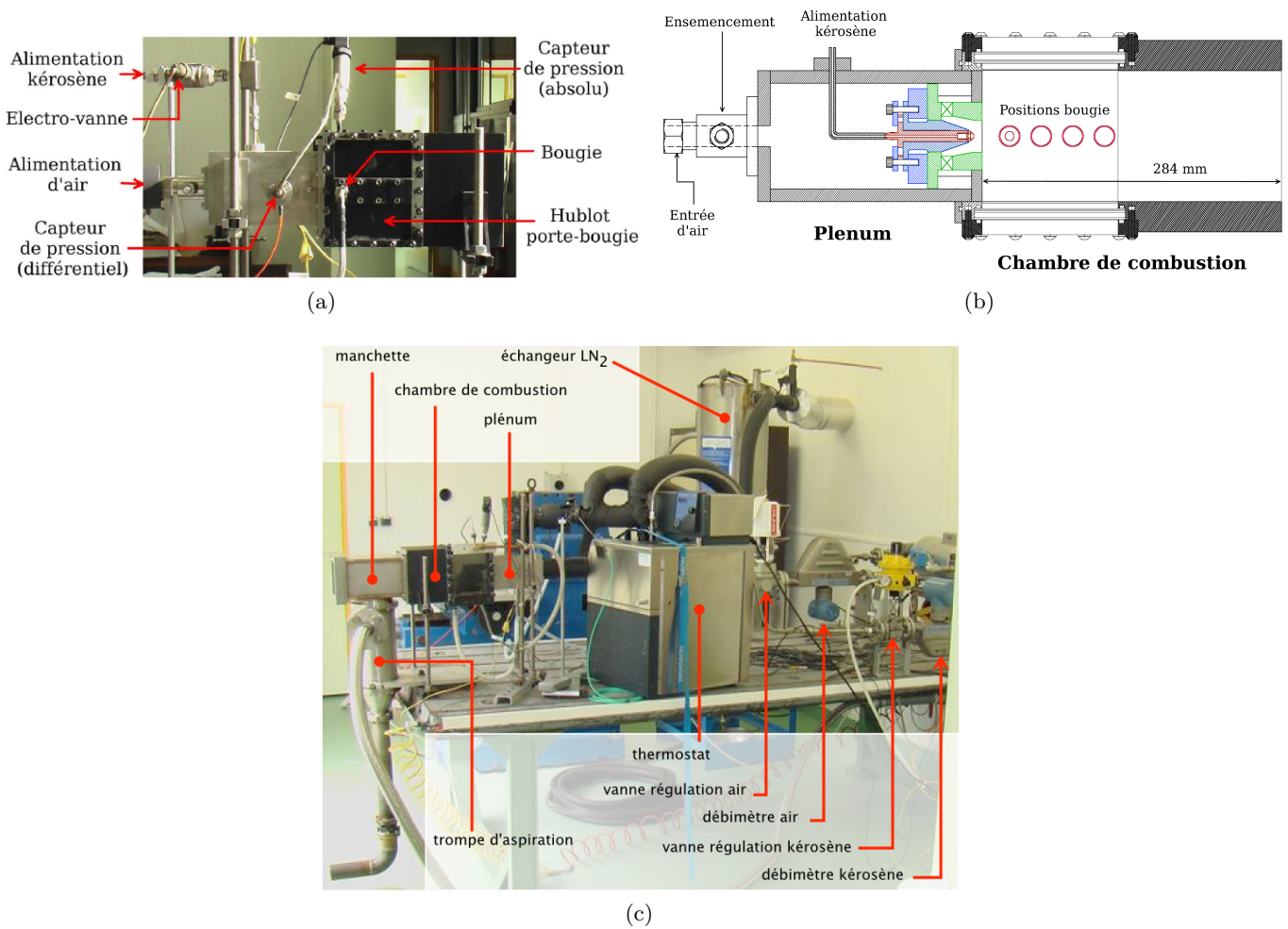


Figure 3.1 : Vue du banc Mercato : zoom sur la chambre de combustion 3.1a et schéma de la chambre 3.1b [81] et vue globale du banc 3.1c [51]

3.1.2 Travaux effectués précédemment sur le MERCATO

Plusieurs études expérimentales et numériques du banc MERCATO ont été effectuées. Au niveau expérimental, les thèses de Quintilla [109], García-Rosa [51] et Linassier [81] ainsi que les travaux menés par Lecourt [78] dans le cadre du projet TIMECOP ont permis de caractériser l'écoulement réactif et non-réactif à différentes conditions de température et de pression. Des cartographies d'allumage ont également été effectuées. Au niveau numérique, Ouarti [102], Lamarque [71], Lederlin [80], Senoner [123], Sanjosé [118], Vié [139], Bruyat [19], Linassier [81], Sierra Sánchez [125], Eyssartier [42], Hannebique [62] et Guedot [58] ont réalisé diverses simulations de l'écoulement gazeux et diphasique réactif et non-réactif. Les principaux paramètres physiques des points de fonctionnement majeurs étudiés précédemment sont récapitulés dans le tableau 3.2.

Nom du point	Auteur	T_g (K)	T_l (K)	\dot{m}_l (g/s)	\dot{m}_g (g/s)	P (bar)	Données disponibles	Études numériques associées
Point de mise en place	García-Rosa [51]	463	285	0, 1, 2	15	1	PIV : Vitesse gaz 5 plans PDA : Vitesse liquide 4 plans	García-Rosa [51] : Simulation RANS EL non-réactif Lamarque [72] : LES EE réactif Sanjosé [118] : LES EE non-réactif Senoner [123] : LES EL non-réactif Vié [139] : LES EE multi-classe Sierra Sánchez [125] : LES EE non-réactif
TIMECOP réactif	Lecourt [79]	293	293	1–3.5	11.5–35	1	PIV : Vitesse gaz 5 plans Pertes de charge Fréquence du PVC	
TIMECOP non-réactif	Lecourt [78]	463	285 – 293	0.45–2	6.6 – 19.8	1	Même que pour TIMECOP réactif plus PDA Vitesse liquide : 3 plans	Eyssartier [42] : LES EE non-réactif Guedot [58] : LES EL non-réactif
Point de référence	Linassier [81]	293	293	2.25	35	1	PIV : Vitesse gaz 5 plans PDA Vitesse liquide : 1 plan non-confiné Pertes de charges Fréquence du PVC Visualisations d'allumage	Linassier [81] : RANS EL non-réactif, réactif et allumage Eyssartier [42] : LES EE réactif et allumage Bruyat [19] : LES EL non-réactif et allumage Guedot [58] : LES EL réactif

Tableau 3.2 : Points de fonctionnement et travaux précédents réalisés sur le MERCATO

3.1.2.a) Techniques expérimentales utilisées

Diverses techniques ont été employées pour caractériser l'écoulement dans la chambre MERCATO, parmi lesquelles des techniques optiques non-intrusives. Ces techniques nécessitent la présence de traceurs pour déterminer la vitesse de l'écoulement. Pour un écoulement diphasique non-réactif, l'écoulement gazeux est suivi par l'ajout de gouttelettes d'huile tandis que les gouttes de carburant sont suivies directement dans une autre série de mesures. En écoulement réactif, des traceurs solides de type Zirconium (ZrO_2) sont utilisés pour suivre l'écoulement gazeux.

La technique LDA (Laser Doppler Anemometry) permet de mesurer la vitesse d'une particule au niveau d'un réseau de franges d'interférences créées par un faisceau laser. Une particule traversant le réseau de franges va diffuser de la lumière sous forme de bouffée Doppler dont la fréquence permet de déterminer la vitesse de la particule suivant la normale au réseau de franges. Deux composantes de vitesses peuvent être obtenues au point d'intersection de deux faisceaux laser en utilisant des faisceaux de longueur d'onde différentes. En réalisant une traversée horizontale et une traversée verticale, il est ainsi possible d'obtenir les vitesses axiales, radiales et tangentielles d'un écoulement axisymétrique. La figure 3.2 provenant de la thèse de Linassier [81] montre les traversées effectuées et les composantes de vitesses mesurées. La méthode PDA (Phase Doppler Anemometry) permet de mesurer le diamètre et

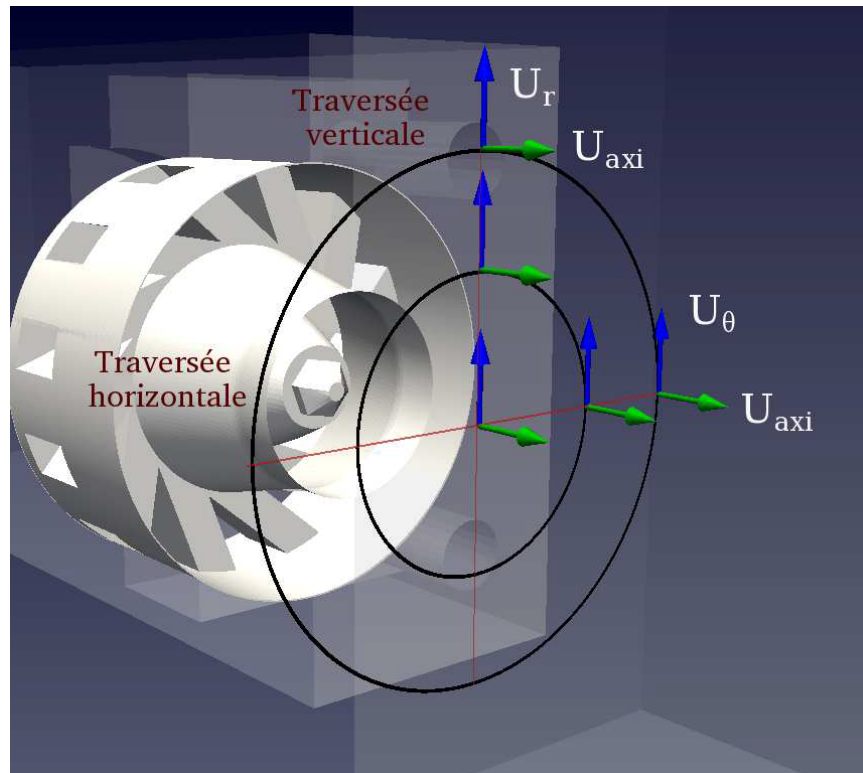


Figure 3.2 : Illustration des traversées expérimentales effectuées pour obtenir les trois composantes de vitesses [81]

la vitesse suivant deux composantes d'une particule. Elle permet d'obtenir le diamètre des particules à l'intersection des faisceaux laser à partir du déphasage des signaux Doppler reçus par deux détecteurs

différents.

La méthode PIV (Particule Image Velocimetry) permet une mesure du champ de vitesse instantanée dans un plan. Pour ce faire, deux images sont prises à des instants très proches et un algorithme d'inter-corrélation est employé pour retrouver les particules identiques entre les deux images et évaluer leur vitesse. Des visualisations directes avec une caméra rapide permettent de visualiser la forme de la flamme pendant les diverses phases de l'allumage. Une méthode de tomographie laser permet de visualiser la forme du spray de gouttes en les éclairant avec une nappe laser qui va être diffusée par l'ensemble des gouttes. L'intensité de la lumière diffusée est en effet liée linéairement à la surface de la goutte qui a diffusé la lumière.

Des capteurs de pression dans la chambre et dans le plenum permettent de calculer les pertes de charge entre le plenum et la chambre mais aussi la fréquence de l'instabilité PVC via une analyse du spectre de pression.

3.1.2.b) Travaux menés sur le MERCATO

L'une des premières campagnes de mesures exhaustives a été menée par García-Rosa [51]. Dans sa thèse, des mesures PIV ont permis de caractériser l'écoulement de la phase gazeuse en milieu non-réactif et des mesures PDA ont caractérisé l'écoulement de la phase dispersée en milieux réactif et non-réactif. Des simulations numériques ont été menées au CERFACS sur ces configurations afin de reproduire l'écoulement diphasique via des LES. La phase dispersée a été suivie par une méthode eulérienne dans les travaux de Lamarque [72], Sanjosé [118], Vié [139] et Sierra Sánchez [125] et via une méthode lagrangienne dans les travaux de Senoner [123]. Ces simulations ont reproduit correctement l'écoulement gazeux. La vitesse de la phase dispersée est convenablement reproduite mais la distribution de taille des particules et leur répartition dans la chambre ne sont reproduites qu'approximativement.

Par la suite, Lecourt a mené dans le cadre du projet TIMECOP une campagne d'essai pour caractériser plus finement l'écoulement diphasique réactif et non-réactif [79]. Ainsi, en plus de mesures de vitesse, des mesures de pertes de charges et des mesures de la fréquence de l'instabilité tourbillonnaire appelée Precessing Vortex Core (PVC) ont été effectuées. De plus, des probabilités d'allumage ont été déterminées pour différentes positions de la bougie. L'étude statistique menée par Lang et Lecourt [73] a permis d'observer que la probabilité d'allumage tend vers une asymptote à 37% à la fin de l'essai. Durant ces essais, la probabilité d'allumage augmentait au cours de l'expérience sans qu'une raison claire ait pu être identifiée. Une hypothèse possible est que les claquages successifs de la bougie chauffait localement la paroi ce qui diminuait les risques de coincement du noyau de flamme en paroi.

Ensuite, Linassier [81] a réalisé des mesures sur un point nommé point de référence. Il a caractérisé les vitesses du gaz et des particules ainsi que la granulométrie des particules. De plus, il a réalisé des visualisations par tomographie laser de l'allumage. Des simulations numériques de l'écoulement dans les conditions du point de référence ont été effectuées. Linassier a réalisé des simulations RANS de l'écoulement diphasique non-réactif et réactif et des simulations d'allumages. Bruyat [19] a réalisé des LES de l'écoulement diphasique non-réactif et a réalisé des simulations d'allumage. Dans ces simulations, la phase dispersée est représentée par une méthode lagrangienne. L'écoulement non-réactif était correctement reproduit. Ces simulations d'allumage ont prédit des vitesses d'allumage beaucoup trop rapides et une montée en pression beaucoup trop importante comparée aux données

expérimentales. Eyssartier [42] a réalisé des LES diphasiques non-réactives et réactives. La phase dispersée est suivie par une méthode eulérienne. Il a également réalisé des simulations d'allumage et un outil de cartographie des probabilités d'allumage dans la chambre. Dans ces simulations, l'allumage semble trop rapide d'après les images de champs instantanés disponibles. L'écoulement non-réactif est bien reproduit. La position des zones où l'allumage est possible est approximativement retrouvée avec l'outil de cartographie d'allumage. Guédot [58] a réalisé des LES diphasiques de l'écoulement non-réactif et réactif dans le MERCATO. L'écoulement était bien reproduit.

Dans cette thèse, le point de référence a été choisi car il s'agit du seul point de mesure expérimentale possédant des visualisations d'allumage et une caractérisation exhaustive de l'écoulement non-réactif.

3.2 Mise en place de la simulation de l'écoulement gazeux non-réactif

Dans cette thèse, un maillage non-structuré constitué de 3 758 000 tétraèdres est utilisé. Ce nombre de mailles a été choisi afin d'obtenir un maillage plus raffiné que celui utilisé dans les simulations numériques réalisés avec AVBP [42]. Ce maillage est visible sur la figure 3.3. Ce maillage est raffiné dans le tourbillonneur et en entrée de chambre afin de capturer correctement les structures turbulentes qui s'y développent.

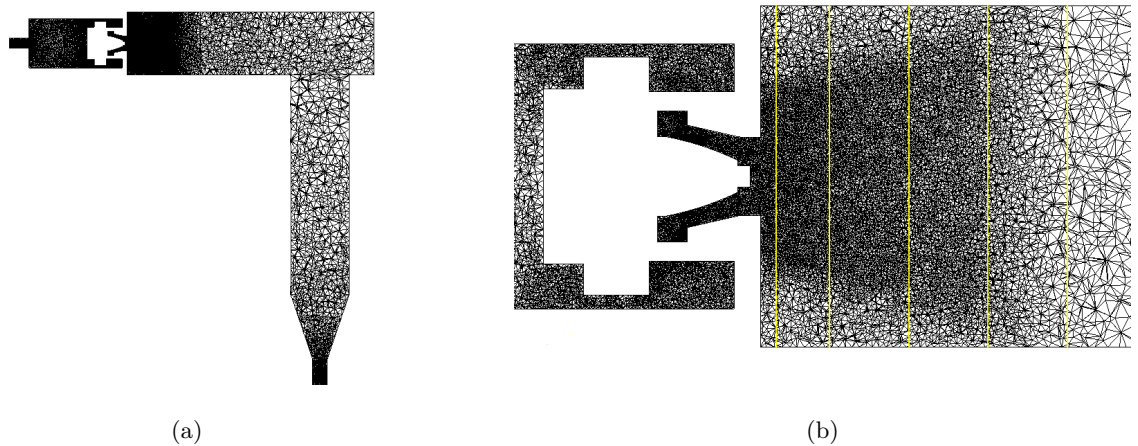


Figure 3.3 : Maillage utilisé dans notre simulation numérique : vue globale 3.3a et zoom en entrée de chambre de combustion 3.3b

Le calcul a été réalisé en parallèle sur 256 processeurs. Le partitionnement a été réalisé à la volée en utilisant la librairie PTScotch [25].

Pour initialiser ce calcul, une simulation RANS a été réalisée pendant quelques millisecondes. Cette simulation a permis d'initialiser une LES avec des champs plus réalistes. Les différents paramètres physiques utilisés pour la simulation LES sont résumés dans le tableau 3.3.

L'intégration temporelle est réalisée avec un schéma implicite de Runge-Kutta d'ordre 2. La discrétisation spatiale est réalisée avec un schéma de Roe d'ordre 2 couplé avec un limiteur de Van Leer [134]. La turbulence de sous-maille est modélisée par le modèle de Smagorinsky [127] et une loi de paroi est

Intégration en temps	RKI2
Pas de temps	$\Delta_t = 10^{-6}s$
Schéma de discrétisation spatiale	Schéma de Roe d'ordre 2 [116]
Modèle de turbulence de sous-maille	Smagorinsky [127] ($C_s = 0.1$)
Paroi	Loi de paroi CEDRE et paroi adiabatique

Tableau 3.3 : Paramètres utilisés pour la LES de l'écoulement gazeux non-réactif

utilisée pour toutes les surfaces. Plus de détails sur ces modèles sont disponibles dans la section 1.2.2.

Pour cette simulation, différentes conditions aux limites sont utilisées et sont récapitulées dans le tableau 3.4. Pour l'entrée du plénum, une entrée non-réfléchissante imposant un débit d'air de 35 g s^{-1} à une température de 293 K est utilisée. La sortie de la trompe en sortie du domaine de calcul est représentée par une sortie non réfléchissante à la pression de 101 300 Pa. Les parois sont adiabatiques.

Entrée du plénum	Entrée avec débit d'air imposé $\dot{m}_g = 35 \text{ g/s}$ $T_g = 293$
Sortie de la trompe	Sortie non réfléchissante $P = 101300 \text{ Pa}$
Paroi	Loi de paroi CEDRE et paroi adiabatique

Tableau 3.4 : Conditions aux limites utilisés pour la LES de l'écoulement gazeux non-réactif

200 ms de temps physiques sont simulées pour permettre à l'écoulement de s'établir correctement dans l'ensemble du domaine de calcul. Ensuite, les grandeurs principales de l'écoulement (vitesse, pression, température, composition massique, etc.) sont enregistrées et moyennées sur une période de 450 ms pour pouvoir réaliser une étude statistique. Cette période correspond à environ 4 temps de passage de l'écoulement dans l'ensemble de la chambre. Les moyennes sont effectuées à la volée pendant le calcul.

3.3 Comparaison des résultats numériques aux résultats expérimentaux

Afin de vérifier la précision de la simulation numérique, des comparaisons avec les résultats expérimentaux sont effectuées.

3.3.1 Vitesses de l'écoulement gazeux

Sur la figure 3.4 le champ de vitesse axiale moyenne peut être observé. Sur cette figure, la position des plans de mesures où des données expérimentales sont disponibles est notée par des lignes jaunes. Des iso-lignes de vitesse sont également visibles en trait noir.

L'air est injecté dans la chambre via un tourbillonneur qui va induire un mouvement de rotation de l'écoulement. Ce mouvement de rotation est utile pour créer une zone de recirculation au centre de la chambre et permettre une stabilisation ultérieure de la flamme. Des zones de recirculation sont également présentes dans les coins de la chambre du côté de l'entrée d'air à cause du brusque

changement de section entre le plénum et la chambre de combustion. Ce brusque changement de géométrie va se comporter comme une marche dans un écoulement, ce qui permet de créer des zones de recirculation dans les coins de la chambre. Sur une vue en coupe transversale 3.5, il est possible

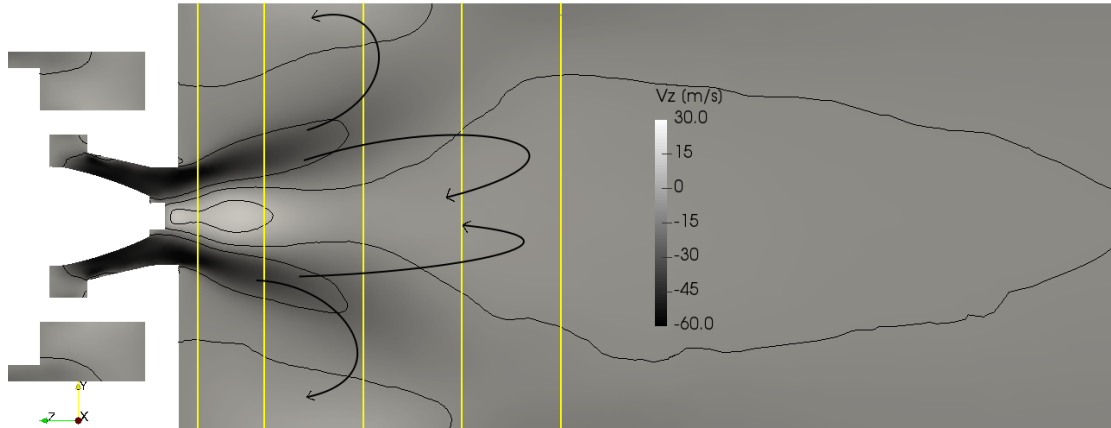


Figure 3.4 : *Champ de vitesse axiale moyenne. Iso-lignes de vitesse axiale moyenne -20 m s^{-1} , 0 m s^{-1} et 20 m s^{-1} en trait noir. Plans de mesures expérimentaux en trait jaune. Les flèches indiquent les zones de recirculation.*

de remarquer les zones de recirculations présentes dans les coins de la chambre de combustion. Ces zones sont observées expérimentalement par l'impact des gouttes de kérosène sur la paroi dans ces zones de recirculation latérales. Les champs de vitesse verticales (Fig. 3.7) et transverses (Fig. 3.6) moyennes mettent en évidence le mouvement de rotation imprimé à l'écoulement dans l'injecteur swirlé. L'expansion du jet dans la chambre de combustion due à l'augmentation soudaine de section entre le plénum et la chambre est également bien mis en évidence sur ces champs moyens.

Pour une comparaison plus quantitative, les profils de vitesses moyennes et de fluctuations de vitesses sont comparés pour les différentes composantes de vitesses à différents plans de mesure situés à 6, 26, 56, 86 et 116 mm du fond de la chambre. Les résultats issus de cette simulation numérique sont comparés aux résultats expérimentaux obtenus par Linassier [81] et aux résultats numériques obtenus par Eyssartier [42]. Pour les comparer plus facilement, toutes les vitesses sont adimensionnées en les divisant par une vitesse d'entrée dans le plénum de 92.45 m s^{-1} . Sur le profil de vitesse axiale moyenne visible figure 3.8, il est possible de remarquer que la zone de recirculation axiale et l'expansion du jet sont bien prédites par les simulations numériques. En regardant les fluctuations de vitesse axiale figure 3.9, on peut observer un très bon accord entre les données expérimentales et nos simulations numériques. Les pics de fluctuations de vitesses liés au jet sont bien reproduits. La vitesse moyenne transverse est elle aussi très bien reproduite comme visible sur la figure 3.10. La vitesse moyenne verticale est bien reproduite, comme visible sur la figure 3.11. Ces profils de vitesses moyennes montrent que la vitesse de rotation fournie à l'écoulement par l'injecteur swirlé est bien reproduite en moyenne. Les fluctuations de vitesses verticales 3.13 et transverses 3.12 sont elles aussi en très bon accord entre nos simulations numériques et les résultats expérimentaux et numériques précédents. Ainsi, les pics de fluctuations de vitesses sont bien prédits. L'ensemble de ces profils de vitesse montrent un très bon

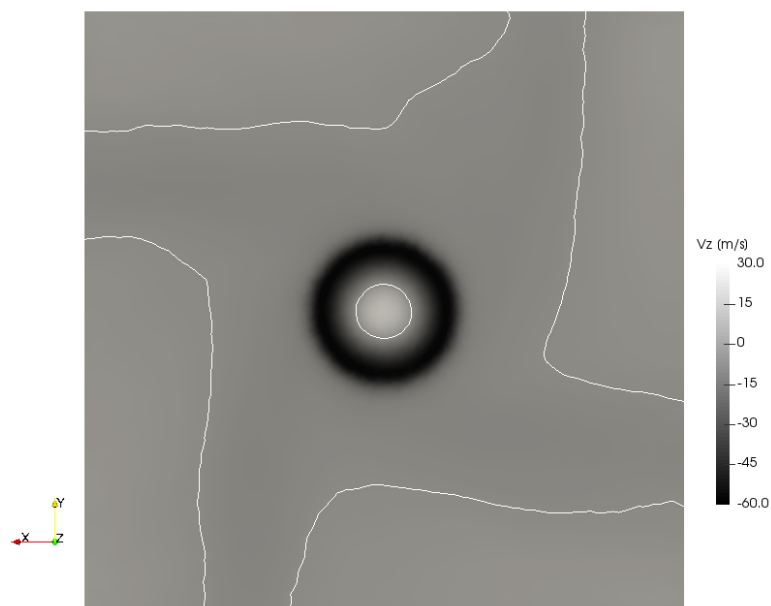


Figure 3.5 : Champ de vitesse axiale moyenne vue en coupe transversale à 6 mm. Lignes de vitesse axiale nulle en blanc.

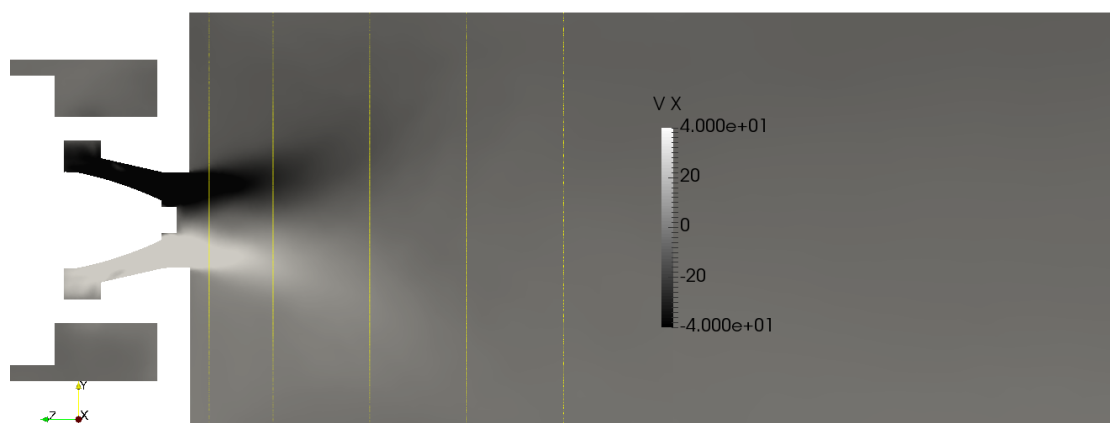


Figure 3.6 : Champ de vitesse transverse moyenne. Plans de mesures expérimentaux en trait jaune

accord quantitatif entre les expériences et les simulations numériques menées avec CEDRE malgré quelques défauts de convergence visibles notamment sur les derniers plans de mesures à 86 mm et 116 mm.

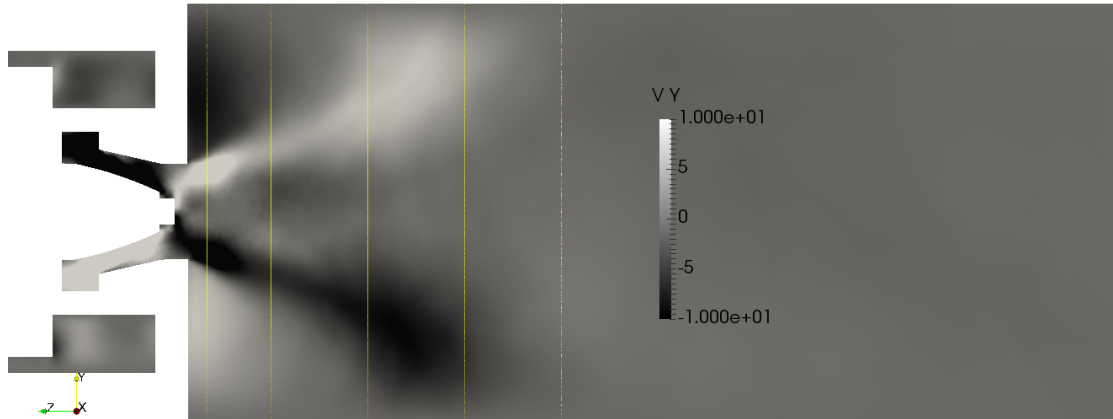


Figure 3.7 : Champ de vitesse verticale moyenne. Plans de mesures expérimentaux en trait jaune

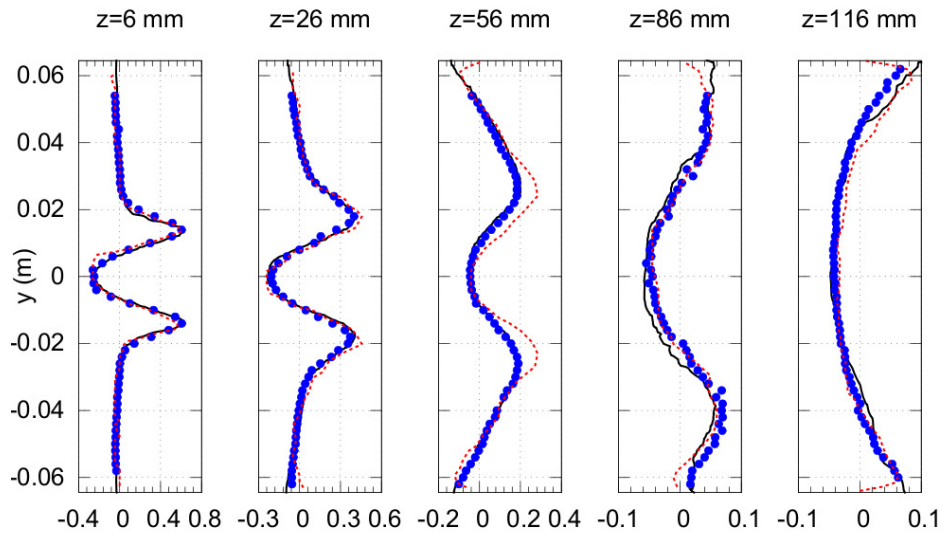


Figure 3.8 : Profils de vitesse axiale moyenne. Les traits noirs correspondent à la simulation CEDRE. Les pointillées rouges correspondent à la simulation AVBP d'Eyssartier [42]. Les points bleus correspondent aux données expérimentales de Linassier [81]

3.3.2 L'instabilité tourbillonnaire PVC

Le mouvement de rotation donné par le tourbillonneur à l'écoulement va créer une zone de recirculation centrale. Ce phénomène est dû à un gradient de pression radial qui va se former à cause du mouvement de rotation. En suivant un élément de fluide infinitésimal, il est possible d'écrire les équations de conservation en coordonnées cylindriques, en faisant l'hypothèse d'un écoulement stationnaire, axisymétrique, avec des gradients axiaux négligeables par rapport aux gradients radiaux. Ces

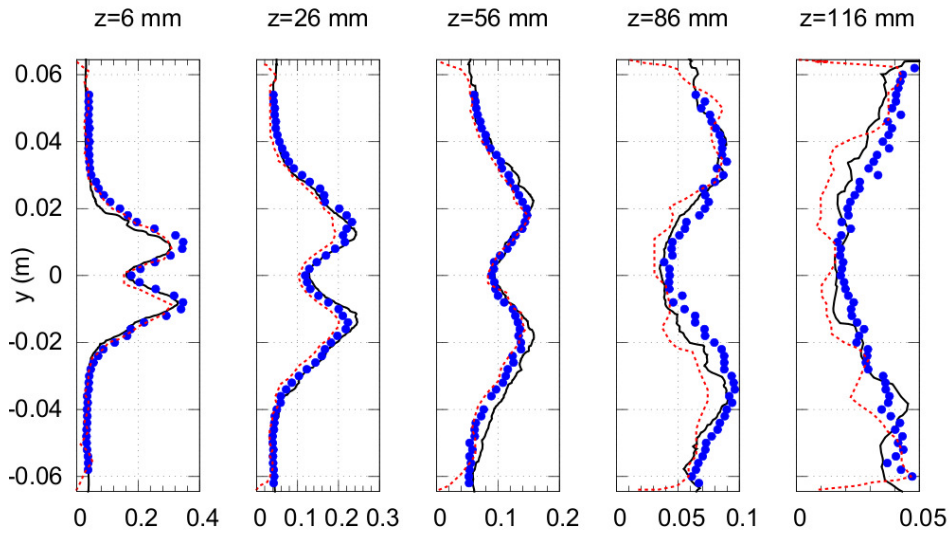


Figure 3.9 : Profils de fluctuations de vitesse axiale. Les traits noirs correspondent à la simulation CEDRE. Les pointillées rouges correspondent à la simulation AVBP d'Eyssartier [42]. Les points bleus correspondent aux données expérimentales de Linassier [81]

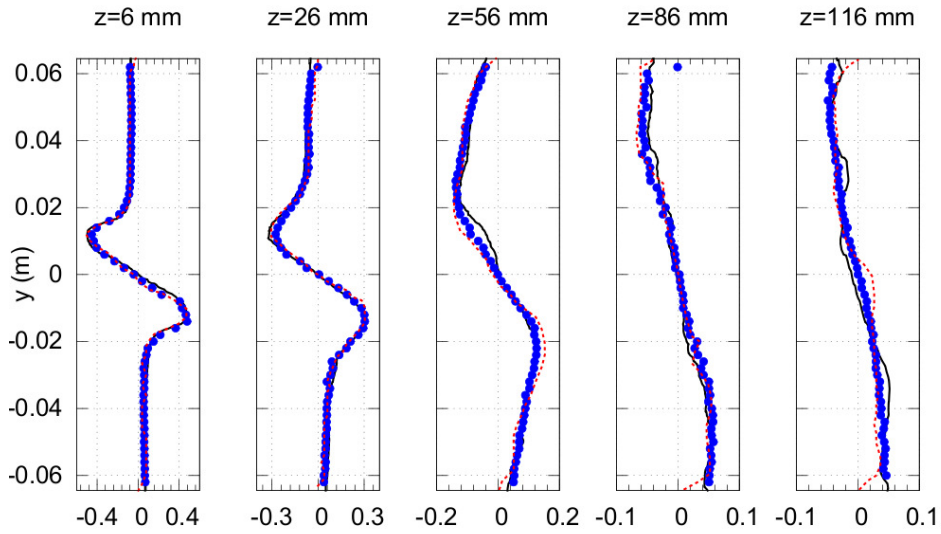


Figure 3.10 : Profils de vitesse transverse moyenne. Les traits noirs correspondent à la simulation CEDRE. Les pointillées rouges correspondent à la simulation AVBP d'Eyssartier [42]. Les points bleus correspondent aux données expérimentales de Linassier [81]

équations sont dérivées de manière plus complète dans la thèse de Galley [50].

$$\frac{\partial p}{\partial r} = \frac{\rho_g u_\theta^2}{r} \quad (3.1)$$

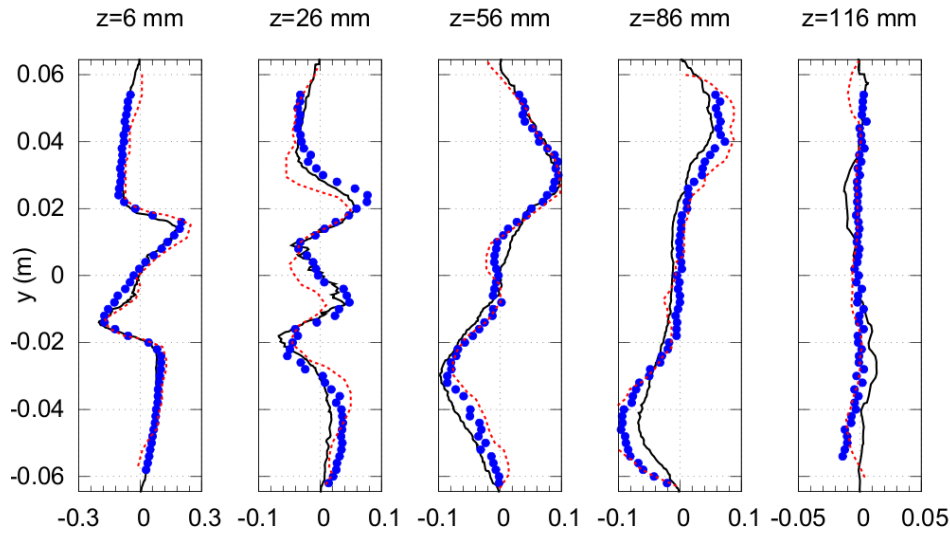


Figure 3.11 : Profils de vitesse verticale moyenne. Les traits noirs correspondent à la simulation CEDRE. Les pointillées rouges correspondent à la simulation AVBP d'Eyssartier [42]. Les points bleus correspondent aux données expérimentales de Linassier [81]

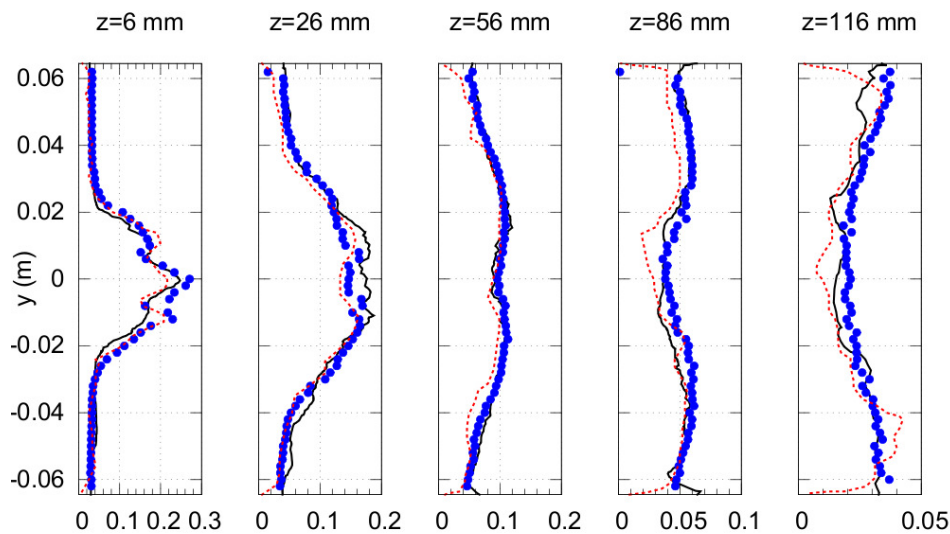


Figure 3.12 : Profils de fluctuations de vitesse orthoradiale. Les traits noirs correspondent à la simulation CEDRE. Les pointillées rouges correspondent à la simulation AVBP d'Eyssartier [42]. Les points bleus correspondent aux données expérimentales de Linassier [81]

où u_θ est la vitesse tangentielle de l'écoulement. Lors de l'élargissement brusque de la section à l'entrée de la chambre, la vitesse tangentielle va diminuer à cause de la conservation du moment de rotation ru_θ . Cette diminution de la vitesse tangentielle va créer un gradient de pression radial. Pour obtenir

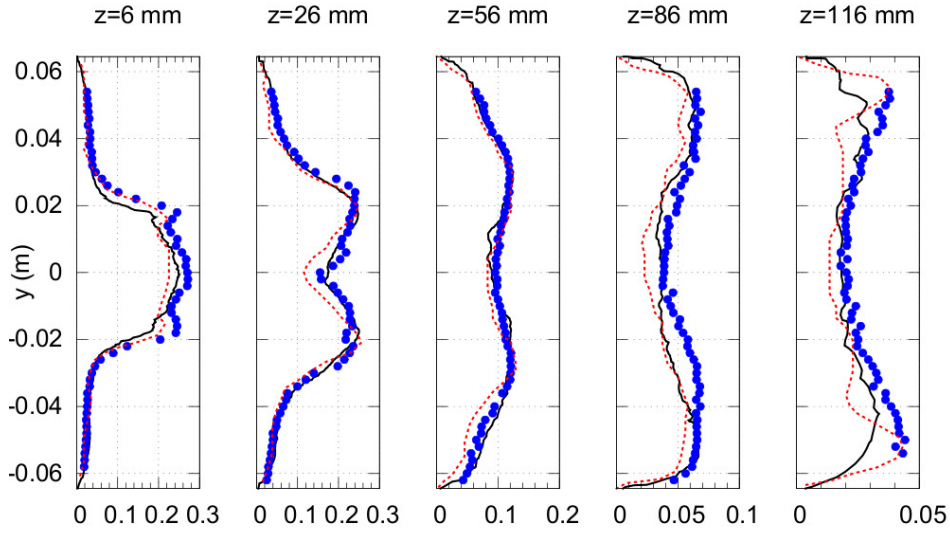


Figure 3.13 : Profils de fluctuations de vitesse radiale. Les traits noirs correspondent à la simulation CEDRE. Les pointillées rouges correspondent à la simulation AVBP d'Eyssartier [42]. Les points bleus correspondent aux données expérimentales de Linassier [81]

plus d'informations, il est possible d'écrire les équations de conservation selon les autres axes :

$$\frac{\partial}{\partial r}(\rho_g u_r u_\theta) + \frac{\partial}{\partial z}(\rho_g u_z u_\theta) + 2 \frac{\rho_g u_r u_\theta}{r} = 0 \quad (3.2)$$

où u_r est la vitesse radiale de l'écoulement.

$$\frac{\partial}{\partial r}(\rho_g u_r u_z) + \frac{\partial}{\partial z}(\rho_g u_z^2) + \frac{\rho_g u_r u_z}{r} = -\frac{\partial P}{\partial z} \quad (3.3)$$

Des résultats intéressants peuvent être obtenus en intégrant l'équation de conservation de la quantité de mouvement tangentielle 3.2 sur une section transverse à l'écoulement après l'avoir multiplié par r^2 . Ces opérations ont été effectuées dans la thèse de Guedot [58] et sont rappelées ci-dessous.

$$\int_0^R \int_0^{2\pi} \left(r^2 \frac{\partial}{\partial r}(\rho_g u_r u_\theta) + r^2 \frac{\partial}{\partial z}(\rho_g u_z u_\theta) + 2r \rho_g u_r u_\theta \right) dr d\theta = 0 \quad (3.4)$$

En combinant les termes en $u_r u_\theta$, on trouve :

$$\frac{\partial}{\partial z} \int_0^R (2\pi r^2 \rho_g u_z u_\theta) dr = - \int_0^R \left(\frac{\partial}{\partial r} 2\pi \rho_g r^2 u_r u_\theta \right) dr \quad (3.5)$$

Le terme de gauche peut être défini comme la dérivée axiale du flux axial de quantité de mouvement tangentielle noté G_θ . On peut alors écrire :

$$\frac{\partial}{\partial z} G_\theta = -(2\pi \rho_g r^2 u_r u_\theta)_{r=R} \quad (3.6)$$

Il est important de remarquer que $u_r(R) = 0$. En effet, l'écoulement est dans une chambre et donc la vitesse est nulle en paroi. Si on considère un écoulement libre, le fluide est considéré au repos à l'infini

et donc la vitesse est encore nulle à l'infini. Ainsi, on peut observer que le flux axial de quantité de mouvement tangentielle se conserve selon l'axe.

$$\frac{\partial}{\partial z} G_\theta = 0 \quad (3.7)$$

De même, en intégrant l'équation de conservation de la quantité de mouvement axiale, on obtient :

$$\frac{\partial}{\partial z} \int_0^R (2\pi r (\rho_g u_z^2 + P)) dr = - \int_0^R \left(\frac{\partial}{\partial r} 2\pi \rho_g r u_r u_z \right) dr \quad (3.8)$$

Le terme de gauche correspond à la définition du flux axial de quantité de mouvement axiale noté G_z . On a alors :

$$\frac{\partial}{\partial z} G_z = -(2\pi \rho_g r u_r u_z)_{r=R} = 0 \quad (3.9)$$

Ainsi, le flux axial de quantité de mouvement axiale se conserve selon l'axe. Le nombre de Swirl S compare ces deux quantités :

$$S = \frac{G_\theta}{R G_z} \quad (3.10)$$

Différents comportements peuvent être observés selon la valeur du nombre de swirl. Pour un nombre de swirl supérieur à 0.6, une zone de recirculation centrale va se former selon Syred [129]. Cette zone de recirculation va être accompagnée par une structure tourbillonnaire possédant une énergie importante nommée Precessing Vortex Core (PVC). Dans la configuration mono-secteur du banc MERCATO, le nombre de swirl a été évalué à 0.78.

Dans notre simulation numérique, l'instabilité PVC est bien reproduite. Elle est visualisée via un iso-contour de pression 99 500 Pa sur la figure 3.14. Une analyse spectrale de la pression dans la chambre permet de déterminer la fréquence de l'instabilité PVC. La pression est mesurée par un capteur situé dans la zone de recirculation latérale de la chambre. Sa position est visible sur la figure 3.14. L'analyse fréquentielle du signal de pression est réalisée via un algorithme de type Fast Fourier Transform (FFT). Il est visible sur la figure 3.15 Dans notre simulation, le PVC possède une fréquence de $1052 \pm 2 Hz$ qui correspond à la fréquence observée dans les spectres de pression expérimentaux. Ce résultat confirme la bonne représentation de l'écoulement gazeux dans cette simulation CEDRE.

3.3.3 Pertes de charge

Une autre grandeur d'intérêt pour les constructeurs est la perte de charge. La différence de pression entre le plénum et la chambre peut être mesurée par des capteurs de pression. Il est possible de comparer cette mesure des pertes de charges entre les données expérimentales et la simulation numérique. Ainsi, la perte de charge expérimentale est d'environ 5500 Pa contre environ 4500 Pa dans notre simulation numérique. Cette importante différence peut être expliquée par l'utilisation de lois de paroi. En effet, les lois de paroi ne prennent pas en compte les gradients de pression et les variations de courbure dans la paroi. Ainsi, les lois de paroi ne prédisent le frottement correctement que dans le cas d'une plaque plane sans gradient de pression. Par conséquent, les frottements pariétaux dans l'ensemble du tourbillonneur ne sont pas reproduits correctement dans notre simulation, ce qui explique qu'on ne retrouve pas les pertes de charges observées expérimentalement.



Figure 3.14 : Iso-contour de pression $P = 99500\text{Pa}$ matérialisant le PVC sur champ de vitesse axiale instantanée. La position du capteur de pression est visualisée par un carré rouge

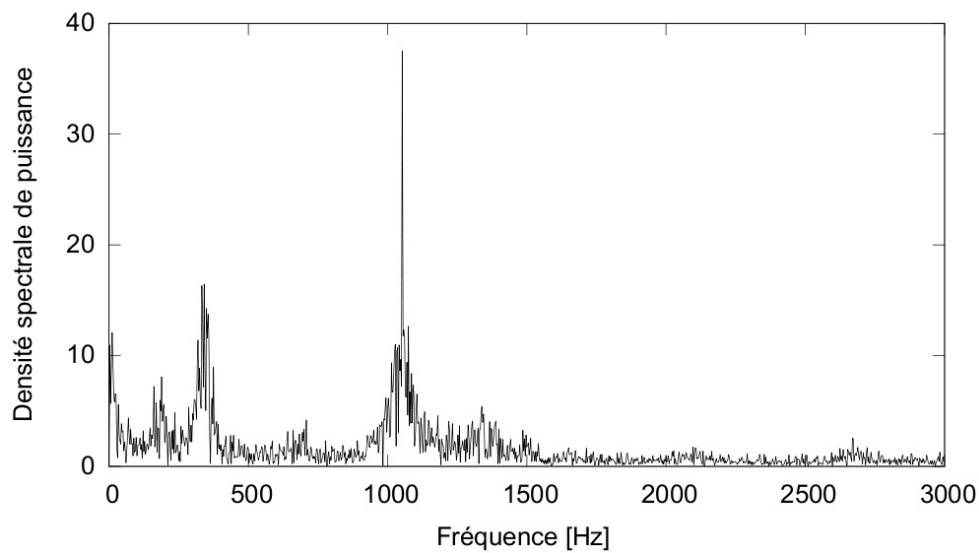


Figure 3.15 : Spectre de pression issues des simulations numériques

3.4 Conclusion

Dans cette section, le banc MERCATO et sa maquette mono-secteur ont été présentés. Un bref récapitulatif des travaux effectués précédemment sur le MERCATO a été effectué. Ensuite, une simulation numérique de l'écoulement gazeux non-réactif a été réalisée. Une première simulation RANS a permis d'initialiser une LES de l'écoulement dans le MERCATO. Ensuite, les résultats de la LES de l'écoulement gazeux non-réactif ont été comparés aux résultats expérimentaux de Linassier [81] et aux résultats issus des simulations numériques d'Eyssartier [42]. Les champs de vitesses moyennes et de fluctuations de vitesses sont très bien reproduits par la simulation numérique. De même, la fréquence principale de l'instabilité tourbillonnaire appelée PVC créée par le tourbillonneur a été retrouvée correctement par une analyse spectrale de la pression dans l'écoulement. Ces résultats indiquent que l'écoulement gazeux dans la chambre mono-secteur du banc MERCATO est bien reproduit dans cette simulation numérique CEDRE. La perte de charge entre le plénum et la chambre n'est pas prédite correctement à cause de l'utilisation de lois de parois ne reproduisant qu'approximativement les frottements pariétaux réels dans le tourbillonneur.

Dans la prochaine section, la méthode utilisée pour reproduire l'injection du spray sera détaillée et une LES de l'écoulement diphasique non-réactif sera réalisée et comparée avec les résultats expérimentaux et numériques précédents.

Chapitre 4

Simulation de l'écoulement turbulent diphasique inerte de la configuration MERCATO

Dans ce chapitre, la capacité du code CEDRE à simuler un écoulement turbulent diphasique est étudiée.

Premièrement, une méthode pour modéliser l'injection du carburant liquide de manière simplifiée a été implémentée dans le code CEDRE. Cette méthode a ensuite été validée sur un cas d'injection de carburant dans de l'air au repos en comparant la vitesse et la taille des particules aux valeurs théoriques souhaitées.

Deuxièmement, cette méthode FIMUR a été utilisée dans le cadre d'une simulation de l'écoulement turbulent diphasique dans la chambre mono-secteur du MERCATO. Cette simulation a ensuite été validée par comparaison avec des résultats expérimentaux. Plus particulièrement, les profils de vitesses moyennes de la phase dispersée ainsi que les profils de diamètres moyens ont été comparés.

Sommaire

4.1	Modélisation de l'injection	104
4.1.1	<i>Modélisation de la vitesse des gouttes : méthode FIMUR</i>	104
4.1.2	<i>Modélisation de la distribution de taille des particules</i>	108
4.2	Mise en place de la simulation de l'écoulement diphasique non-réactif	113
4.3	Comparaison des résultats numériques aux résultats expérimentaux	115
4.3.1	<i>Champ instantané de l'écoulement diphasique</i>	115
4.3.2	<i>Profil de vitesse</i>	115
4.3.3	<i>Profil de diamètre</i>	119
4.3.4	<i>Répartition du flux volumique</i>	121
4.3.5	<i>Influence de la phase dispersée sur l'écoulement gazeux</i>	122
4.4	Conclusion	123

4.1 Modélisation de l'injection

Pour pouvoir simuler précisément la phase dispersée, il est nécessaire de simuler précisément l'injection du liquide dans la chambre. À cause des fortes contraintes imposées par le ratio de flux de quantité de mouvement du liquide sur les forces de cisaillement, la nappe liquide va se séparer en plusieurs amas liquides. Ce phénomène est appelé atomisation primaire. Ensuite, ces amas vont se désintégrer en amas de plus petites tailles qui vont acquérir une forme sphérique sous l'effet de la tension de surface. Le nombre de Weber We permet de comparer les forces aérodynamiques subies par la goutte qui tendent à la désintégrer et la tension de surface qui tend à la rendre sphérique.

$$We = \frac{\rho_p(\mathbf{v}_p - \mathbf{u})d_p}{\sigma_p} \quad (4.1)$$

où σ_p est la tension de surface de la goutte. Les amas et les gouttes possédant un nombre de Weber $We \geq 12$ vont être atomisés alors que les plus petites gouttes acquerront plus vite une forme sphérique. Ce phénomène est nommé atomisation secondaire.

L'atomisation est un phénomène multi-échelle dont la prise en compte dans des simulations numériques est complexe. Il faut en effet réaliser un suivi d'interface où il se produit un saut très important de propriétés physiques. Par exemple la masse volumique de l'eau est mille fois plus importante que celle de l'air. Des travaux sont actuellement en cours, notamment ceux de Zuzio et al. [142, 141] à l'ONERA mais ils ne sont pas encore assez aboutis pour pouvoir simuler directement l'atomisation dans une LES réactive de chambre de combustion.

Une approche d'injection simplifiée a donc été choisie dans cette thèse. Cette approche appelée FIMUR a été développée au CERFACS par Sanjosé, Senoner et al [119]. Une approche similaire appelée LISA a été mise au point par Guédot [58]. Dans ces approches, des particules sont injectées directement au nez de l'injecteur de manière à retrouver une distribution de taille observée expérimentalement à 10 mm de l'injecteur. On néglige donc l'influence de l'atomisation sur la dynamique du spray, ce qui est une hypothèse forte.

4.1.1 Modélisation de la vitesse des gouttes : méthode FIMUR

Dans l'approche FIMUR, on considère un injecteur pressurisé swirlé de type simplex. Dans ce type d'injecteur, le liquide est injecté à haute pression par une ouverture tangentielle avant d'être éjecté dans la chambre par un orifice de sortie. L'injecteur du banc MERCATO génère un spray en forme de cône creux à cause de la présence d'un coeur d'air dans l'injecteur.

Une illustration d'un injecteur du même type que l'injecteur du MERCATO est visible figure 4.1. L'angle d'ouverture minimum du spray θ_{min} est obtenu à partir de l'angle maximum du spray θ_S et du rayon d'ouverture de l'injecteur R_0 . Le rayon du coeur d'air au centre de l'injecteur R_a peut être obtenu via le paramètre X défini comme le rapport de l'air du coeur d'air sur l'aire total.

$$X = \frac{A_a}{A_0} = \left(\frac{R_a}{R_0}\right)^2 \quad (4.2)$$

L'expression reliant X à θ_S provient d'une corrélation de Rizk et Lefebvre [115] :

$$\cos^2(\theta_S) = \frac{1 - X}{1 + X} \quad (4.3)$$

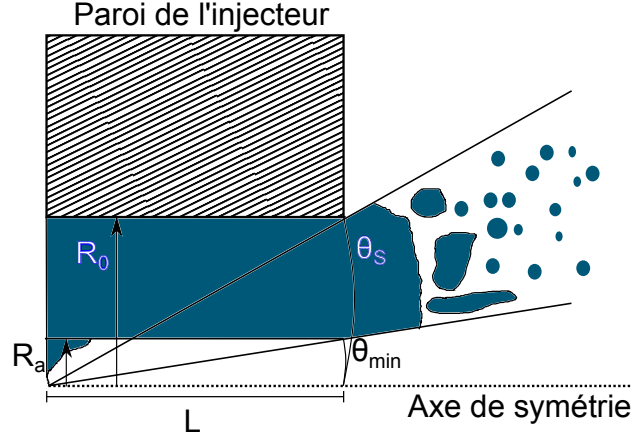


Figure 4.1 : Schéma de principe d'un injecteur swirlé générant un spray conique creux

Les angles d'ouverture moyen et maximum du spray peuvent être obtenus par de simples relations trigonométriques en se référant à la figure 4.1 pour les notations :

$$\tan(\theta_{min}) = \frac{R_a}{L} \quad (4.4)$$

$$\tan(\theta_S) = \frac{R_0}{L} \quad (4.5)$$

d'où

$$\tan(\theta_{min}) = \frac{R_a}{R_0} \tan(\theta_S) = \sqrt{X} \tan(\theta_S) \quad (4.6)$$

La vitesse axiale des particules est obtenue via conservation du débit massique :

$$V_x = \frac{\dot{m}_l}{\rho_l \pi R_0^2 (1 - X)} \quad (4.7)$$

Les deux autres composantes de vitesse sont obtenues par projection :

$$V_y = V_x \tan(\theta) \cos(\phi) \quad (4.8)$$

$$V_z = V_x \tan(\theta) \sin(\phi) \quad (4.9)$$

Une illustration situant les notations des angles est visible figure 4.2.

Dans l'implémentation de la méthode d'injection simplifiée dans le code CEDRE, il est possible d'utiliser d'autres corrélations pour définir les angles d'injection du spray. Il est ainsi possible de générer des cônes pleins ou creux avec une courbe directrice circulaire ou elliptique.

Ce modèle d'injection des particules a été testé sur un cas simplifié. Des particules de diamètre $55 \mu\text{m}$ ont été injectés dans un cube rempli d'air au repos. Une image de cette configuration est visible figure 4.3. Un modèle simplifié sans évaporation ni chauffage ni réaction des particules sur l'écoulement a été utilisé. De même, un modèle de traînée de Stokes a été employé. Ces simplifications permettent de calculer une solution théorique simple pour la vitesse des particules. En effet, la particule p n'est alors soumise qu'à la force de traînée suivante :

$$F_p^{drag} = 3\pi\rho d_p \nu (\check{\mathbf{u}} - \mathbf{v}_p) \quad (4.10)$$

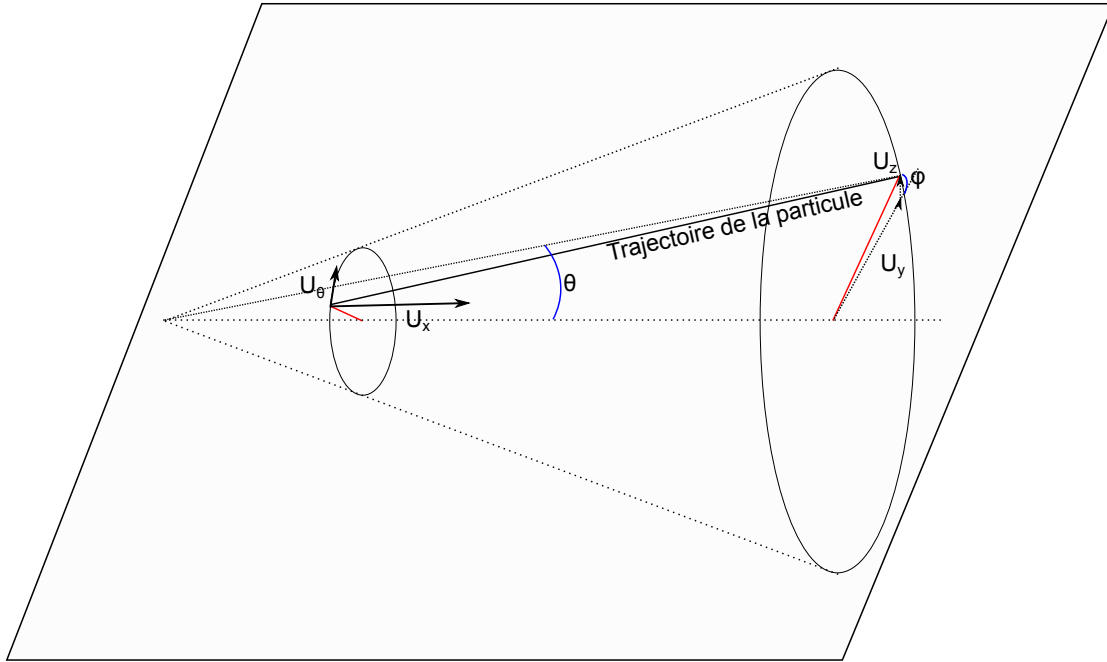


Figure 4.2 : Schéma de la projection de la vitesse des particules dans la méthode FIMUR

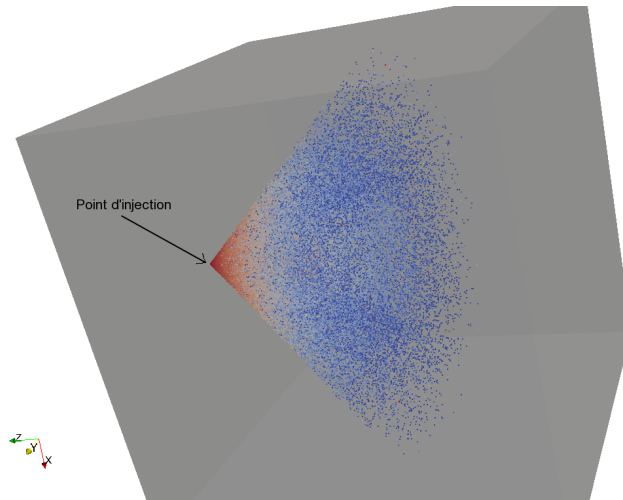


Figure 4.3 : Illustration de l'injection des particules dans un cube d'air au repos. Les particules sont colorés par leur instant d'injection

Comme l'écoulement est au repos, $\tilde{\mathbf{u}} = 0$, l'équation d'évolution de la vitesse de la particule peut être écrite :

$$\frac{dm_p \mathbf{v}_p}{dt} + 3\pi \rho_d \nu \mathbf{v}_p = 0 \quad (4.11)$$

qui peut être mis sous la forme :

$$\tau_p \frac{d\mathbf{v}_p}{dt} + \mathbf{v}_p = 0 \quad (4.12)$$

avec

$$\tau_p = \frac{d_p^2 \rho_p}{18 \rho \nu} \quad (4.13)$$

Cette équation peut être résolue analytiquement pour obtenir l'évolution de la vitesse des particules. L'angle d'injection ainsi que la vitesse des particules ont été vérifiées en les comparant aux vitesses théoriques attendus sur un plan de mesure situé à 10 mm du point d'injection. Cette comparaison est visible sur la figure 4.4 pour la vitesse radiale et sur la figure 4.5 pour la vitesse axiale. Les différentes

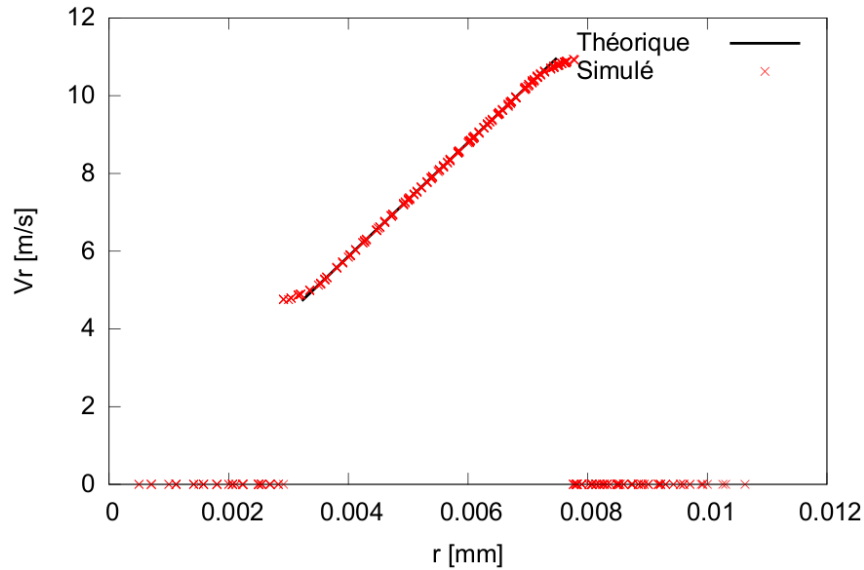


Figure 4.4 : Vitesse radiale des particules en fonction de leur distance à l'axe

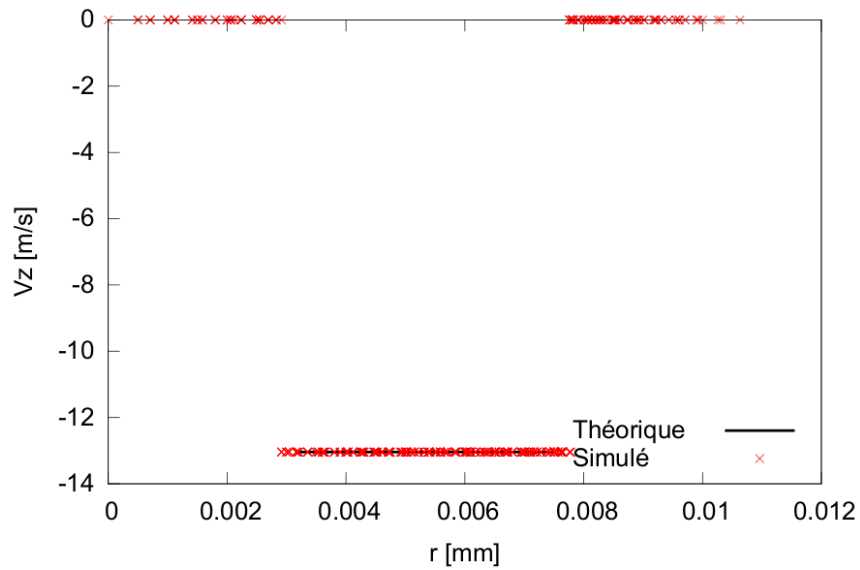


Figure 4.5 : Vitesse axiale des particules en fonction de leur distance à l'axe

composantes de vitesse sont bien reproduites dans la simulation. La valeur de la vitesse axiale est bien constante, conformément à l'équation 4.7. La vitesse radiale évolue bien linéairement avec la distance à l'axe comme attendue selon les équations 4.8 et 4.9 car la distance à l'axe est proportionnelle à $\tan(\theta)$.

4.1.2 Modélisation de la distribution de taille des particules

En plus d'injecter les particules avec la bonne vitesse, ce modèle d'injection doit être capable de représenter correctement la polydispersion du spray. En effet, cette polydispersion est importante à prendre en compte pour reproduire correctement les phénomènes d'évaporation et de combustion dans la chambre MERCATO.

Il est parfois nécessaire d'échantillonner le spray. En effet, il est souvent impossible d'injecter une particule numérique pour chaque particule physique. Procéder ainsi serait trop cher en termes de coût de calcul et l'information ajoutée ne serait pas obligatoirement pertinente. En effet, on étudie principalement les moments de la phase dispersée. Ceux-ci peuvent être bien représentés même en échantillonnant le spray.

Lorsqu'un spray est échantillonné, un poids numérique est alloué à chaque particule numérique afin de respecter la conservation de la masse et de la quantité de mouvement du spray. À première vue, deux choix évidents peuvent être distingués. Chaque particule numérique peut représenter la même masse de liquide, c'est une approche iso-masse. Ou alors, chaque particule numérique peut représenter le même nombre de gouttes, c'est ce qu'on appelle l'approche iso-nombre.

Paulhiac a étudié comment échantillonner un spray pour assurer une convergence uniforme de la distribution des moments de la distribution de taille de simulation lagrangienne dans sa thèse [103]. Un résumé de ses travaux à ce sujet va maintenant être effectué. La distribution en nombre $D_N(d)$ est la fonction de probabilité exprimant la probabilité de trouver une goutte de diamètre d dans l'ensemble des gouttes. La distribution en volume $D_V(d)$ est la fonction de probabilité exprimant la probabilité de trouver un volume de gouttes de diamètre d parmi l'ensemble des gouttes. Cette distribution est reliée à la distribution en nombre par la relation suivante :

$$D_V(d) = \frac{d^3 D_N(d)}{\int_0^\infty D_N(d') dd'} \quad (4.14)$$

Une particule numérique k dispose d'un diamètre d_k et d'un poids numérique w_k . Le poids numérique représente le nombre de particules physiques représenté par la particule numérique. La population de particules numériques injectées doit suivre la distribution de taille réelle D_N^{reelle} des gouttes que la simulation veut reproduire. De plus, la masse injectée à chaque pas de temps doit correspondre à la valeur de débit massique souhaitée. De manière à respecter ces deux contraintes, une fonction $M_p(d)$ décrivant la masse transportée par une particule de diamètre d est utilisée. Pour assurer la bonne quantité de masse pour chaque diamètre, la relation suivante doit être vérifiée :

$$M_p(d) D_N^{num}(d) = \frac{\pi}{6} \rho_p d^3 D_N^{reelle}(d) \quad (4.15)$$

Cette relation permet d'obtenir la distribution de taille pondérée par la masse numérique que les particules numériques doivent suivre :

$$D_N^{num}(d) = \frac{\pi \rho_p d^3 D_N^{reelle}(d)}{6 M_p(d)} \quad (4.16)$$

Si les gouttes numériques sont tirées selon la distribution D_N^{num} , alors elles suivront la distribution de gouttes réelles D_N^{reelle} pondérée par la masse numérique M_p .

A chaque pas de temps Δt , il faut injecter une masse $\dot{m}_l \Delta t$ de liquide. Pour ce faire, une particule de diamètre d_k représentant une masse $M_p(d_k)$ est injectée. Puis, si la masse injectée est inférieure à la masse voulue, une autre particule de diamètre d_l est injectée avec la masse $M_p(d_l)$. Le procédé est répété jusqu'à ce que la somme de la masse des particules injectées soit égale à la masse imposée par le débit massique souhaité.

Le poids numérique w_k d'une particule de diamètre d_k est obtenu à partir de la fonction de masse par la relation suivante :

$$w_k = \frac{6M_p(d_k)}{\pi\rho_p d_k^3} \quad (4.17)$$

Avec cette approche, plusieurs fonctions de masse peuvent être utilisées afin de mieux représenter la distribution de particules. Il est possible d'utiliser des représentations iso-nombre en utilisant une fonction de la forme :

$$M_p(d) = N \frac{\pi}{6} \rho_p d^3 \quad (4.18)$$

Ainsi, chaque particule numérique représentera N particules physiques. Cette approche permet d'obtenir une meilleure convergence statistique sur les petites gouttes dont le diamètre est inférieur au diamètre moyen de Sauter de la distribution.

Une approche iso-masse peut également être utilisée avec une fonction de la forme :

$$M_p(d) = M \quad (4.19)$$

Ainsi, chaque particule numérique représente une masse M de liquide. Cette représentation permet une meilleure convergence statistique sur les grandes gouttes dont le diamètre est supérieur au diamètre moyen de Sauter de la distribution.

Paulhiac [103] a utilisé une fonction de masse définie par morceaux afin d'améliorer la convergence statistique sur l'ensemble des particules. Si le diamètre d est supérieur au diamètre moyen de Sauter, alors la fonction $M_p(d)$ suit une méthode iso-masse

$$M_p(d) = M \quad (4.20)$$

Si le diamètre d est inférieur au diamètre moyen de Sauter, alors $M_p(d)$ est proportionnelle au carré du diamètre de la goutte :

$$M_p(d) = K d^2 \quad (4.21)$$

Des illustrations de la convergence statistique de ces méthodes sont visibles sur les figures 4.6, 4.7 et 4.8. Des particules numériques sont injectées avec différentes fonctions de masse selon une distribution de Rosin-Rammler avec un diamètre $d_{32} = 40\mu m$ et un paramètre $q = 2.5$:

$$f(d) = q d_{32}^{-q} d^{q-1} \exp \left[- \left(\frac{d}{d_{32}} \right)^q \right] \quad (4.22)$$

La figure 4.6 présente les résultats de la méthode iso-nombre. La figure 4.7 montre les statistiques obtenues avec la méthode iso-masse. Enfin, la figure 4.8 présente les résultats de l'échantillonnage du

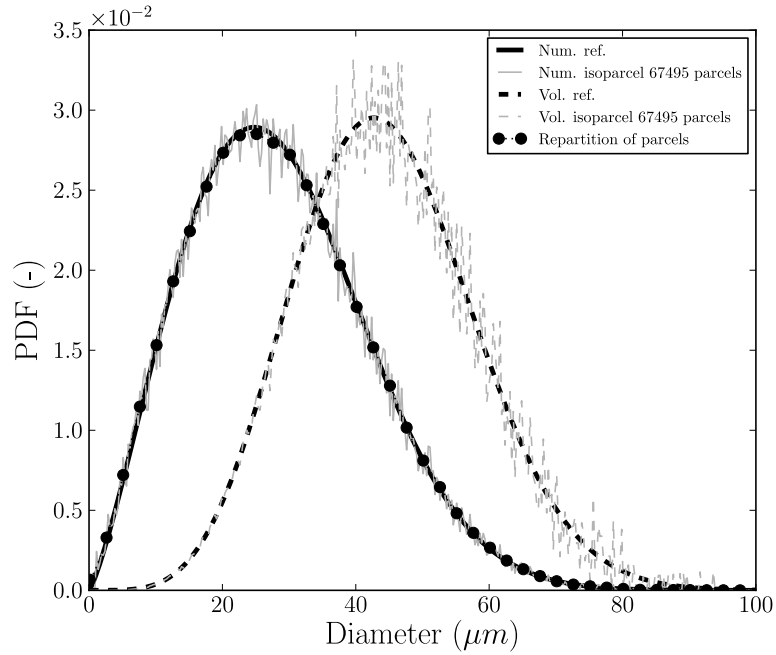


Figure 4.6 : Méthode iso-nombre : distributions en nombre et en masse obtenues dans une simulation numérique AVBP comparées aux distributions théoriques souhaitées [103]

spray selon la fonction de masse définie par morceaux par Paulhiac [103]. Il est possible de remarquer que la méthode iso-nombre converge bien sur les petites particules mais mal sur les grandes. Inversement, la méthode iso-masse converge bien sur les grandes gouttes mais mal sur les petites. La méthode intermédiaire de Paulhiac converge aussi bien que la méthode iso-masse sur les grandes gouttes et presque aussi bien que la méthode iso-nombre sur les petites gouttes.

Dans le solveur SPARTE de la chaîne CEDRE, les gouttes sont tirées selon une méthode iso-masse. Bien que très intéressante, la méthode de Paulhiac n'a pas été implémentée faute de temps.

La distribution de taille $D_N(d)$ utilisée provient des données expérimentales obtenues par PDA par Linassier [81]. Plusieurs choix sont possibles pour l'interpolation de la distribution expérimentale par une loi log-normale de la forme :

$$f(d) = \frac{1}{d\sqrt{2\pi\sigma}} \exp\left(-\frac{\ln\left(\frac{d}{d_{ln}}\right)^2}{2\sigma}\right) \quad (4.23)$$

Les moments d'une loi log-normale peuvent être évalués en utilisant la relation suivante :

$$\int_0^\infty d^n f(d) dd = d_{ln}^n \exp\left(\frac{\sigma n^2}{2}\right) \quad (4.24)$$

Ainsi, le moment d_{mn} peut être obtenu avec la relation suivante :

$$d_{mn} = \left(\frac{\int_0^\infty d^m f(d) dd}{\int_0^\infty d^n f(d) dd}\right)^{\frac{1}{m-n}} = d_{ln} \exp\left(\frac{\sigma(m+n)}{2}\right) \quad (4.25)$$

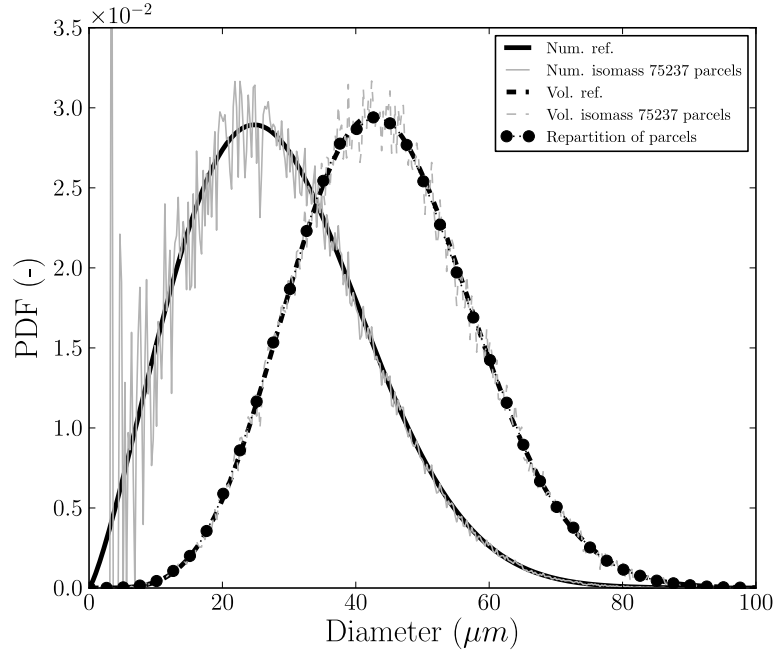


Figure 4.7 : Méthode iso-masse : distributions en nombre et en masse obtenues dans une simulation numérique AVBP comparées aux distributions théoriques souhaitées [103]

Comme la loi log-normale possède deux paramètres, elle est capable de reproduire exactement deux moments différents de la distribution de taille expérimentale. Un récapitulatif des erreurs effectuées suivant les moments statistiques choisis est visible sur la figure 4.9 et dans le tableau 4.1.

Erreur relative sur	nombre $d_{10}d_{32}$	nombre $d_{10}d_{30}$	nombre $d_{30}d_{32}$	masse $d_{43}d_{65}$
d_{10}	0	0	0.050	0.588
d_{20}	-0.036	-0.024	0	0.390
d_{30}	-0.024	0	0	0.278
d_{32}	0	0.050	0	0.080
d_{43}	0.124	0.208	0.100	0
d_{65}	0.653	0.866	0.537	0

Tableau 4.1 : Erreur théorique effectuée par l'interpolation par une loi log-normale sur les différents moments de la distribution expérimentale

Il est possible de remarquer que toutes les interpolations effectuées pour retrouver des moments caractérisant la distribution en nombre (d_{10} , d_{30}) font des erreurs importantes supérieures à 10% sur les moments d'ordre plus élevé comme le d_{43} et le d_{65} . L'interpolation effectuée pour retrouver ces moments d'ordre élevé commet des erreurs supérieures à 27% sur les différents moments caractérisant la distribution de taille en nombre tel le d_{10} , le d_{20} et le d_{30} . L'interpolation choisie correspond à l'interpolation appelée nombre $d_{30}d_{32}$. Par construction, elle reproduit exactement le d_{30} et le diamètre moyen de Sauter d_{32} . Ce choix permet de bien reproduire deux grandeurs caractéristiques importantes

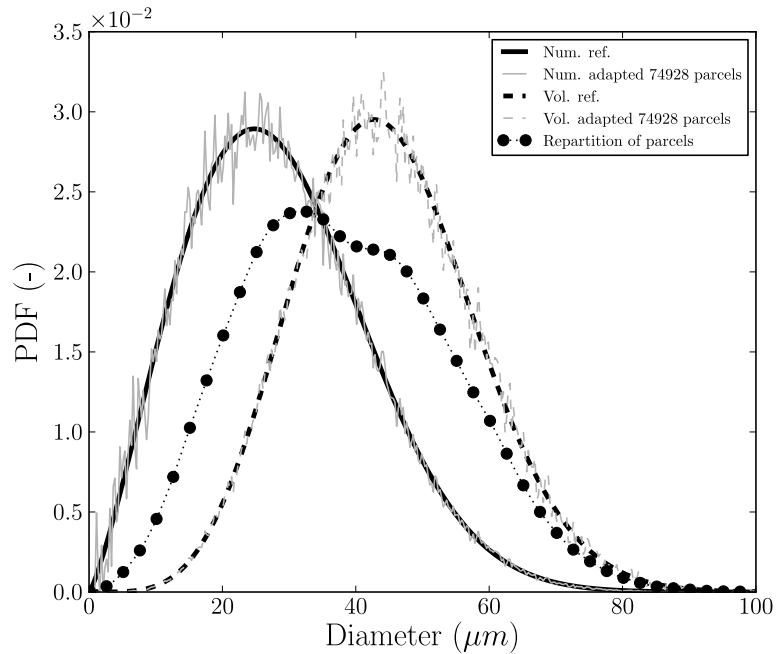


Figure 4.8 : Méthode avec fonction de masse définie par morceaux : distribution en nombre et en masse obtenues dans une simulation numérique AVBP comparées aux distributions théoriques souhaitées [103]

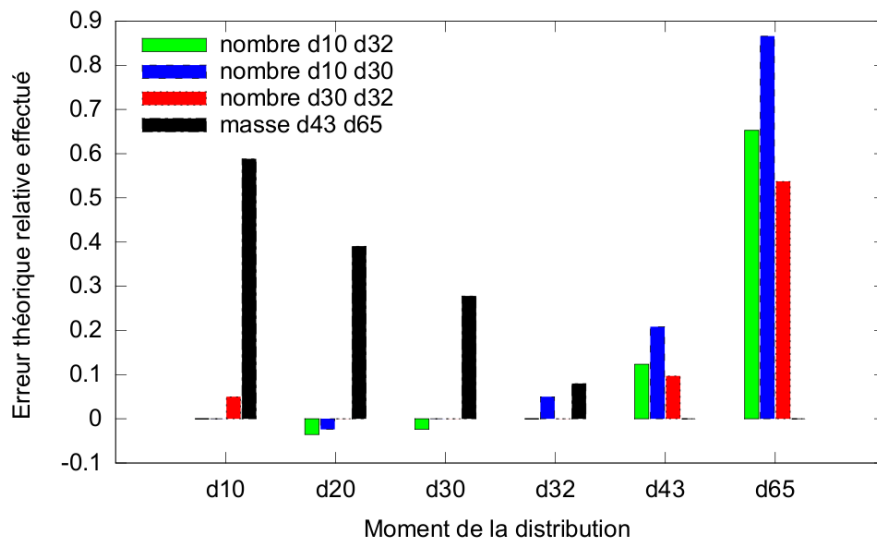


Figure 4.9 : Erreur théorique effectuée par l'interpolation par une loi log-normale sur les différents moments de la distribution expérimentale

dans le phénomène d'évaporation : le ratio moyen du volume sur la surface des gouttes et la masse des gouttes. De plus, elle reproduit exactement le d_{20} et fait des erreurs inférieures à 10% sur le d_{10} et le

d_{43} . Les paramètres utilisés pour la loi log-normale (cf. eq. 4.23) sont $d_{ln} = 11.525\mu m$ et $\sigma = 0.5641$.

Une vérification de la distribution obtenue après l'injection numérique a été effectuée sur le cas test du cube mentionné dans la section 4.1.1. Une comparaison des distributions de tailles numériques et expérimentales peut être observée sur la figure 4.10. Il est possible de remarquer que la distribu-

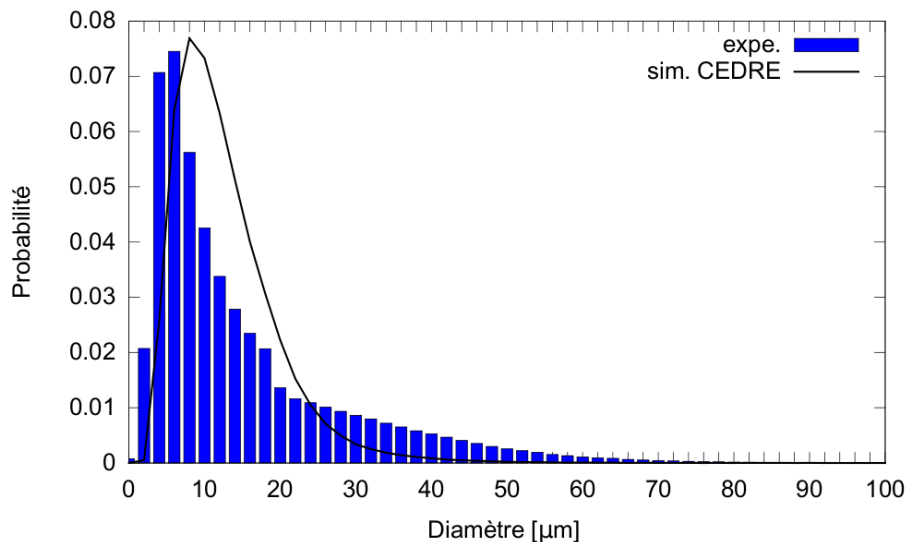


Figure 4.10 : Distributions de taille des particules observées expérimentalement et dans une simulation CEDRE

tion de taille numérique est plus resserrée que la distribution expérimentale. En effet, la distribution expérimentale possède une queue avec un nombre important de gouttes de diamètre compris entre $30\mu m$ et $50\mu m$ qui ne pouvait pas être reproduite exactement avec une distribution simple de type log-normale.

4.2 Mise en place de la simulation de l'écoulement diphasique non-réactif

Avec la méthode FIMUR disponible pour modéliser l'injection liquide dans la chambre MERCATO, des simulations numériques de l'écoulement diphasique non-réactif peuvent être effectuées. Le même maillage que pour la simulation de l'écoulement gazeux est utilisé. Il est visible sur la figure 3.3. Le domaine de calcul est découpé en différents domaines utilisateurs. Un domaine utilisateur correspond à une partie du domaine de calcul. Ils ajoutent une granularité supplémentaire au maillage via des raccords coïncidants. Chaque domaine utilisateur est partitionné de façon indépendante et différents modèles physiques peuvent être imposés sur chaque domaine utilisateur. Cette dernière propriété peut s'avérer très intéressante pour réaliser des simulations couplant RANS et LES. De plus, les différents solveurs de CEDRE peuvent être activés ou non sur chaque domaine utilisateur. Cette propriété est mise à profit pour la simulation de l'écoulement diphasique afin de réduire le coût de calcul. En effet, les particules ne sont prises en compte que dans le domaine nommé diffuseur chambre représentant l'entrée de la chambre de combustion où la flamme s'établit en régime de combustion stabilisée. Ce domaine utilisateur est, comme tous les autres, partitionné sur l'ensemble des processeurs. Ainsi, la

charge de particule va être répartie sur l'ensemble des processeurs. Cette procédure a récemment été couplée avec un partitionnement double contrainte afin d'équilibrer la charge liée au maillage et aux gouttes au moment de la reprise. Cette fonctionnalité est en cours de test.

Pour l'écoulement gazeux, les mêmes paramètres numériques que pour le calcul purement gazeux sont utilisés. Pour simuler la phase dispersée, le solveur lagrangien SPARTE de la chaîne de calcul CEDRE est utilisé. La traînée subie par les particules est représentée par la corrélation de Schiller et Naumann 1.128 [121]. L'évaporation et le chauffage des particules sont prises en compte par les corrélations d'Abramzon et Sirignano 1.141 et 1.153 [1]. Compte tenu de la faible température de l'écoulement gazeux non-réactif, l'évaporation est quasiment nulle.

La rétroaction des particules sur la phase gazeuse est prise en compte via l'approximation du point source comme vu dans la section 1.4. Une relaxation des termes sources diphasiques envoyés à la phase gazeuse est effectuée sur un cube de 1 mm de côté autour de l'injecteur. En effet, avec la méthode FIMUR beaucoup de petites gouttes sont présentes dans ce volume autour de la position de l'injecteur. Ces petites gouttes s'évaporent plus facilement et sont responsables de changements rapides dans les termes sources d'énergie renvoyés au gaz. Ces termes sources peuvent créer des modifications locales non physiques de la température pouvant perturber le calcul. Relaxer les termes sources de la phase dispersée permet de lisser ces changements dans les termes d'évaporation liés à l'injection de petites gouttes de manière à avoir des changements plus lents de température qui ne risquent pas de mener à des oscillations de température non physiques. Ce terme de relaxation n'est nécessaire qu'au moment de l'initialisation du calcul pour améliorer la robustesse de la simulation numérique. Une fois que l'écoulement diphasique est initialisé, il peut être augmenté progressivement jusqu'à l'absence de relaxation.

Les parois sont représentées avec le modèle de paroi complexe. Les paramètres numériques de la simulation sont récapitulés dans le tableau 4.2. Les résultats ont été obtenus en moyennant sur environ 330 ms.

Traînée	Schiller Naumann eq. 1.128 [121]
Évaporation	Abramzon Sirignano eq. 1.141 [1]
Chauffage	Abramzon Sirignano eq. 1.153 [1]
Couplage entre gaz et phase dispersée	Couplage avec rétroaction de la phase dispersée sur le gaz
Paroi	Modèle de paroi complexe (voir fig. 1.10)
Distribution de taille	Log-normale $d_{ln} = 11.525\mu m$ $\sigma = 0.5641$ eq. 4.23
Angle de spray	$\theta_S = 40^\circ$
Débit massique de liquide	$\dot{m}_l = 2.25g/s$
Température du liquide	$T_l = 293K$

Tableau 4.2 : Paramètres utilisés pour la simulation de la phase dispersée

4.3 Comparaison des résultats numériques aux résultats expérimentaux

4.3.1 Champ instantané de l'écoulement diphasique

Une tranche de 6 mm représentant la position des particules numériques colorées par leur diamètre dans une coupe longitudinale autour de l'axe central de la chambre est visible sur la figure 4.11. Il est

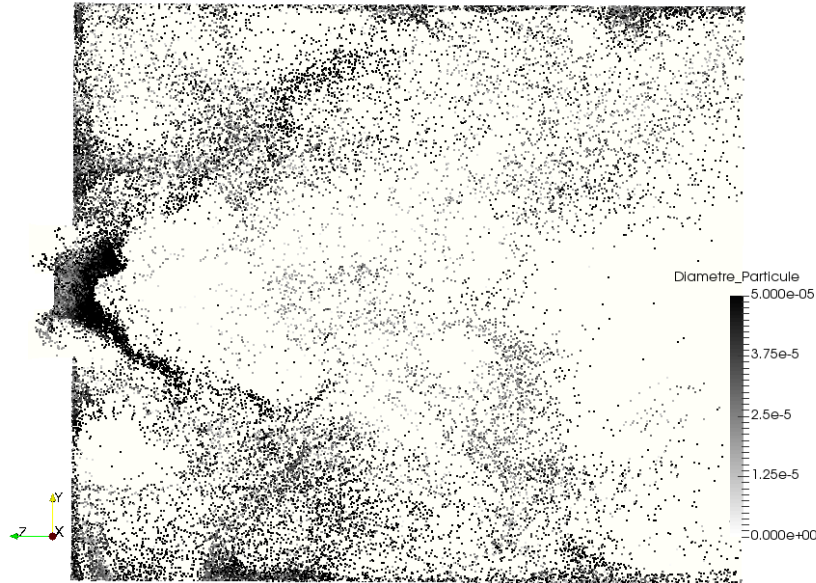


Figure 4.11 : Coupe longitudinale avec la position des particules numériques colorées en fonction de leur diamètre

possible de voir que les gouttes se concentrent principalement dans le jet de l'écoulement du gaz. Il n'y a presque aucune goutte dans la zone de recirculation centrale. Sur la figure 4.12 représentant une coupe transverse, il est possible de voir que les gouttes suivent les structures de l'écoulement observées au chapitre précédent sur la figure 3.5. Les gouttes suivent le jet principal et sont moins présentes dans les zones de recirculation latérales.

Un champ de fraction volumique de liquide est visible sur la figure 4.13. Il est possible de remarquer que le jet principal est beaucoup plus riche en liquide que les zones de recirculation, ce qui est en accord avec la position des particules visibles sur la figure 4.11.

4.3.2 Profil de vitesse

Un seul profil de données expérimentales est disponible pour l'écoulement diphasique non-réactif du point de référence. Ce profil est situé sur le plan $z = 6\text{mm}$ situé à 10 mm du plan d'injection. Différents résultats peuvent être comparés entre la simulation numérique réalisée dans cette thèse avec CEDRE, les données expérimentales de Linassier [81] et la simulation numérique réalisée par Eyssartier [42] avec AVBP.

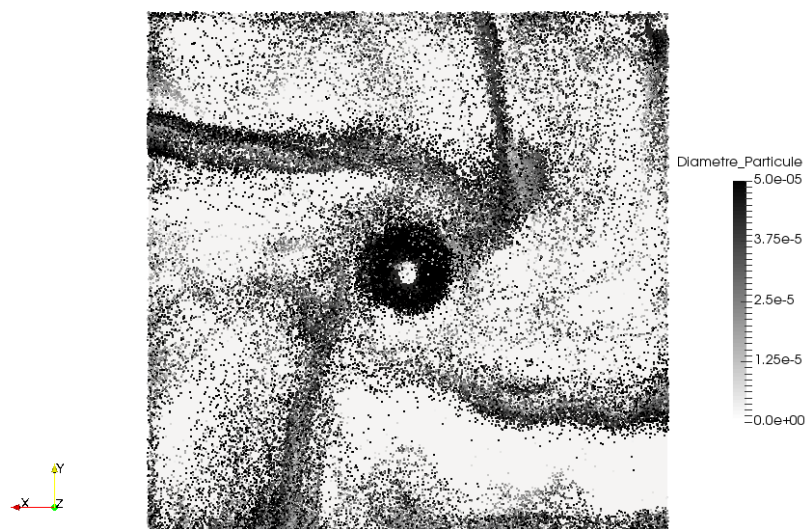


Figure 4.12 : Coupe transversale avec la position des particules numériques colorées en fonction de leur diamètre

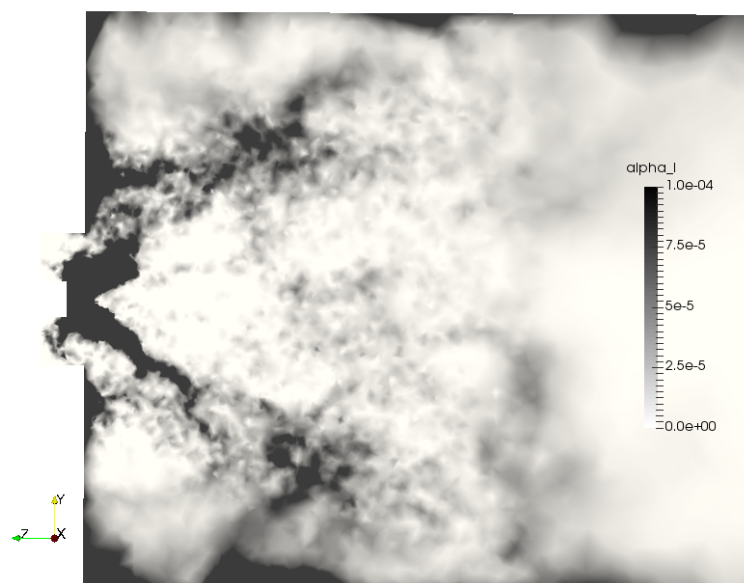


Figure 4.13 : Champ instantané de fraction volumique liquide

Le profil de vitesse axiale des gouttes peut être observé sur la figure 4.14. Des résultats moyennés en masse et en nombre sont présentés. La simulation numérique réalisée par Eyssartier étant monodisperse [42], les résultats moyennés en nombre ou en masse sont identiques. Il est possible de remarquer que les résultats moyennés en masse reproduisent bien les pics de vitesse. Par contre, les résultats

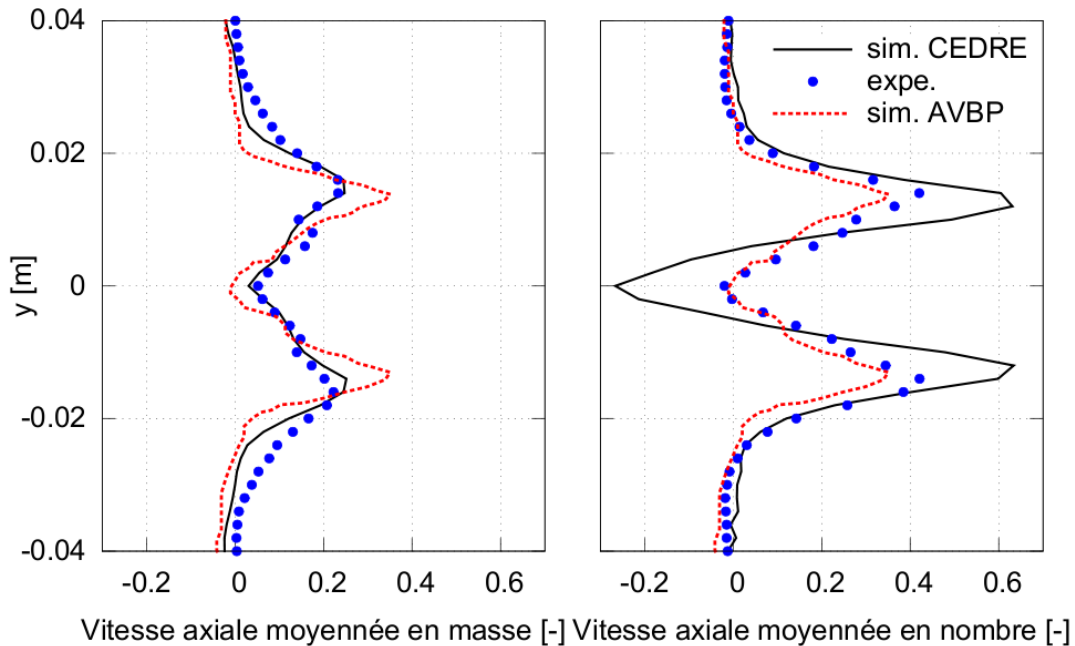


Figure 4.14 : Profils de vitesse axiale de la phase dispersée au plan $z = 6\text{mm}$ en fonction de la distance à l'axe

moyennés en nombre surestiment les pics de vitesse dans les jets et dans la zone de recirculation. Ces résultats indiquent que les petites gouttes sont assez mal modélisées dans cette simulation. En effet, la méthode FIMUR injecte des petites gouttes à un point d'injection où seul des amas liquides bien plus inertiels sont présents. Ces amas liquides vont progressivement se fragmenter pour former ces petites gouttes. Ainsi, les petites gouttes injectées numériquement vont être entraînées beaucoup plus rapidement par l'écoulement gazeux que les amas liquides présents dans la réalité. Par ailleurs, la méthode iso-masse utilisée pour l'injection dans cette simulation entraîne une convergence plus lente des résultats moyennés en nombre.

Le profil de vitesse radiale peut être observé sur la figure 4.15. Les résultats moyennés en masse et en nombre sont cette fois très proches. Ceci indique que la vitesse radiale des gouttes dépend très faiblement de leur taille. Il est possible de voir que les données expérimentales sont bien reproduites à environ 20 mm de l'axe de la chambre. Par contre, l'accord est assez mauvais près de l'axe de la chambre : la pente des simulations numériques ne correspond pas à la pente expérimentale. De plus, le pic expérimental de vitesse radiale est très large comparé au pic obtenu dans les simulations numériques. Il est possible de voir que les données numériques ne correspondent pas du tout aux données expérimentales près des parois. Cette différence provient du fait que les données expérimentales ont été obtenues dans une configuration non-confinée où les parois de la chambre de combustion n'étaient pas présentes. En effet, la présence d'un film liquide sur les hublots de la maquette rendaient impossibles la mesure de vitesse par des moyens optiques. Le problème de convergence des résultats moyennés en nombre est bien visible via le manque de symétrie des résultats.

Le profil de vitesse tangentielle peut être observé sur la figure 4.16. Les pics de vitesse tangentielle sont surestimés dans la simulation numérique si l'on considère les résultats moyennés en nombre. Par

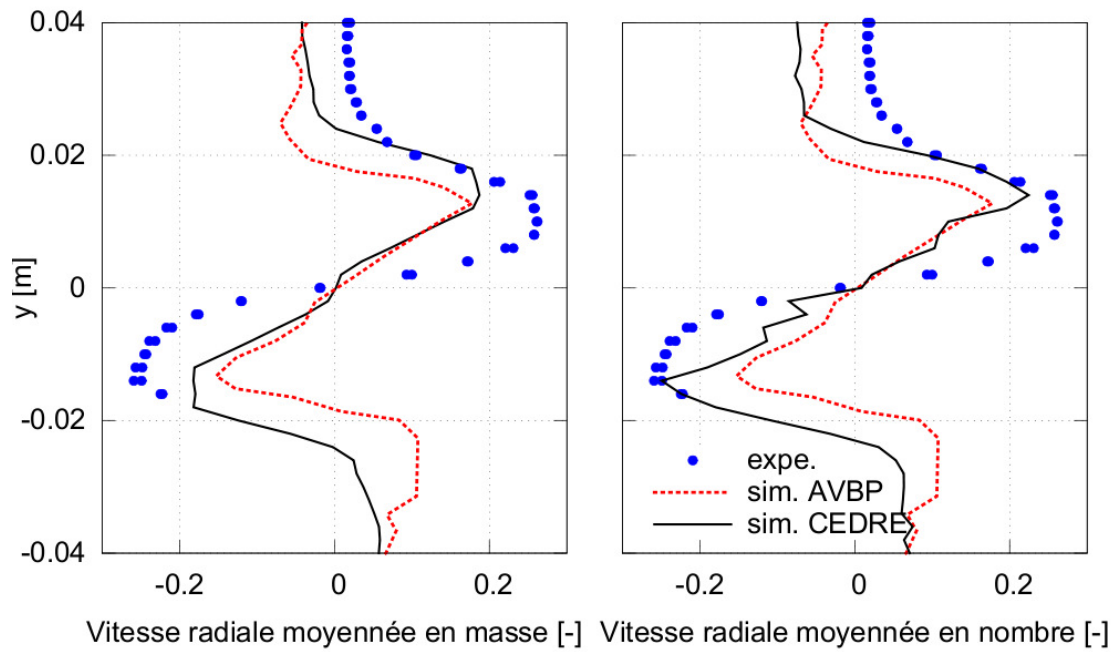


Figure 4.15 : Profils de vitesse radiale de la phase dispersée au plan $z = 6\text{mm}$ en fonction de la distance à l'axe

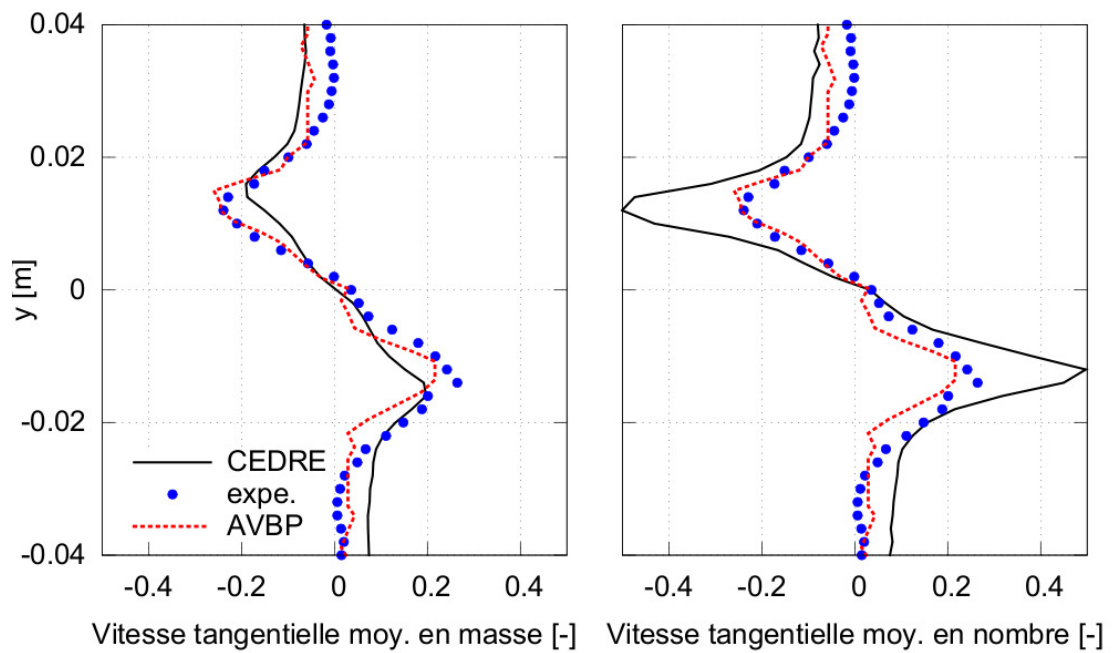


Figure 4.16 : Profils de vitesse tangentielle de la phase dispersée au plan $z = 6\text{mm}$ en fonction de la distance à l'axe

contre, les résultats moyennés en masse sont en relativement bon accord avec les données expérimentales. Ces résultats sont en accord avec l'hypothèse d'un entraînement trop rapide des petites gouttes comparées aux expériences et d'un sous-échantillonnage des petites particules.

4.3.3 Profil de diamètre

La taille des gouttes dans la chambre de combustion est un paramètre important dans le phénomène de combustion diphasique. En effet, il influence de manière importante l'évaporation et donc la répartition du carburant dans la chambre. Le profil de diamètre moyen d_{10} peut être observé sur la figure 4.17. Les

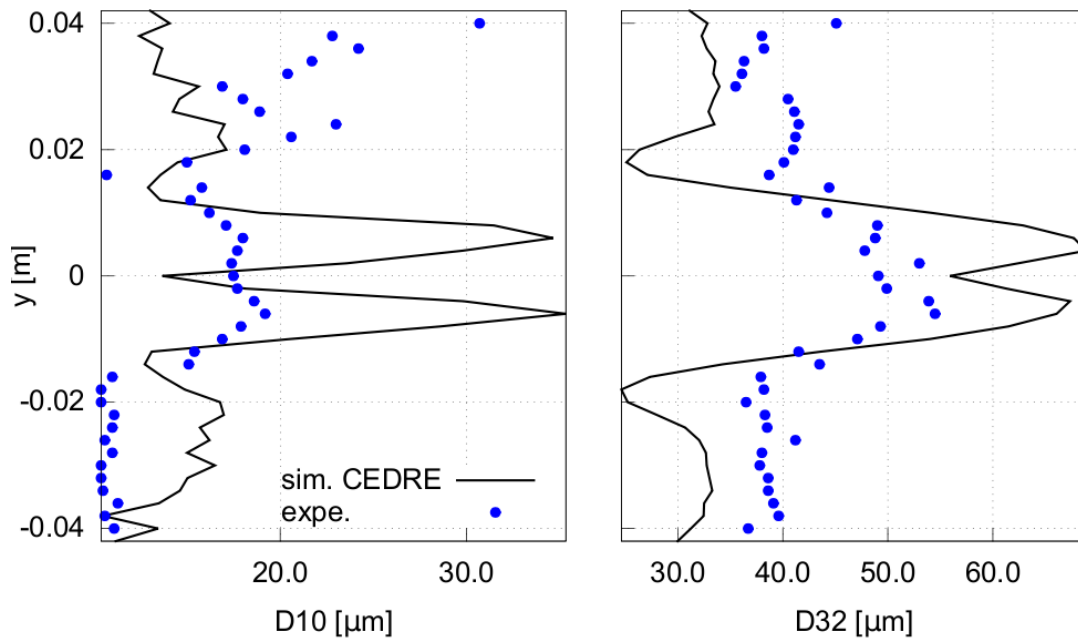


Figure 4.17 : Profils de diamètre moyen et de diamètre moyen de Sauter de la phase dispersée au plan $z = 6\text{mm}$ en fonction de la distance à l'axe

résultats numériques ne reproduisent pas les résultats expérimentaux. Plusieurs remarques doivent être effectuées. Le profil expérimental n'est pas symétrique, ce qui est surprenant. De plus, les expériences n'ont pas été réalisées sur la maquette complète. De nouvelles expériences sont actuellement en cours de réalisation à l'ONERA pour acquérir d'autres plans de mesure sur la maquette complète. La méthode FIMUR est une approche simplifiée du phénomène réel. Les petites gouttes vont être amenées plus rapidement à la vitesse du gaz que les grandes gouttes, ce qui peut modifier la répartition spatiale des diamètres moyens des gouttes. Par ailleurs, les petites gouttes sont sous-échantillonnées à cause de la méthode iso-masse utilisée dans cette thèse.

Le profil de diamètre moyen de Sauter d_{32} peut également être observé sur la figure 4.17. Les résultats numériques sont assez proches des résultats expérimentaux. Les différences de diamètre entre la zone centrale et les zones latérales sont un peu plus marquées dans cette simulation numérique que dans les résultats expérimentaux. Ces différences sont sans doute dues aux simplifications de la méthode FIMUR et à des légers problèmes de convergence.

En comparant les diamètres moyens et les diamètres moyens de Sauter, il est possible de remarquer que les grandes gouttes sont mieux modélisées dans cette simulation. Cette meilleure modélisation peut s'expliquer en partie par une meilleure représentation statistique des grandes gouttes dans notre simulation. En effet, la distribution de particules numériques a été choisie pour reproduire les diamètres moyens d_{30} et d_{32} observés expérimentalement de manière exacte. De plus, les grandes particules sont mieux échantillonnées du fait de l'utilisation d'une méthode iso-masse pour tirer les particules. Une autre source d'explication possible de ces différences est la simplification importante de la méthode FIMUR. En effet, chaque particule est injectée au même point et avec la même vitesse axiale. Ceci ne tient pas compte de l'influence de l'atomisation sur la vitesse des gouttes. En effet dans la réalité, les petites gouttes sont formées en aval de l'injecteur par la désintégration d'amas liquides du fait des contraintes aérodynamiques. Ainsi, les petites gouttes vont être entraînées moins longtemps par la phase gazeuse que dans les simulations. Au contraire, les grandes gouttes sont plus inertielles et donc moins influencées par le gaz. Ainsi, la différence entre le comportement des amas liquides et des grandes gouttes est bien plus faible que la différence entre celui des amas liquides et des petites particules. L'ensemble de ces raisons pourrait expliquer la différence de qualité dans la simulation des petites gouttes et des grandes particules.

Une corrélation entre la taille des particules et leur vitesse axiale proche de l'injecteur a été mise en évidence par Linassier [81] et est visible sur la figure 4.18. Il est possible de remarquer que la vitesse des

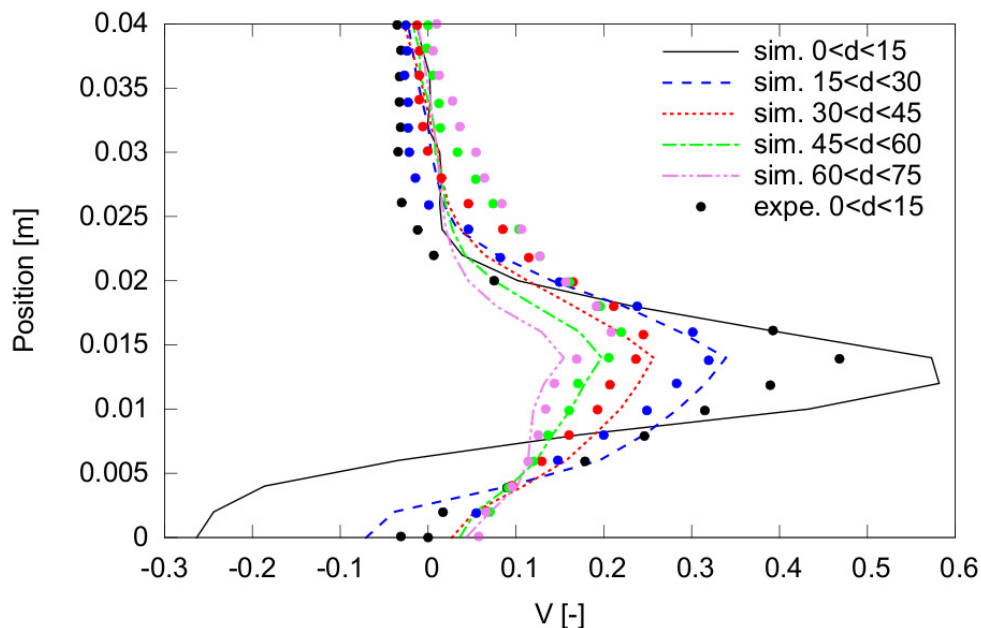


Figure 4.18 : Vitesse axiale des gouttes en fonction de leur position par rapport à l'axe et groupées par classes de diamètres. Les données expérimentales sont représentées par des points dont la couleur correspond aux données numériques correspondantes

gouttes dont le diamètre est compris entre $15\ \mu\text{m}$ et $45\ \mu\text{m}$ est très bien reproduite par les simulations réalisées avec CEDRE. La vitesse des gouttes de diamètre supérieur à $45\ \mu\text{m}$ est bien reproduite par les simulations numériques. Le pic de vitesse de ces grandes gouttes est légèrement sous-évalué dans les simulations numériques. La différence la plus importante entre les vitesses expérimentales et simulées

est observée pour les gouttes de diamètre inférieur à $15\ \mu\text{m}$. En effet, ces petites gouttes ont une vitesse axiale négative au centre de la chambre dans la simulation alors que ce n'est pas le cas dans les données expérimentales. Ainsi, la simulation prédit une capture des petites gouttes par la zone de recirculation centrale, ce qui n'est pas le cas dans les données expérimentales. De plus, le pic de vitesse axiale des petites gouttes est plus important dans la simulation comparé aux données expérimentales. Ainsi, il est possible de dire que la vitesse axiale des petites gouttes est surévaluée dans les simulations numériques. Cette surévaluation provient sans doute de l'absence de prise en compte des effets de l'atomisation dans la méthode FIMUR. Ces observations de la vitesse axiale des gouttes par classes de diamètre sont cohérentes avec les différences entre résultats moyennés en nombre et en masse observées auparavant. Les résultats moyennés en nombre donnent plus d'importance aux petites gouttes dont la vitesse est surévaluée, ce qui est cohérent avec la surévaluation des pics de vitesse observée sur la figure 4.14.

Ces observations permettent d'envisager une piste possible d'amélioration de la méthode FIMUR. Il pourrait être intéressant de modifier la vitesse d'injection des petites gouttes afin de se rapprocher des données expérimentales à 10 mm de l'injecteur. Ces modifications n'ont pas été effectuées dans cette thèse par manque de temps.

4.3.4 Répartition du flux volumique

La répartition du flux volumique dans la chambre peut être comparée entre la simulation numérique et les données expérimentales sur la figure 4.19. Les données de flux volumique ont été divisées par

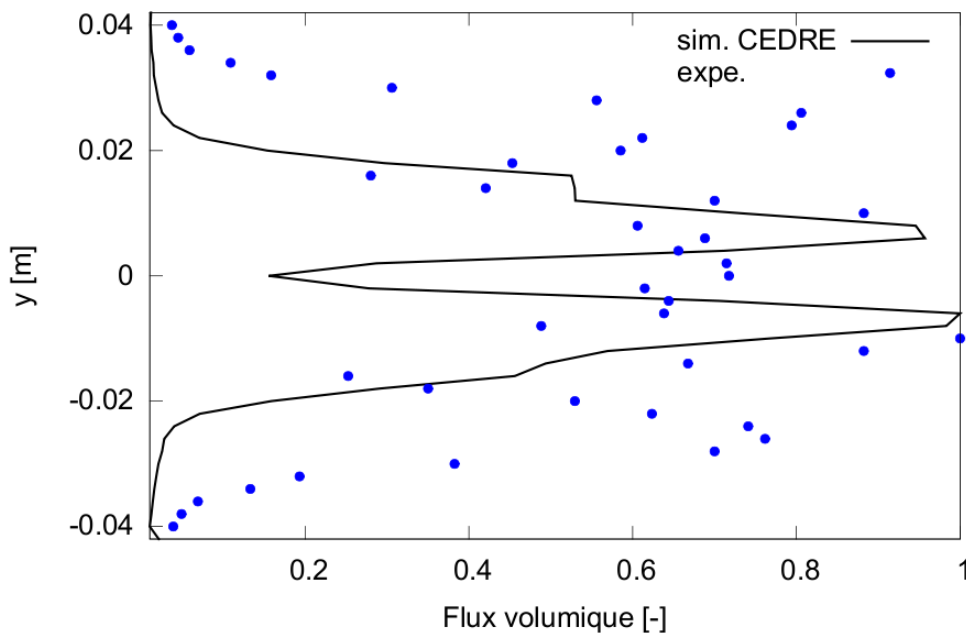


Figure 4.19 : Flux volumique de la phase dispersée au plan $z = 6\text{mm}$ en fonction de la distance à l'axe.

le maximum de flux volumique de manière à permettre la comparaison. Les mesures expérimentales du flux volumique sont peu précises et la comparaison est principalement qualitative afin de mieux comprendre les différences observées sur les profils de vitesses et de diamètres. Dans notre simulation numérique, deux pics semblant correspondre au jet sont observés. Les données expérimentales

présentent un profil très bruité sur lequel quatre pics peuvent être distingués. Deux pics semblent correspondre au jet et approximativement aux données numériques. La zone de recirculation centrale présente un flux volumique beaucoup plus important dans les données expérimentales. Les deux pics non présents dans la simulation sont situés dans des zones de très faible vitesse à l'extérieur du jet principal. La présence de ces pics pourraient être liée à l'absence de confinement pendant l'acquisition des données expérimentales. En effet, les vitesses observées dans cette zone semblent indiquer l'absence de zone de recirculation latérale dans l'expérience menée sans la chambre.

4.3.5 Influence de la phase dispersée sur l'écoulement gazeux

Après avoir comparé la simulation de la phase dispersée avec les données expérimentales acquises par Linassier [81], il peut être intéressant de regarder l'impact de la présence de la phase dispersée sur l'écoulement gazeux. L'influence de la présence d'une phase dispersée sur l'écoulement gazeux est très faible. Les profils de vitesse et les champs de température ne sont pas modifiés de manière significative. Compte tenu de la faible température de l'écoulement dans les conditions du point de référence, l'évaporation est minime.

Des capteurs de pression dans l'écoulement permettent après analyse spectrale par FFT de trouver la fréquence de l'instabilité tourbillonnaire PVC. La présence d'une phase dispersée diminue très légèrement la fréquence du PVC qui passe de $1052 \pm 2Hz$ à $1026 \pm 7Hz$. Les deux spectres sont visibles sur la figure 4.20. Les deux spectres sont très proches, ce qui confirme l'influence très faible

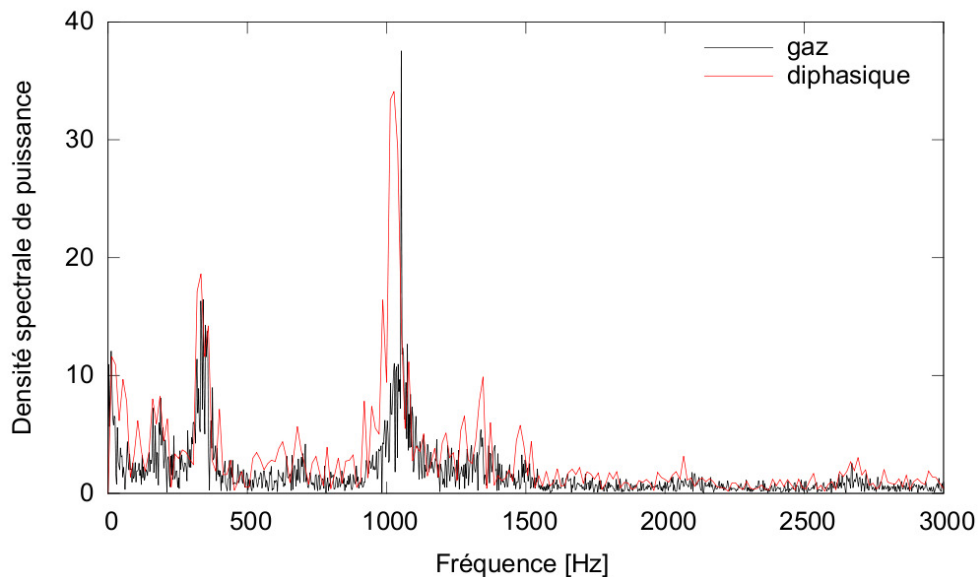


Figure 4.20 : Spectres de pression issus des simulations numériques pour l'écoulement purement gazeux et pour l'écoulement diphasique

de la phase dispersée sur l'écoulement gazeux.

4.4 Conclusion

Dans ce chapitre, une simulation de l'écoulement diphasique non-réactif a été effectuée et validée par comparaison avec des données expérimentales. Dans un premier temps, une méthode d'injection simplifiée appelée FIMUR a été implémentée dans le code CEDRE. Cette méthode consiste à injecter des particules directement au niveau du plan d'injection avec une vitesse définie par des corrélations géométriques liés au type d'injecteur à modéliser. La distribution de taille des particules est déterminée en modélisant la distribution de taille observée expérimentalement par une loi log-normale reproduisant les diamètres moyens d_{30} et d_{32} . Cette méthode a été validée sur le cas simplifié d'une injection dans un écoulement au repos.

Ensuite, cette méthode a été utilisée dans le cadre d'une simulation de l'écoulement diphasique non-réactif du MERCATO. Les résultats de cette simulation ont été comparés aux résultats expérimentaux de Linassier [81] et aux résultats numériques d'Eyssartier [42]. Tout d'abord, les profils de vitesses dans le plan $z = 6mm$ ont été comparés. Les résultats sont en bon accord pour les différentes composantes de vitesse lorsque les résultats moyennés en masse sont considérés. Les profils de diamètre moyen et de diamètre moyen de Sauter ont été eux aussi comparés aux données expérimentales. Les diamètres moyens de Sauter sont en accord raisonnable avec les données expérimentales mais les diamètres moyens sont mal reproduits par cette simulation numérique. Le profil de répartition du flux volumique a été comparée avec les résultats expérimentaux. Le profil numérique est plus resserré autour du jet principal. Finalement, une faible influence de la phase dispersée sur les structures tourbillonnaires de l'écoulement gazeux a été observée en comparant le spectre de pression en régime purement gazeux et en régime diphasique.

L'accord moins bon entre les données expérimentales et les résultats de la simulation CEDRE sur les petites gouttes peut être expliqué par différents phénomènes. D'une part, les petites gouttes sont sous-échantillonnées à cause de l'utilisation d'une méthode iso-masse pour le tirage des particules. D'autre part, la méthode FIMUR ne prend pas en compte les phénomènes d'atomisation et donc leur influence sur la vitesse des particules. Ainsi, dans la réalité les petites gouttes vont se former à cause de la désintégration d'amas liquides en aval de l'injecteur. De ce fait, elles seront entraînées moins longtemps par la phase gazeuse que dans la méthode FIMUR. Dans la simulation numérique réalisée dans cette thèse, les grandes gouttes semblent modélisées de manière suffisamment satisfaisante pour pouvoir mener une simulation réactive convenable.

Ce chapitre a montré que malgré sa simplicité, la méthode FIMUR peut reproduire correctement le comportement des grandes gouttes dans l'écoulement diphasique du MERCATO. Ces grandes gouttes jouent un rôle prédominant dans les phénomènes d'évaporation permettant d'apporter le carburant nécessaire à la flamme dans un écoulement réactif. Ainsi, les résultats de cette simulation semblent suffisamment satisfaisants pour mener des simulations réactives. Dans la prochaine section, des simulations de l'allumage de la chambre MERCATO seront effectuées.

Chapitre 5

Simulation de l'écoulement réactif pendant l'allumage du MERCATO

Dans ce chapitre, la capacité du code CEDRE à simuler l'écoulement réactif pendant l'allumage du banc MERCATO est étudiée.

Premièrement, une vérification des vitesses de flamme obtenues avec le schéma cinétique utilisé est effectuée sur des écoulement purement gazeux et sur des écoulements diphasiques.

Deuxièmement, des corrections des grandeurs vues par la phase dispersée quand un modèle de flamme épaissie est utilisé ont été implémentées dans le code CEDRE. Ces corrections ont été vérifiées sur un cas de flamme unidimensionnelle en écoulement diphasique.

Ensuite, une fois ces vérifications effectuées, des simulations de l'allumage de l'écoulement dans le banc MERCATO ont été effectuées. Certaines de ces simulations ont mené à des allumages ratés et d'autres à des allumages réussis. Une analyse de la propagation du noyau de flamme dans le cas d'un allumage réussi est effectuée. La structure de la flamme a également été étudiée.

Enfin, l'influence de la condition limite de paroi et de la fonction d'efficacité du modèle de combustion turbulente sont illustrées.

Sommaire

5.1	Vérification de la vitesse de flamme en écoulement diphasique	126
5.2	Implémentation de la correction du modèle de flamme épaissie en présence d'une phase dispersée	130
5.2.1	<i>Implémentation dans le code CEDRE</i>	130
5.2.2	<i>Validation du modèle sur un cas de flamme 1D diphasique</i>	131
5.3	Mise en place des simulations d'allumages	133
5.4	Résultats des simulations d'allumage	136
5.4.1	<i>Premières simulations menant à un échec de l'allumage</i>	136
5.4.2	<i>Simulation avec plus d'énergie déposée</i>	136
5.4.3	<i>Comparaison avec les données expérimentales</i>	141

5.4.4 *Impact du modèle thermique de paroi et de la fonction d'efficacité du modèle de combustion turbulente* 145

5.5 **Conclusion** 146

5.1 Vérification de la vitesse de flamme en écoulement diphasique

Afin de reproduire correctement l'écoulement réactif dans le MERCATO, il est nécessaire de reproduire correctement la vitesse de flamme. Comme vu dans la section 2.2.2, la vitesse de flamme en conditions diphasiques dépend de plusieurs paramètres : la température et la pression des gaz frais, la richesse du mélange, les propriétés de transport. Dans un écoulement diphasique, les caractéristiques de la phase dispersée influencent également cette grandeur. Ainsi, la vitesse d'une flamme diphasique dépend également du diamètre des gouttes, de leur température et des propriétés thermodynamiques influençant l'évaporation. Dans le cadre de simulation numérique, la distance entre le point d'injection des gouttes et le front de flamme peut également modifier la vitesse de flamme en modifiant la durée d'évaporation des gouttes en amont du front de flamme [95]. Afin d'enlever ce dernier paramètre, des simulations de flammes saturées sont effectuées. En effet, dans un milieu saturé, il n'y a pas d'évaporation et le diamètre et la température des gouttes ne vont pas évoluer dans les gaz frais. Ces propriétés n'évolueront qu'à l'approche du front de flamme.

La cinétique chimique utilisée dans ces simulations est le schéma KERO-BFER mis au point par Franzelli et al. [48] à partir du schéma squelettique de Luche [83]. Les constantes des réactions sont de la forme :

$$k_{fi} = A_i f_i \exp\left(\frac{-E_{a,i}}{RT}\right) \quad (5.1)$$

Les valeurs des différents paramètres sont visibles dans le tableau 5.1.

n°	Réaction	A cm ³ /mol sec	E_a cal/mol
1	$C_{10}H_{20} + 10O_2 \rightarrow 10CO + 10H_2O$ Sens direct : $n_{C_{10}H_{20}} = 0.55$ $n_{O_2} = 0.90$	$8.00 * 10^{11}$	$4.15 * 10^4$
2	$CO + 0.5O_2 \rightleftharpoons CO_2$ Sens direct : $n_{CO} = 1$ $n_{O_2} = 0.5$ Sens inverse : $n_{CO_2} = 1$	$4.5 * 10^{10}$	$1.2 * 10^4$

Tableau 5.1 : Schéma cinétique à deux étapes de la combustion du kérosène dans l'air [48]

f_i correspond à des fonctions permettant de corriger le taux de réaction pour des richesses $\phi > 1.1$. La fonction f_1 corrige la vitesse de flamme et la fonction f_2 corrige l'équilibre $CO - CO_2$ afin d'obtenir la bonne largeur de réaction et le bon temps d'atteinte de l'équilibre. Elle s'écrivent :

$$f_1 = \frac{2}{[1 + \tanh\left(\frac{\phi_{0,1} - \phi}{\sigma_{0,1}}\right)] + B_1[1 + \tanh\left(\frac{\phi - \phi_{1,1}}{\sigma_{1,1}}\right)] + C_1[1 + \tanh\left(\frac{\phi - \phi_{2,1}}{\sigma_{2,1}}\right)]} \quad (5.2)$$

$$f_2 = \frac{1}{2} \left[1 + \tanh \left(\frac{\phi_{0,2} - \phi}{\sigma_{0,2}} \right) \right] + \frac{B_2}{2} \left[1 + \tanh \left(\frac{\phi - \phi_{1,2}}{\sigma_{1,2}} \right) \right] \\ + \frac{C_2}{2} \left[1 + \tanh \left(\frac{\phi - \phi_{2,2}}{\sigma_{2,2}} \right) \right] * \left[1 + \tanh \left(\frac{\phi_{3,2} - \phi}{\sigma_{3,2}} \right) \right]$$

Les différentes constantes intervenant dans ces fonctions sont écrites dans le tableau 5.2.

j	$\phi_{0,j}$	$\sigma_{0,j}$	B_j	$\phi_{1,j}$	$\sigma_{1,j}$	C_j	$\phi_{2,j}$	$\sigma_{2,j}$	$\phi_{3,j}$	$\sigma_{3,j}$
1	1.173	0.04	0.29	1.2	0.02	7.1	1.8	0.18	-	-
2	1.146	0.045	0.00015	1.2	0.04	0.035	1.215	0.03	1.32	0.09

Tableau 5.2 : Paramètres pour les fonctions de corrections à richesse élevée [48]

Tout d'abord, des simulations de flamme unidimensionnelle purement gazeuses ont été effectuées et comparées avec des résultats obtenus avec le logiciel CANTERA ainsi qu'aux résultats de simulations réalisées avec AVBP par Franzelli [48]. Les vitesses de flamme sont visibles sur la figure 5.1. Les vitesses

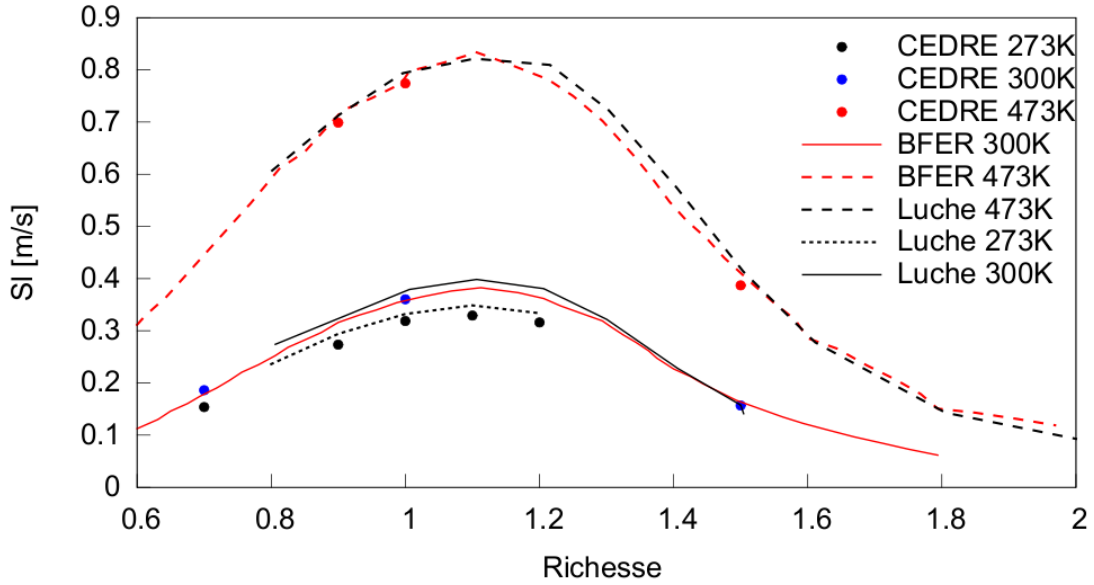


Figure 5.1 : Vitesse de flamme en fonction de la richesse pour différents schéma cinétiques et températures de gaz frais. Les résultats CEDRE proviennent de simulations réalisées avec CEDRE. Les résultats BFER et Luche proviennent de simulations réalisées avec Cantera [48].

de flamme obtenues avec CEDRE sont très proches des vitesses de flamme obtenues avec Cantera [56]. La vitesse de flamme obtenue pour des gaz frais à 273 K est légèrement plus faible que celle fournie par le schéma de Luche [83] mais la différence reste minime.

Ensuite, des simulations de flammes diphasiques unidimensionnelles ont été effectuées. La configuration présentée sur la figure 5.2 a été employée pour réaliser ces simulations. L'air est injecté sur la gauche. Un peu après l'injection des gaz frais, des gouttes de carburant sont injectées dans des conditions de saturation et à l'équilibre thermique et dynamique avec le gaz. Ainsi, les propriétés des gouttes n'évoluent pas tant que celles du gaz n'évoluent pas. Le calcul est initialisé avec une partie du

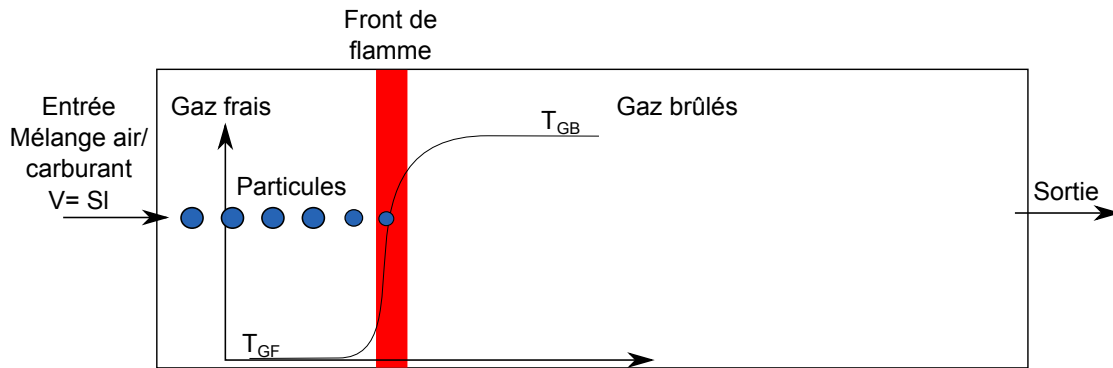


Figure 5.2 : Schéma de la configuration pour simuler une flamme laminaire diphasique unidimensionnelle

domaine comportant des gaz brûlés, de manière à établir un front de flamme à l'interface entre gaz frais et gaz brûlés. La vitesse de flamme est évaluée via une vitesse de consommation évaluée avec le taux de réaction du dioxygène. Pendant le calcul, la vitesse d'injection du carburant et des gouttes est ajustée afin de maintenir le front de flamme immobile par rapport au maillage. Cette vitesse est égale à la vitesse de flamme de consommation mentionnée précédemment.

Des comparaisons de la vitesse de flamme par rapport aux simulations réalisées par Senoner dans sa thèse [123] ont été effectuées. Ces comparaisons sont visibles sur la figure 5.3. Il est possible de

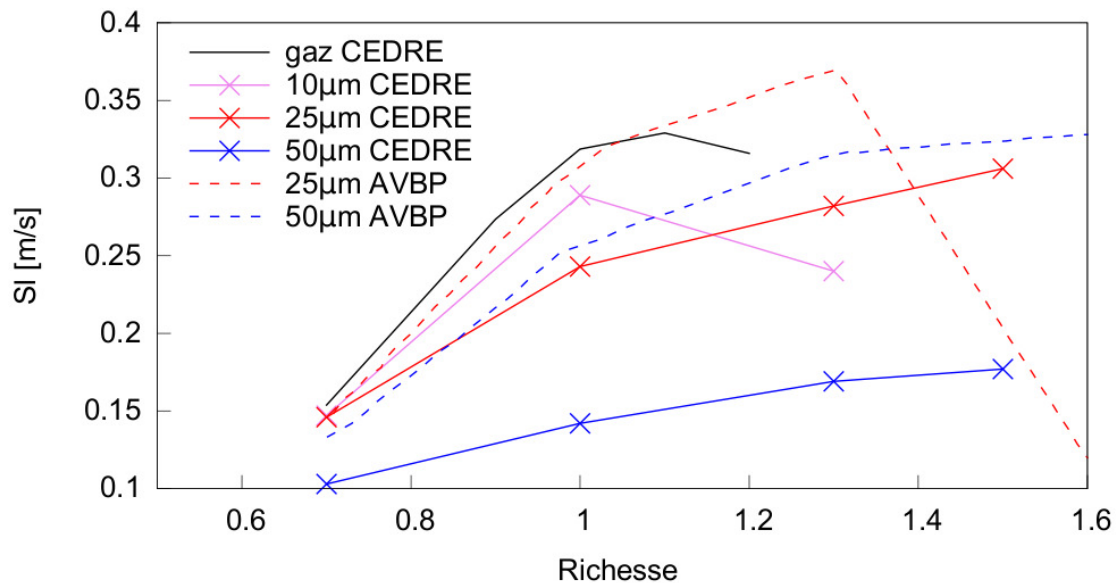


Figure 5.3 : Vitesse de flamme en fonction de la richesse pour différents diamètres de goutte

remarquer que les vitesses de flamme diphasiques sont plus élevées pour AVBP que pour CEDRE. Il semblerait que ces différences soient liées au temps d'évaporation des gouttes.

Les temps d'évaporation ont été comparés sur un cas unidimensionnel. Les gouttes sont injectées à une température de 300 K avec une vitesse identique à celle du gaz dans un écoulement gazeux à 473 K. Le temps nécessaire à l'évaporation complète de la goutte est obtenu à partir de la distance parcourue

par la goutte. D'après ces tests, le temps d'évaporation d'une goutte de $55\ \mu\text{m}$ de diamètre est de $22\ \text{ms}$ dans AVBP contre $38.6\ \text{ms}$ dans CEDRE. Ces différences sont dues à des différences dans les grandeurs thermodynamiques du liquide, par exemple au niveau de la chaleur latente d'évaporation et de la capacité thermique à pression constante du liquide. Une modélisation plus précise des grandeurs thermodynamique du liquide a été implémentée dans le code AVBP par Sierra-Sánchez [125]. Par exemple, la viscosité du mélange gazeux est évaluée à partir de la viscosité de chaque espèce. Cette nouvelle implémentation est similaire à la représentation présentée dans la section 1.1.9. Elle produit des résultats proches de ceux obtenus avec la thermodynamique implémentée dans CEDRE. Par conséquent, les données d'évaporation n'ont pas été modifiées dans CEDRE.

La vitesse de flamme d'un écoulement diphasique continue d'augmenter pour des richesses totales élevées lorsque les gouttes ont un diamètre suffisamment grand. Ce résultat peut être expliqué par l'évaporation limitée du carburant avant le front de flamme. En effet, plus le diamètre d'une goutte est important, plus l'évaporation de cette goutte sera lente. En première approximation, le temps d'évaporation est proportionnel au carré du diamètre. Ainsi, seule une petite partie du carburant total sera disponible au niveau du front de flamme.

Une manière de vérifier cette hypothèse est de s'intéresser à l'évolution de la vitesse de flamme en fonction de la richesse effective. La richesse effective correspond à la richesse au niveau du maximum de taux de dégagement de chaleur. Sur la figure 5.4, il est possible de voir que la vitesse de flamme à richesse effective fixée ne dépend pas de manière marquée du diamètre des gouttes. Ainsi, la vitesse de

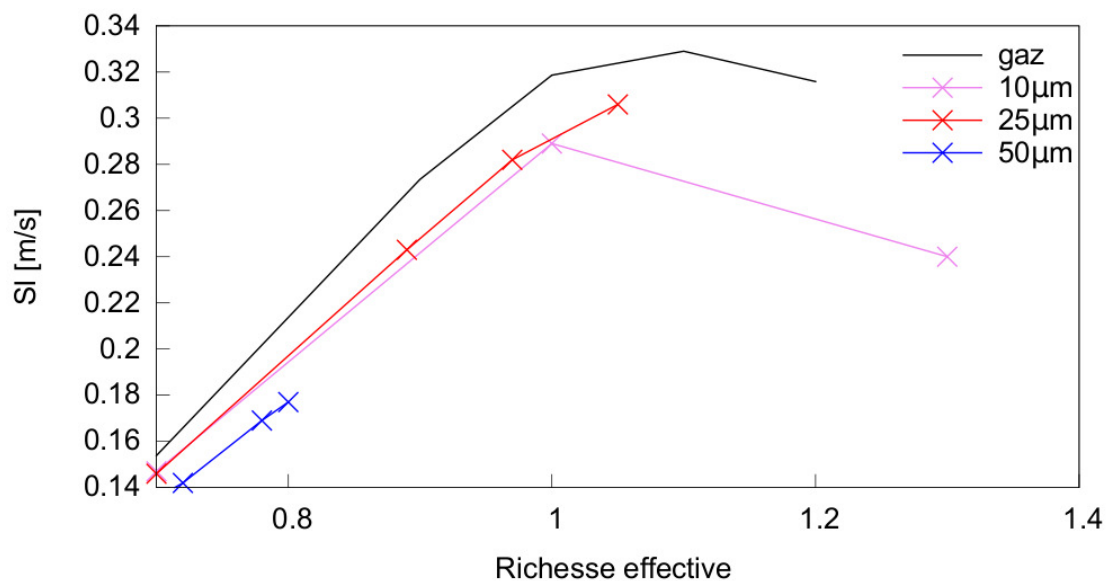


Figure 5.4 : Vitesse de flamme en fonction de la richesse effective pour différents diamètres de goutte

flamme plus faible pour des gouttes de grand diamètre semble bien causée par une évaporation plus lente.

Après avoir vérifié la vitesse de flamme en régime diphasique, il est nécessaire de vérifier le fonctionnement du modèle de combustion turbulente en présence d'une phase dispersée.

5.2 Implémentation de la correction du modèle de flamme épaissie en présence d'une phase dispersée

Dans l'allumage d'une chambre de combustion avec du carburant liquide comme celle du MERCATO, le spray interagit fortement avec le front de flamme. En effet, la majeure partie du carburant participant aux réactions de combustion provient de l'évaporation des gouttes proches du front de flamme. Cette interaction est particulièrement marquée dans le cadre de simulation diphasique où l'écoulement non-réactif est à des températures inférieures à 400 K comme c'est le cas dans les simulations effectuées dans cette thèse. Si le front de flamme est modifié par un modèle de combustion de flamme épaissie tel celui présenté en section 1.3.2.c), les interactions de ce front de flamme avec la phase dispersée vont être modifiées et ne vont plus correspondre aux phénomènes physiques réels. Par exemple, la phase dispersée verra un front de flamme plus large que le front de flamme réel, il faut donc diminuer le taux d'évaporation des gouttes ou la force de traînée subie par les particules.

5.2.1 Implémentation dans le code CEDRE

Afin de comprendre les modifications à effectuer sur la phase dispersée, il est possible de repartir du changement de variable à l'origine du modèle de flamme épaissie :

$$x' = Fx \quad (5.3)$$

$$t' = Ft \quad (5.4)$$

où F est le facteur d'épaississement. Ce changement de variable conduit aux modifications suivantes dans les équations liées à la phase dispersée :

$$\frac{dm_p v_{p,i}}{dt'} = F'_i \quad (5.5)$$

avec F'_i les forces extérieures subies par les particules modifiées par l'épaississement :

$$F'_i = \frac{F_i}{F} \quad (5.6)$$

$$\frac{dm_p}{dt'} = \dot{m}'_p \quad (5.7)$$

avec

$$\dot{m}'_p = \frac{\dot{m}_p}{F} \quad (5.8)$$

et

$$\frac{dm_p h_{s,p}}{dt'} = \dot{\Phi}'_p \quad (5.9)$$

avec $\dot{\Phi}'_p$ la variation d'énergie interne de la goutte modifiée par l'épaississement :

$$\dot{\Phi}'_p = \frac{\dot{\Phi}_p}{F} \quad (5.10)$$

Ainsi, les différents termes sources doivent être modifiés. La composante selon l'axe i de la vitesse de la particule p est modifiée de la manière suivante :

$$v_{p,i}^{n+1} = v_{p,i}^n + \frac{dv_{p,i}}{F} \quad (5.11)$$

avec

5.2. Implémentation de la correction du modèle de flamme épaissie en présence d'une phase dispersée

- $v_{p,i}^{n+1}$ la vitesse de la particule p au nouveau pas de temps
- $v_{p,i}^n$ la vitesse de la particule p à l'ancien pas de temps
- $dv_{p,i}$ le changement de vitesse de la particule p sans épaississement

De même, l'évaporation et l'évolution de la température de la particule p sont modifiées. Ainsi, avec ces modifications, le comportement de la phase dispersée en présence d'un front de flamme épaissi est similaire à celui observé en présence d'un front de flamme non épaissi.

5.2.2 Validation du modèle sur un cas de flamme 1D diphasique

Afin de valider le modèle de flamme épaissie en écoulement diphasique, des simulations de flamme unidimensionnelles ont été effectuées. Ces simulations ont été réalisées dans les mêmes conditions que dans la section précédente. Un schéma du cas peut être observé sur la figure 5.2.

Différents modèles de flamme épaissie ont été utilisés. Une simulation a été réalisée sans épaississement, une autre avec un épaississement constant sur tout le domaine. Enfin, deux simulations ont été réalisées avec un épaississement dynamique avec un senseur de flamme. La différence dans ces deux simulations est dans la formulation du senseur de flamme. Le senseur est formulé comme :

$$S = \tanh\left(\beta' \frac{\Omega}{\Omega_0}\right) \quad (5.12)$$

avec

$$\Omega = Y_F^{n_F} Y_O^{n_O} \exp\left(-\Gamma \frac{E_a}{RT}\right) \quad (5.13)$$

un pseudo taux de réaction se comportant comme la réaction à modéliser. Dans la première simulation, on a choisi $\Gamma = 1$ tandis que $\Gamma = 0.5$ a été choisi dans la seconde simulation. Le maillage est le même dans chaque simulation. L'épaississement maximum est de $F = 5$ dans chaque simulation avec épaississement. Les profils de différentes grandeurs sont comparés pour ces différents modèles de flamme épaissie. L'abscisse sur les graphes présentés correspond à une abscisse divisée par l'épaississement. La position $x = 0$ m a été choisie au niveau du maximum de dégagement de chaleur. Ces corrections permettent de facilement remarquer si les modèles d'épaississement modifient le profil de la grandeur. Les profils de vitesse du gaz et de vitesse des particules sont visibles sur la figure 5.5. Les différents modèles de flamme épaissie ne modifient pas le profil de vitesse de la phase gazeuse et de la phase dispersée.

Les profils de température du gaz et de température des particules sont visibles sur la figure 5.6. Le profil de température de la phase dispersée retombe à 0 K car il n'y a plus de particules après le front de flamme. Le modèle de flamme épaissie ne modifie pas le profil de température du gaz et de la phase dispersée.

Les profils de taux de dégagement de chaleur et de diamètre des particules au carré sont visibles sur la figure 5.7. Les taux de dégagement de chaleur sont adimensionnés par leur valeur maximum afin de facilement comparer les profils. En effet, ces valeurs sont directement modifiées par le modèle de flamme épaissie, seule leur intégrale sur l'ensemble du front de flamme est conservée. Il est possible de remarquer que le profil du taux de dégagement de chaleur est légèrement plus large avec les modèles d'épaississement dynamique. La valeur de la constante Γ permet de modifier la forme du senseur de

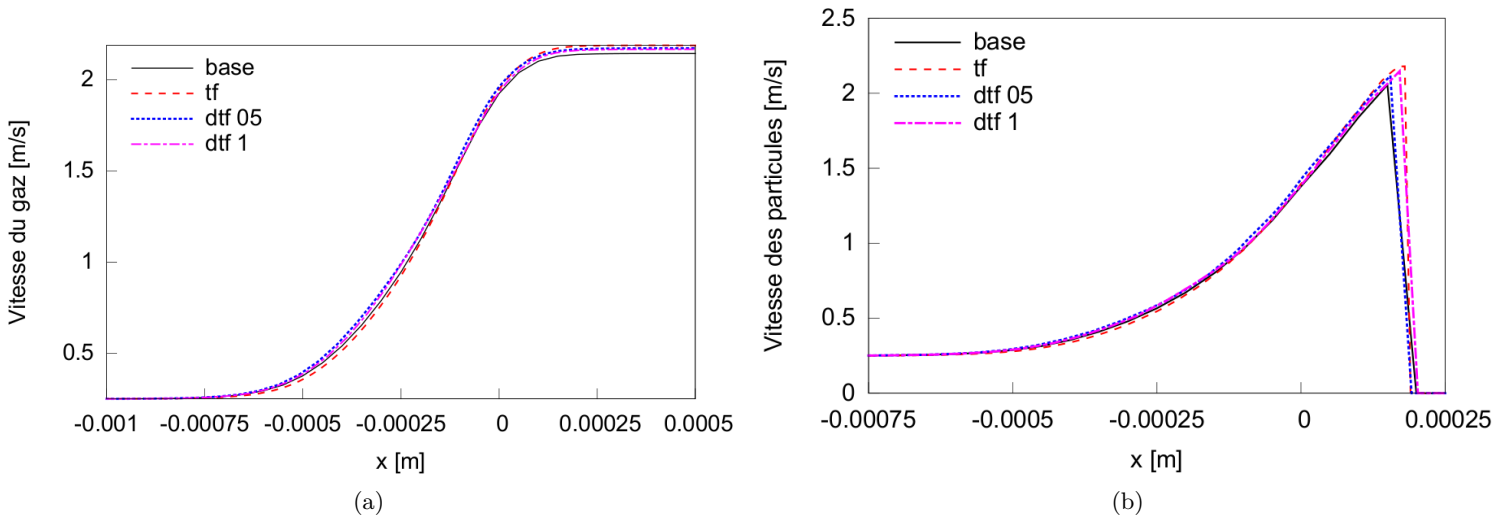


Figure 5.5 : Profil de vitesse du gaz 5.5a et de vitesse des particules 5.5b en fonction de la position par rapport au front de flamme

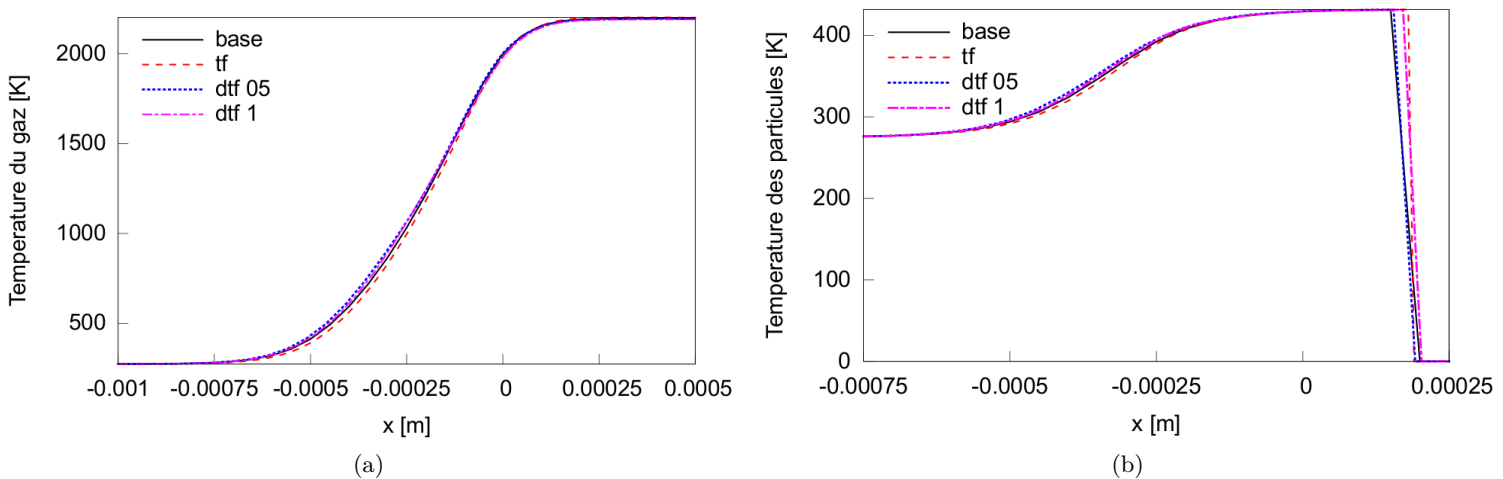


Figure 5.6 : Profil de température du gaz 5.6a et de température des particules 5.6b en fonction de la position par rapport au front de flamme

flamme ce qui modifie légèrement le profil de taux de dégagement de chaleur. Il est important de signaler que le front de flamme était légèrement sous-résolu en absence d'épaississement. En effet, le front de flamme était résolu sur moins de 8 points. Cette sous-résolution pourrait expliquer une partie de la différence pour les taux de dégagement de chaleur. Le profil de diamètre au carré des particules n'est pas modifié par le modèle de flamme épaissie.

Les comparaisons des différents profils montrent que le modèle de flamme épaissie n'a pas d'impact visible sur la vitesse et la température du gaz et de la phase dispersée ainsi que sur le diamètre des particules. Par contre, un léger effet est visible sur le profil de taux de dégagement de chaleur. Cette différence peut être atténuée en choisissant une valeur de Γ appropriée, par exemple $\Gamma = 0.5$ ici.

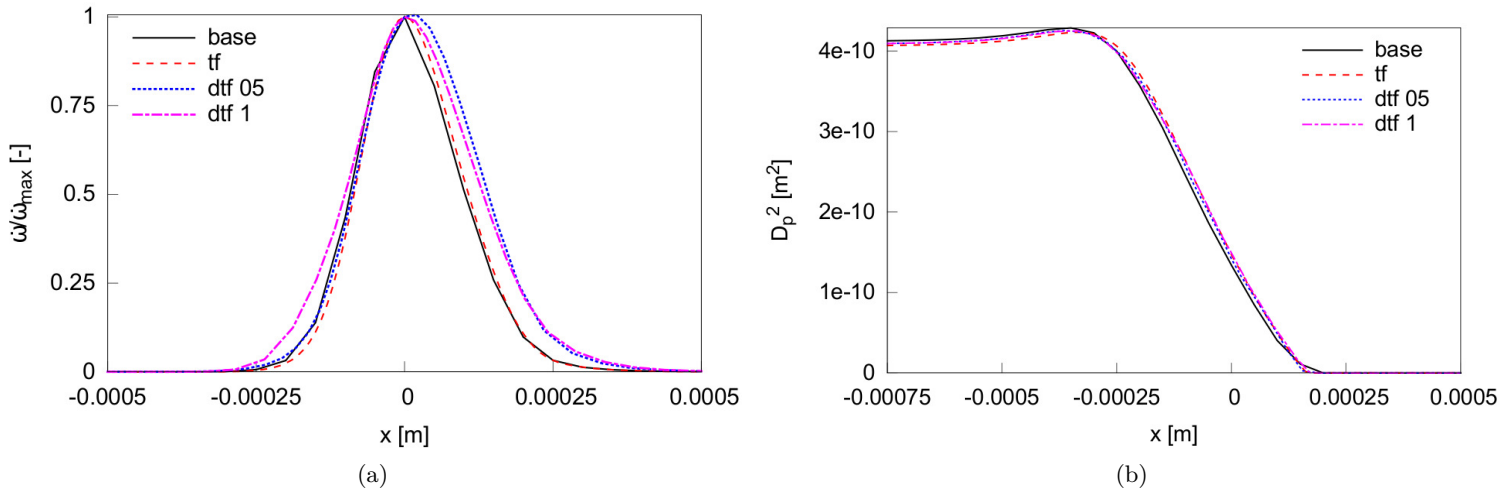


Figure 5.7 : Profil de taux de dégagement de chaleur adimensionné 5.7a et du carré du diamètre des gouttes 5.7b en fonction de la position par rapport au front de flamme

Une fois ces corrections du modèle de flamme épaissie en présence d'une phase dispersée implémentées dans CEDRE et vérifiées sur un cas de flamme unidimensionnelle, des simulations numériques d'allumage de la chambre MERCATO peuvent être effectuées.

5.3 Mise en place des simulations d'allumages

Des simulations de l'allumage de la chambre MERCATO ont été effectuées avec le code CEDRE. Le dépôt d'énergie provoquant l'allumage est représenté par un terme source d'énergie selon la méthode décrite dans la section 2.2. Ce terme source est déposé près de la paroi au niveau du plan de mesure $z = 56$ mm. Cette position correspond à la position utilisée pour réaliser des visualisations d'allumages dans la thèse de Linassier [81]. Différentes valeurs ont été utilisées pour les différents paramètres du dépôt d'énergie afin d'observer la différence sur les simulations d'allumage. Ces paramètres sont rassemblés dans le tableau 5.3.

Essai	Énergie déposée ϵ_i [mJ]	Taille dépôt Δs [mm]	Durée dépôt Δt [μ s]	Durée carburation [ms]
A1	100	5	50	80
A2	150	6	50	80
A3	150	8	50	80
A4	300	8	50	80
B1	150	6	50	90
C1	300	8	50	95
D1	300	8	50	100

Tableau 5.3 : Paramètres du dépôt d'énergie dans les simulations numériques effectuées

Pour réaliser ces simulations, un nouveau maillage plus raffiné autour de la bougie a été utilisé. Ce

maillage plus raffiné permet de résoudre le noyau de gaz chaud créé par le dépôt d'énergie en limitant l'impact du modèle de flamme épaissie. En effet, le modèle de flamme épaissie modifie les processus de diffusion qui sont prédominants dans les premiers instants du dépôt d'énergie. Ce nouveau maillage plus raffiné est visible figure 5.8. Il contient environ 3 900 000 tétraèdres dont la plus petite mesure $4.5 \times 10^{-5}m$ d'après la racine cubique du volume de la maille.

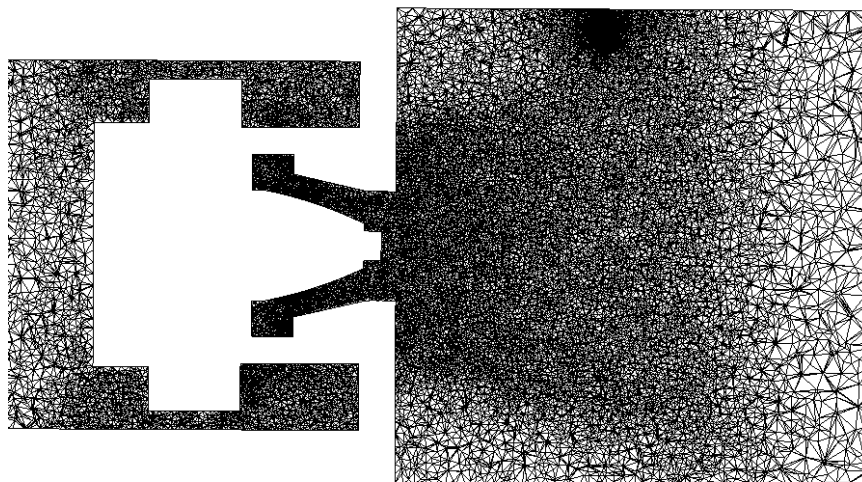


Figure 5.8 : Vue en coupe du maillage plus raffiné autour de la bougie

Avant de réaliser le dépôt d'énergie, le champ diphasique dans la chambre MERCATO a été interpolé sur le maillage raffiné autour de la bougie en utilisant l'utilitaire MANGROVE de la chaîne CEDRE. Ensuite, une simulation diphasique inerte a été réalisée pendant plus de 80 ms. Après cela, le terme source d'énergie a été ajouté afin de réaliser la simulation A1. Les simulations A2 à A4 ont été réalisées avec le même instant initial mais des termes sources différents. Les simulations B1, C1 et D1 ont été réalisées à partir d'un champ initial représentant l'écoulement 10 ms, 15 ms et 20 ms après le champ initial A. Le champ initial correspond toujours à un champ issu d'une simulation diphasique inerte.

Les paramètres utilisés dans le calcul sont visibles dans le tableau 5.4. Un schéma explicite est utilisé pour la discrétisation spatiale car pendant la phase de dépôt d'énergie il n'est pas possible de monter à des valeurs de CFL très élevées. Dans un premier temps, les réactions chimiques ne sont pas activées car le schéma cinétique KERO BFER utilisé dans ces simulations n'a pas été prévu pour être utilisé à très haute température et n'est pas robuste pour des températures supérieures à 5000 K. Or, pendant cette première étape de dépôt d'énergie, la température peut dépasser les 50 000 K au centre du dépôt d'énergie. Ces températures extrêmement élevées sont liées à l'absence de prise en compte des phénomènes de dissociation contribuant à dissiper de l'énergie. De plus, les propriétés de transport n'ont pas été corrigées à hautes températures et sont donc sous-évaluées à hautes températures (cf. 2.4). Ainsi, la diffusion thermique sera plus lente et des températures plus élevées peuvent être atteintes au coeur du dépôt d'énergie.

Discrétisation spatiale	Schéma de Roe d'ordre 2
Limiteur spatial	ATVL
Intégration temporelle	Runge-Kutta explicite d'ordre 3
Pas de temps	Limitation $CFL < 0.7$
Réactions chimiques	Pas de réactions
Traînée	Schiller-Naumann
Évaporation	Abramzon-Sirignano
Chauffage	Abramzon-Sirignano
Couplage gaz-phase dispersée	Oui avec rétroaction phase dispersée

Tableau 5.4 : Paramètres numériques utilisés dans un premier temps dans la simulation d'allumage

Ensuite, quand la température descend en dessous de 5000 K, les réactions chimiques sont activées. Afin de limiter les problèmes de robustesse à l'activation de la chimie, le pas de temps est brièvement fixé à $1 \times 10^{-9}s$ pendant quelques dizaines d'itérations. Une fois les réactions chimiques mises en place, la simulation numérique est poursuivie avec les paramètres du tableau 5.5. Le pas de temps est augmenté progressivement une fois que la phase de propagation du noyau de flamme a commencé.

Discrétisation spatiale	Schéma de Roe d'ordre 2
Limiteur spatial	ATVL
Intégration temporelle	Runge-Kutta explicite d'ordre 3
Pas de temps	De $1 \times 10^{-8}s$ à $5 \times 10^{-8}s$
Réactions chimiques	Cinétique KERO BFER
Combustion turbulente	Flamme épaissie dynamique avec modèle de Charlette
Traînée	Schiller-Naumann
Évaporation	Abramzon-Sirignano
Chauffage	Abramzon-Sirignano
Couplage gaz-phase dispersée	Oui avec rétroaction phase dispersée

Tableau 5.5 : Paramètres numériques utilisés dans la suite de la simulation d'allumage

Dans ces simulations, les conditions aux limites sont les mêmes que pour la simulation de l'écoulement diphasique inerte. Elles sont récapitulées dans le tableau 5.6.

Entrée du plenum	Entrée avec débit d'air imposé $\dot{m}_g = 35g/s$ $T_g = 293$
Sortie de la trompe	Sortie non réfléchissante $P = 101300Pa$
Paroi	Loi de paroi CEDRE, paroi adiabatique et paroi complexe en diphasique
Injection	Méthode FIMUR

Tableau 5.6 : Conditions aux limites utilisées pour la simulation de l'allumage dans le MERCATO

5.4 Résultats des simulations d'allumage

5.4.1 Premières simulations menant à un échec de l'allumage

Les simulations réalisées avec des dépôts d'énergie inférieurs à 300 mJ ont toujours mené à des allumages ratés. A chaque fois, un noyau de gaz chaud se forme après le dépôt d'énergie. Mais le rayon du noyau diminue et trop peu de carburant est évaporé pour maintenir une réaction de combustion. L'évolution du noyau de flamme pendant la simulation A1 est visible sur la figure 5.9. Le noyau de

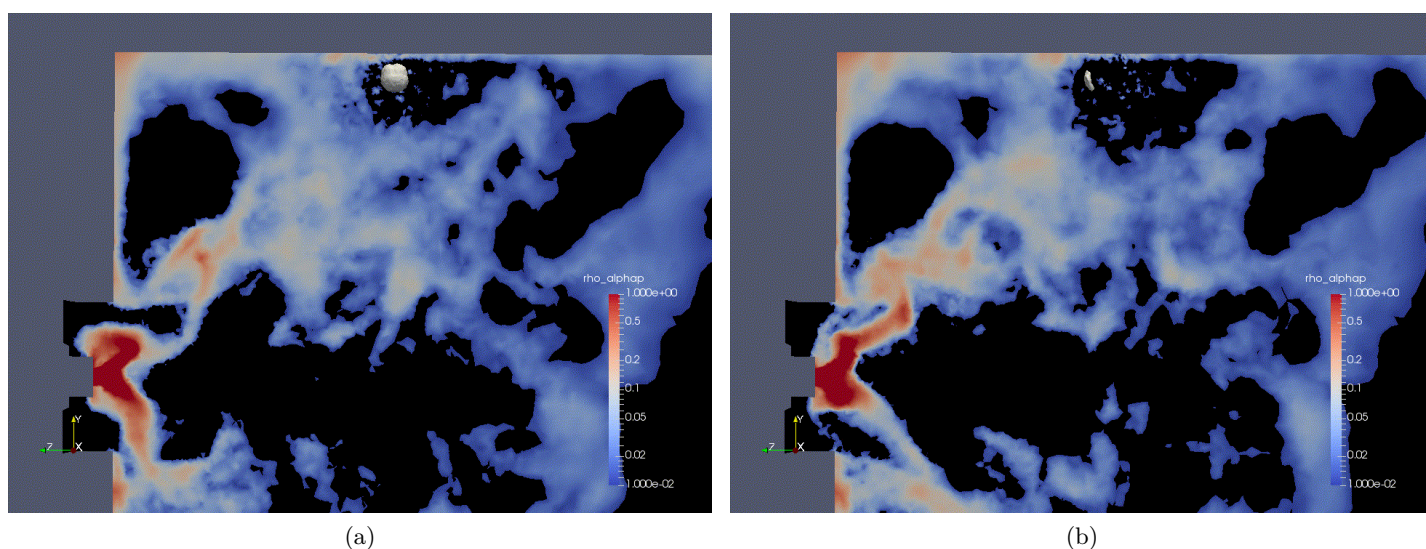


Figure 5.9 : Iso-contour de température $T = 1700K$ représentant le noyau de flamme sur un champ de fraction volumique de liquide pendant la simulation A1

flamme est convecté par l'écoulement et diminue en taille avant de disparaître.

5.4.2 Simulation avec plus d'énergie déposée

Dans le cas du MERCATO, l'énergie fournie par la bougie au gaz a été estimée entre 100 mJ et 200 mJ. Afin de pouvoir réaliser une simulation menant à un allumage réussi, le dépôt d'énergie a été augmenté à 300 mJ, ce qui est supérieur à l'estimation expérimentale de l'énergie déposée. Un point important à mentionner est qu'expérimentalement, l'allumage ne se produisait jamais avant le neuvième claquage consécutif de la bougie [73], ces claquages se produisant à une fréquence de 6 Hz. Aucune raison n'a été fournie mais deux hypothèses probables sont présentées. Un meilleur remplissage de la chambre en carburant avec l'avancée en temps des essais pourrait permettre d'obtenir plus de régions à la stoechiométrie favorable à l'allumage dans la chambre. Une autre hypothèse est que les claquages précédents, même s'ils ne réchauffent pas l'écoulement pour les claquages successifs, pourraient réchauffer les parois. Des parois plus chaudes diminueraient les pertes thermiques subies par le noyau de gaz chaud dans ces régions, ce qui permettrait au noyau de grandir suffisamment pour permettre l'allumage de la chambre. Les données expérimentales indiquent une probabilité d'allumage d'environ 37% [73]. L'approche suivie ici de simulations numériques aux grandes échelles d'allumage est trop coûteuse pour pouvoir obtenir des probabilités d'allumage. Un allumage réussi et trois allumages

ratés ont été obtenus pour le même dépôt d'énergie avec des champs initiaux à des instants différents. Ainsi, le caractère probabiliste de l'allumage est retrouvé dans nos simulations.

Parmi les simulations suivantes, la simulation C1 a mené à un allumage réussi. Dans cette simulation, on peut observer sur la figure 5.10 la convection du noyau de gaz chaud jusqu'à une zone de faible vitesse où la richesse totale est proche de la stoechiométrie où il va se stabiliser et grandir. Dans les simulations ne menant pas à un allumage réussi, le noyau de flamme n'atteignait pas de zones à la richesse proche de la stoechiométrie. Ce comportement est proche du comportement observé expérimentalement par Linassier [81].

De manière plus détaillée, deux périodes différentes peuvent être distinguées. Dans un premier temps, le noyau de flamme ne se propage presque pas, comme le montre la surface de l'iso-contour utilisée pour le visualiser. Pendant cette phase, le noyau est situé dans une région pauvre. Ainsi, la capacité d'expansion de la flamme est limitée. L'évaluation d'une vitesse de consommation de la flamme basée sur le taux de réaction du dioxygène $\dot{\omega}_{O_2}$ et l'aire de la flamme A_f permet de mieux caractériser l'allumage.

$$S_c = -\frac{\int \dot{\omega}_{O_2} dV}{\rho_0 Y_{O_2}^0 A_f} \quad (5.14)$$

L'évolution de cette vitesse de consommation en fonction du temps est visible sur la figure 5.11. Une vue plus détaillée de la première partie de l'évolution de la vitesse de flamme est visible sur la figure 5.12.

Deux pics sont visibles sur la courbe de la vitesse de consommation. Ils correspondent à des valeurs quasi nulles de la surface de flamme. A l'exception de ces deux pics, la vitesse de flamme se situe dans des valeurs correspondant à des vitesses de flamme à une richesse proche de la stoechiométrie, soit autour de 0.37 m s^{-1} . Cette vitesse de flamme est beaucoup plus faible que la vitesse de convection du noyau de flamme par l'écoulement. En effet, pendant la première phase le noyau de flamme est convecté par l'écoulement à une vitesse d'environ 12 m s^{-1} . Cette vitesse a été évaluée en observant le déplacement du noyau de flamme au cours du temps, cf. figure 5.10a, 5.10b et 5.10c. Ainsi, le noyau de flamme est convecté près de l'injecteur et donc vers des régions plus riches en carburant. Dans une zone de faible vitesse où la quantité de carburant est proche de la stoechiométrie, la vitesse de consommation augmente légèrement et la surface de la flamme augmente très rapidement. A ce moment, environ 6 ms après l'allumage, une deuxième phase où le noyau de flamme se propage dans la chambre est visible. Le noyau se propage dans les régions où la richesse est proche de la stoechiométrie. C'est par exemple visible sur la figure 5.13 représentant un iso-contour de température et un iso-contour de richesse égale à un. Les zones à la richesse stoechiométrique se situent principalement autour de la flamme. De plus, la flamme semble se propager principalement dans ces régions proches de la stoechiométrie. Pendant cette deuxième phase de propagation du noyau de flamme, le front de flamme est toujours convecté par l'écoulement. En effet, la vitesse à laquelle la flamme se propage est trop rapide pour être due uniquement à la vitesse de consommation de la flamme. Ainsi, le front de flamme peut se déplacer à plus de 14 m s^{-1} en vitesse absolue. De plus, le front de flamme possède une vitesse axiale importante quand il se propage vers le fond de la chambre en s'éloignant de l'injecteur, ce qui est visible sur les figures 5.10e et 5.10f. Il est possible d'observer que la flamme finit par se stabiliser dans une zone où la vitesse est faible autour du cône d'injection sur la figure 5.10f.

Une observation de l'indice de Takeno permet d'observer sur la figure 5.14 qu'une flamme de diffusion coexiste avec une flamme de pré-mélange. Cet indice correspond au signe du produit scalaire

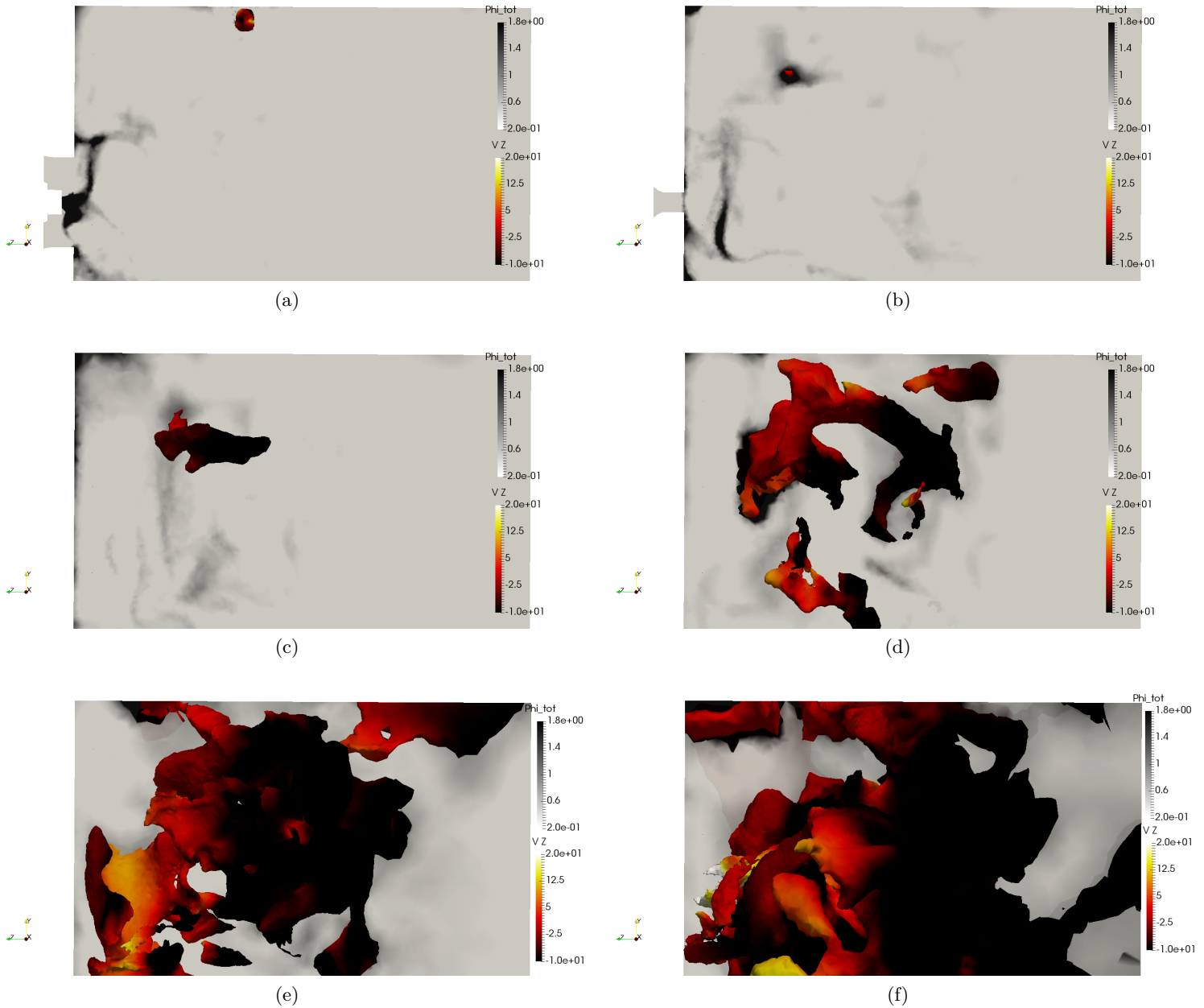


Figure 5.10 : Iso-contour de température $T = 1700K$ représentant le noyau de flamme sur un champ de richesse totale pendant la simulation C1. Image 0.1ms 5.10a, 4.5ms 5.10b, 7.5ms 5.10c, 12ms 5.10d, 16ms 5.10e et 22ms 5.10f après l'allumage

du gradient de carburant et d'oxydant :

$$Takeno = \frac{\nabla Y_{C_{10}H_{20}} \cdot \nabla Y_{O_2}}{|\nabla Y_{C_{10}H_{20}}| \cdot |\nabla Y_{O_2}|} \quad (5.15)$$

Une valeur de 1 indique une flamme de pré-mélange tandis qu'une valeur de -1 indique une flamme de diffusion. Sur la figure 5.14, l'indice de Takeno est multiplié par la valeur absolue du taux de

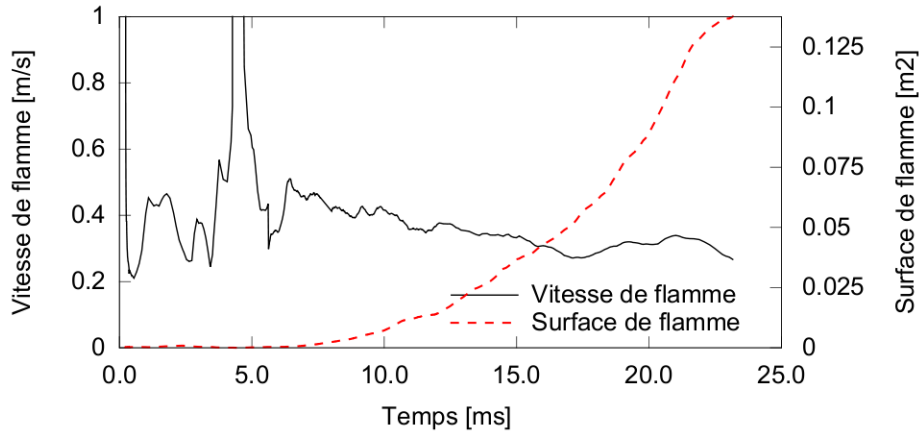


Figure 5.11 : Évolution de la vitesse de consommation et de la surface de flamme en fonction du temps

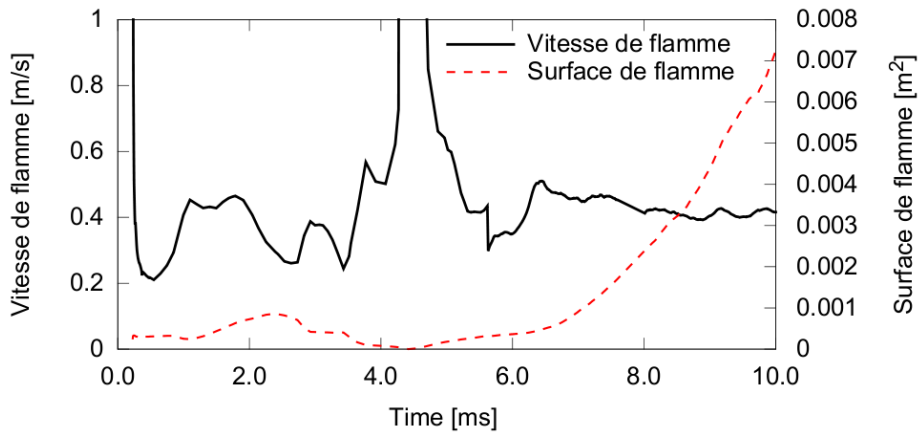


Figure 5.12 : Détail de l'évolution de la vitesse de consommation et de la surface de flamme en fonction du temps au début de l'allumage

dégagement de chaleur $\dot{\omega}_T$ pour faire ressortir le front de flamme. Les gouttes rencontrent d'abord une zone où une flamme de pré-mélange consomme le carburant évaporé jusque-là. Lorsque des gouttes traversent ce front de flamme, du carburant va être évaporé progressivement. A ce moment, si un excès d'oxydant est présent dans la flamme de pré-mélange, une flamme de diffusion adjacente à la flamme de pré-mélange peut être observée. Cette flamme de diffusion va consommer le reste de carburant ou d'oxydant suivant la valeur de richesse locale. Cette structure de flamme où une flamme de diffusion côtoie une flamme de pré-mélange a été observée dans d'autres simulations numériques de combustion diphasique, par exemple par Neophytou et al. [96], Guedot [58] et Paulhiac [103].

Afin de mieux représenter la flamme, il est possible de représenter la température et la fraction massique de carburant et de dioxygène en fonction de la fraction de mélange Z définie comme :

$$Z = \frac{\beta - \beta_O}{\beta_F - \beta_O} \quad (5.16)$$

β_O et β_F correspondent à la valeur de la fonction β pour de l'oxydant pur et du carburant pur. β est

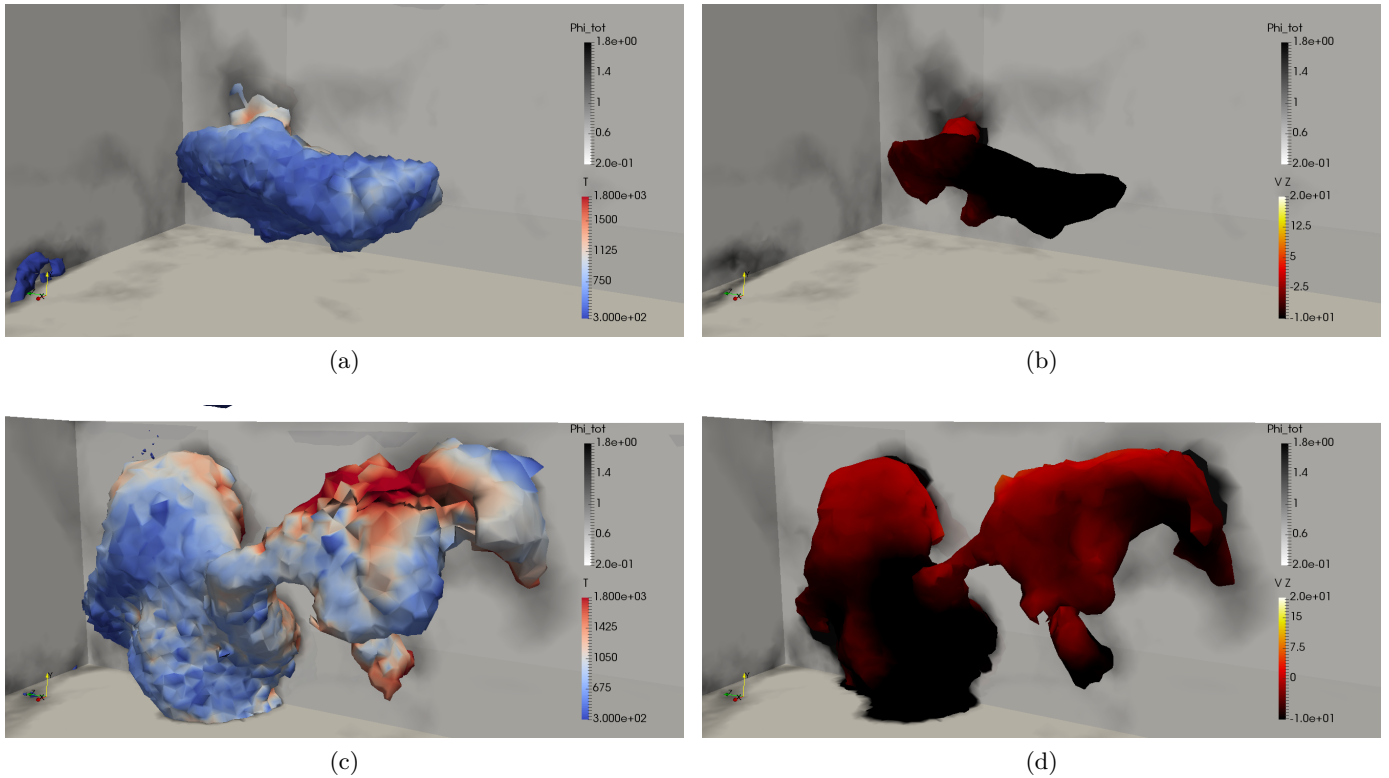


Figure 5.13 : Iso-contour de richesse stoechiométrique coloré en fonction de la température sur un champ coloré par la richesse totale à gauche (a), (c). Iso-contour de température $T = 1700K$ coloré en fonction de la vitesse axiale du gaz à droite (b), (d). Image 7.5ms (a),(b) et 10ms (c),(d) après l'allumage

définie, pour la combustion d'un carburant C_mH_n comme :

$$\beta = \sum_{k=1}^N \left(\frac{a_{C,k}}{m} + \frac{a_{H,k}}{n} - \frac{a_{O,k}}{m + n/4} \right) \frac{Y_k}{W_k} \quad (5.17)$$

$a_{E,k}$ correspond au nombre d'atome de l'élément E dans l'espèce k . Dans notre simulation, on obtient :

$$\beta = 3 \frac{Y_{C_{10}H_{20}}}{W_{C_{10}H_{20}}} - \frac{2Y_{O_2}}{15W_{O_2}} + \frac{Y_{H_2O}}{30W_{H_2O}} - \frac{Y_{CO_2}}{30W_{CO_2}} + \frac{Y_{CO}}{30W_{CO}} \quad (5.18)$$

L'évolution des différentes grandeurs en fonction de la fraction de mélange Z est visible sur la figure 5.15 7.6 ms après l'allumage, pendant la phase de propagation du front de flamme. Sur cette figure, on peut observer un comportement de flamme partiellement pré-mélangée couplée avec une flamme de diffusion. Ainsi, les lignes correspondant à l'équilibre chimique sont retrouvées mais de nombreux points hors équilibre chimique sont visibles. Ces points hors équilibre sont probablement dus à l'évaporation partielle des gouttes.

Un iso-contour du taux d'évaporation permet de montrer sur la figure 5.16 que la zone où l'évaporation est la plus importante est située en périphérie du noyau de flamme. Cette observation confirme l'interaction très forte entre les deux phénomènes dans la chambre MERCATO. Les réactions de

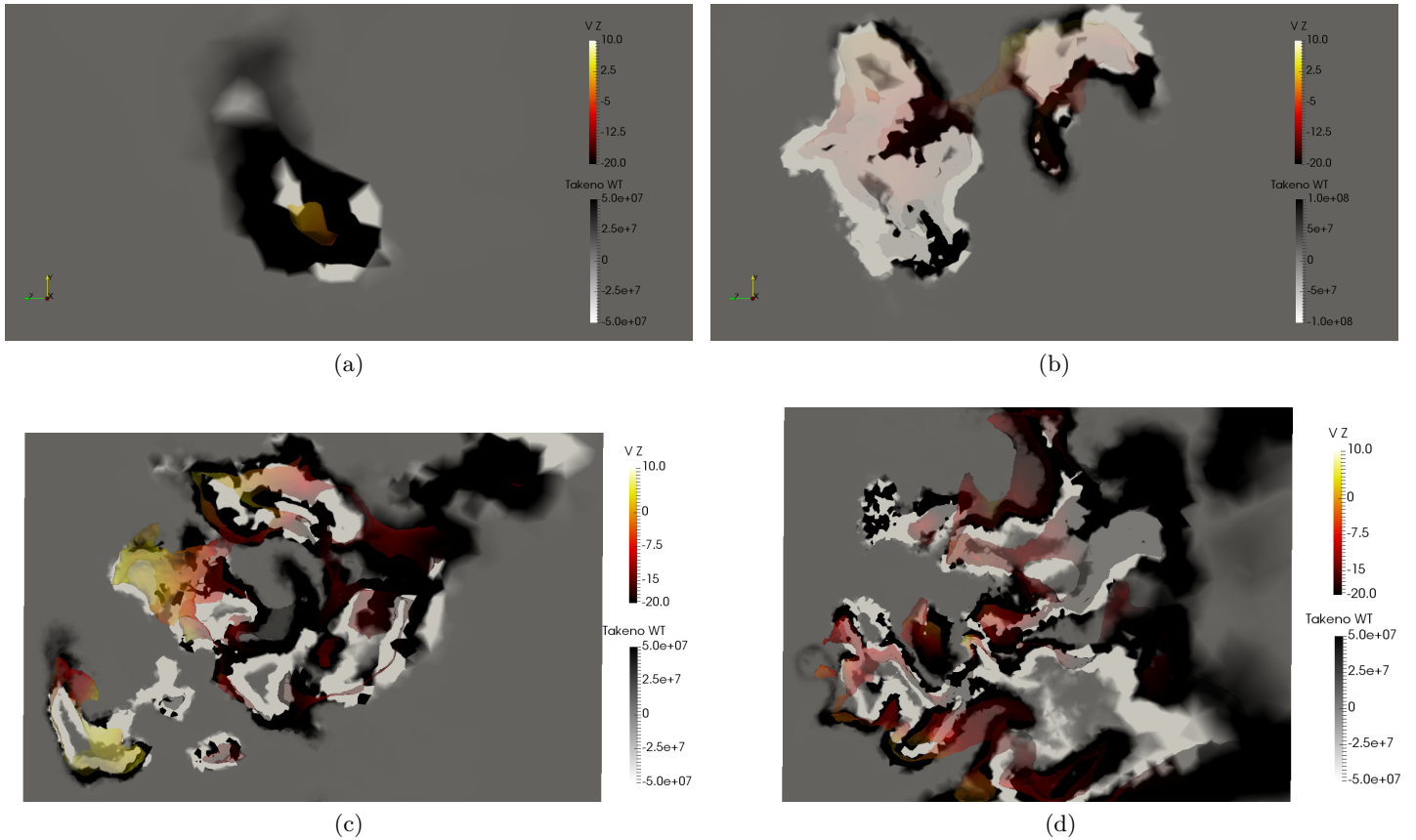


Figure 5.14 : Iso-contour de température $T = 1700K$ coloré en fonction de la vitesse axiale du gaz sur un champ coloré par l'indice de Takeno multiplié par le taux de dégagement de chaleur pendant la simulation C1. Image 4.6ms 5.14a, 10ms 5.14b, 16ms 5.14c et 22ms 5.14d après l'allumage. Le cadre a été choisi à chaque instant pour observer l'ensemble du front de flamme.

combustion dégagent de la chaleur, ce qui augmente la température des gaz environnants. Cette augmentation de la température entraîne une augmentation de l'évaporation, ce qui fournit du carburant permettant d'entretenir la combustion.

L'épaississement provoqué par le modèle de combustion turbulente reste modéré dans la majeure partie de la chambre. Une coupe effectuée au niveau du noyau de flamme permet de montrer sur la figure 5.17 que l'épaississement n'est supérieur à 5 que dans la partie de la chambre la plus éloignée de l'injection. Cette observation confirme que le raffinement effectué autour du dépôt d'énergie permet de limiter l'influence du modèle de flamme épaissi. L'évolution de la fonction d'efficacité du modèle de flamme épaissi est similaire à l'évolution de l'épaississement.

5.4.3 Comparaison avec les données expérimentales

Dans cette simulation, la propagation de la flamme était trop rapide comparée aux données expérimentales. En effet, si on compare des iso-contours de température avec des images tirées de la tomographie laser réalisée par Linassier [81] sur la figure 5.18, on peut s'apercevoir que le noyau de

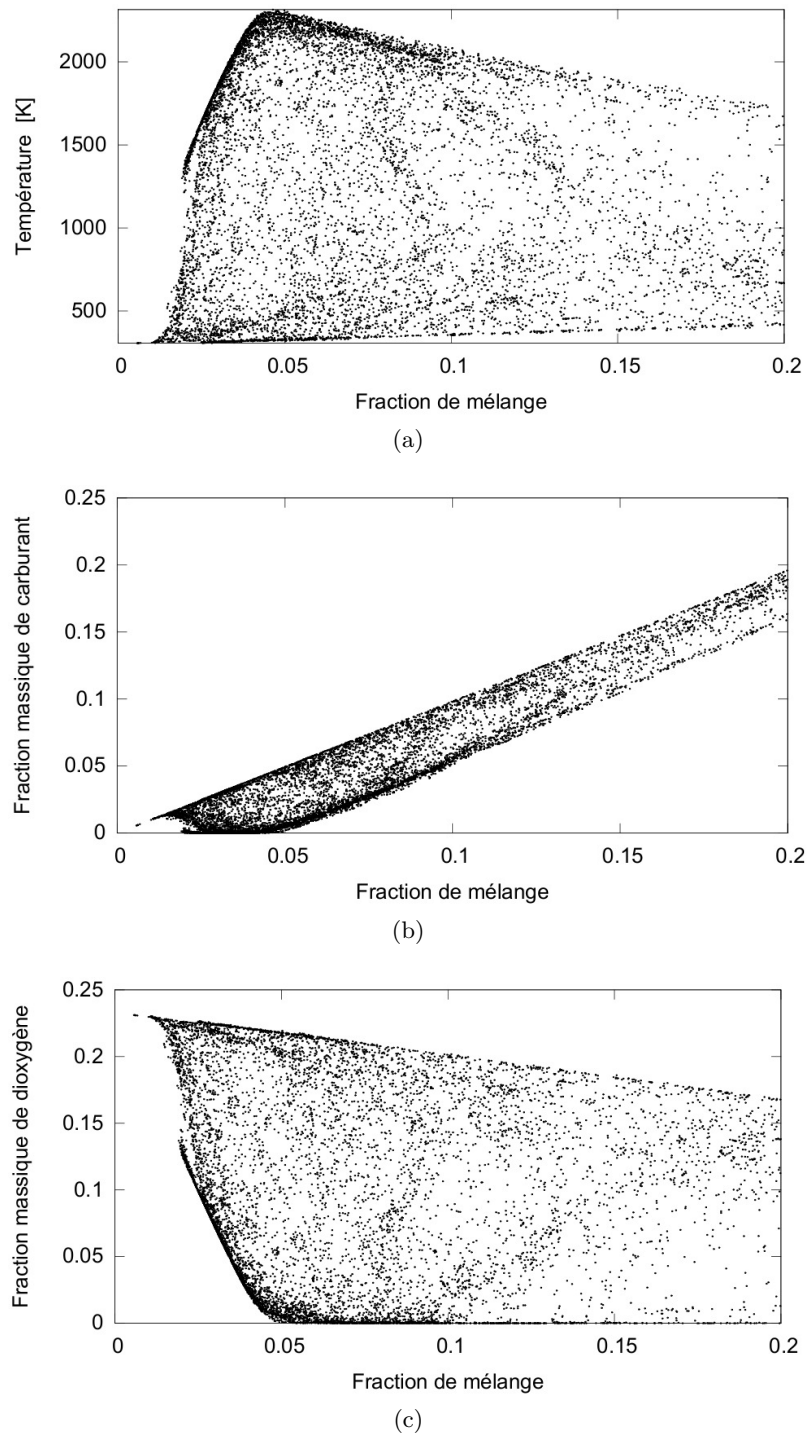


Figure 5.15 : Température 5.15a, fraction massique de carburant 5.15b et fraction massique d'oxydant 5.15c en fonction de la fraction de mélange. Les données proviennent de la zone où flamme de diffusion et de pré-mélange coexistent.

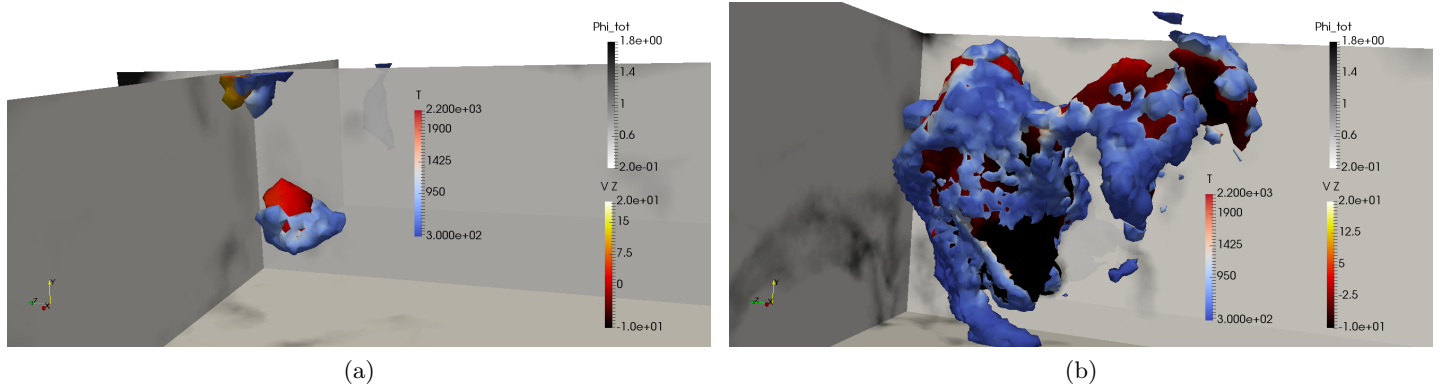


Figure 5.16 : Iso-contour de taux de dégagement de chaleur $W_T = 2 * 10^8 \text{ J.kg}^{-1}$ représentant le noyau de flamme coloré en fonction de la vitesse axiale du gaz, iso-contour du terme source d'énergie d'évaporation $5e7 \text{ J.kg}^{-1}$ coloré par la température du gaz sur un champ coloré par la richesse totale pendant la simulation C1. Image 4.7ms 5.16a, 10ms 5.16b après l'allumage

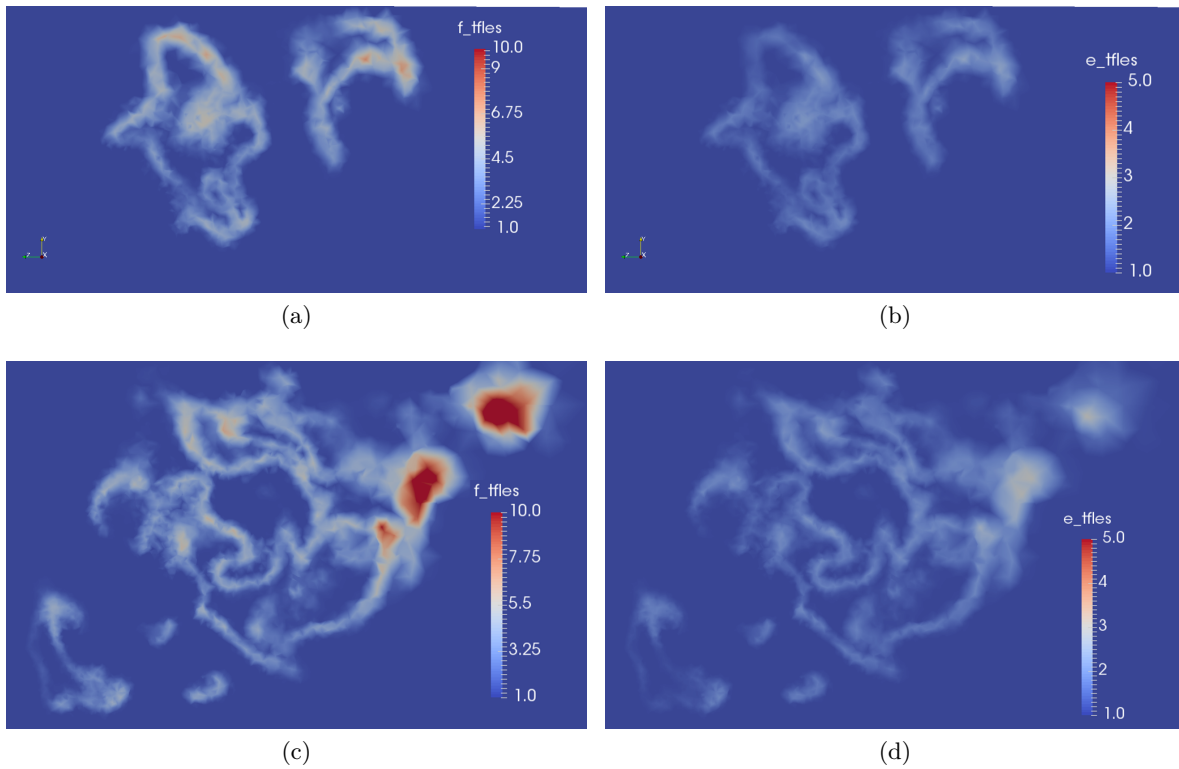


Figure 5.17 : Coupe colorée par l'épaisseur, à gauche, et par la fonction d'efficacité, à droite. Image 10ms, en haut, et 16ms, en bas, après l'allumage

flamme se propage trop rapidement.

De plus, une montée en pression beaucoup trop importante peut être observée sur la figure 5.19. En effet, en comparant la pression mesurée expérimentalement dans la chambre et le plenum avec

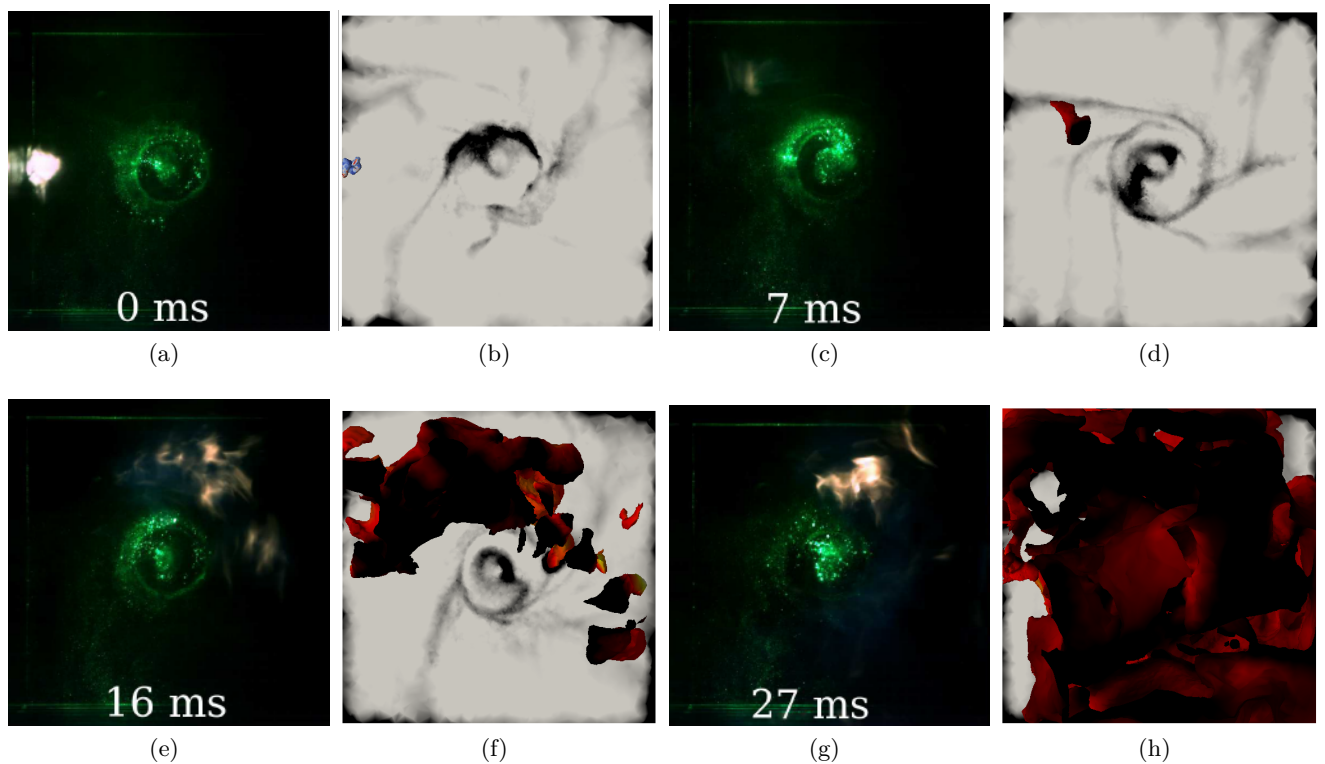


Figure 5.18 : Image d'une tomographie expérimentale [81] et iso-contour de température $T = 1700K$ coloré par la vitesse axiale à différents instants de la simulation avec paroi isotherme

celle obtenue dans la simulation, il est possible de remarquer une montée beaucoup trop rapide et beaucoup trop importante de la pression dans la chambre, mais aussi dans le plenum. De plus, une

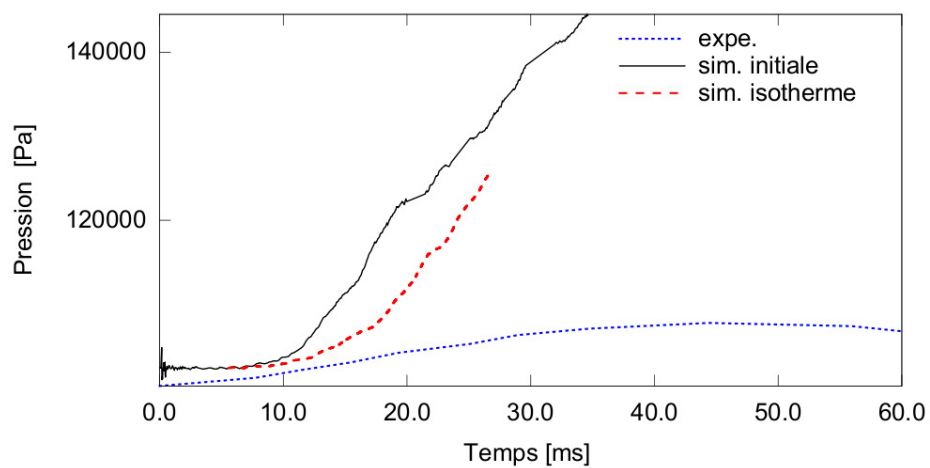


Figure 5.19 : Évolution de la pression dans la chambre au cours du temps pendant un allumage. Données expérimentales de Linassier [81]

légère inversion de l'écoulement entre le plenum et la chambre a été observée pendant quelques instants, ce qui n'était pas le cas dans les données expérimentales.

La différence de vitesse de propagation de la flamme pourrait s'expliquer par plusieurs limites de nos simulations. Les simulations d'allumages sont réalisées sur des champ initiaux où l'injection de carburant a été réalisée pendant un temps plus court que dans les expériences. Dans les simulations, le temps de carburation est compris entre 80 ms et 105 ms tandis que le premier allumage réussi observé expérimentalement se produit après 1.5 s de carburation. Ainsi, la richesse globale dans la chambre est plus faible dans nos simulations, ce qui va induire moins de pertes thermiques dues à l'évaporation de carburant dans les zones riches. Une autre source de pertes thermiques n'est pas reproduite dans les simulations, il s'agit des pertes dues aux échanges thermiques avec les paroi. En effet, un modèle de paroi adiabatique a été utilisé alors qu'il a été observé expérimentalement que les parois se réchauffaient pendant la durée des essais. La modélisation de la combustion turbulente dans le cas d'une flamme partiellement pré-mélangée diphasique est un problème difficile et utiliser des modèles de combustion turbulente plus évolués pourrait être nécessaire. D'autres simulations ont été effectuées sur le cas C1 mais en modifiant certains paramètres afin de déterminer leur influence sur l'allumage. Ainsi, un changement de la condition limite de paroi a permis d'évaluer l'impact de la prise en compte de ces pertes thermiques supplémentaires sur l'allumage. D'autre part, une modification du modèle de combustion turbulente a permis d'évaluer l'impact de ce dernier.

5.4.4 Impact du modèle thermique de paroi et de la fonction d'efficacité du modèle de combustion turbulente

Une simulation a été réalisée avec un modèle de paroi isotherme. La température des parois a été fixée à la température de 293 K correspondant à des parois froides. Ce modèle de paroi isotherme semble être une meilleure approximation du comportement physique observé dans les expérimentations que le modèle de paroi adiabatique. En effet, un transfert thermique conduisant à un échauffement de la paroi a été observé pendant les simulations d'allumage. Dans cette simulation, la propagation du noyau de flamme est plus lente. On suppose que cette propagation plus lente est liée aux pertes de chaleur en paroi. En effet, si une partie de la chaleur produite par la combustion est perdue au niveau des parois, alors une part plus faible de l'énergie sert à chauffer le gaz et les particules, ce qui conduit à une propagation plus lente du front de flamme. La montée en pression est plus lente dans cette simulation, même si elle reste trop importante comparée aux données expérimentales. Aucune inversion de l'écoulement entre le plenum et la chambre n'a été observée. En résumé, le modèle de paroi isotherme reproduit mieux les conditions expérimentales de l'allumage du MERCATO que le modèle de paroi adiabatique.

Une autre simulation s'est intéressée à la fonction d'efficacité du modèle de combustion. La fonction d'efficacité de Colin y a été utilisée à la place de celle de Charlette. Dans cette simulation, la propagation de la flamme est légèrement plus lente que dans la simulation initiale. Cette simulation ayant été réalisée plus tardivement, une analyse plus détaillée n'a pas pu être effectuée.

L'évolution du taux de dégagement de chaleur moyen au cours du temps pour ces différentes simulations est visible sur la figure 5.20. Il est possible de remarquer la propagation plus lente de la flamme dans le cas de la simulation avec des parois isothermes.

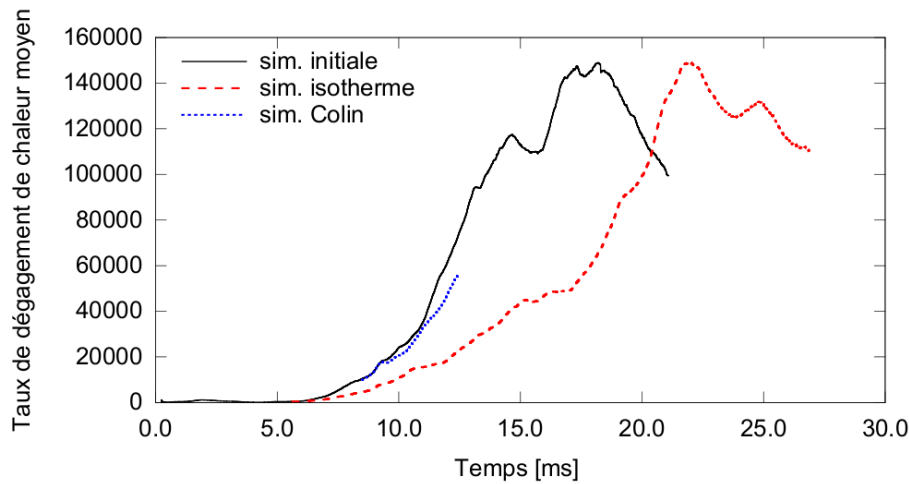


Figure 5.20 : Évolution du taux de dégagement de chaleur moyen au cours du temps pendant un allumage

5.5 Conclusion

Dans ce chapitre, des simulations de l'allumage de l'écoulement de la chambre monosecteur du banc MERCATO ont été effectuées.

Dans un premier temps, les vitesses de flamme laminaire pour un écoulement diphasique d'air et de kérosène ont été évaluées et comparées aux résultats obtenus avec AVBP par Senoner [123] sur un cas unidimensionnel. Les vitesses sont identiques pour un écoulement gazeux. Par contre, l'utilisation de données thermodynamiques différentes pour décrire la phase liquide et le gaz conduit à une différence sur la vitesse de flamme en régime diphasique. Les données utilisées dans CEDRE sont proches des nouvelles représentations thermodynamiques utilisées dans AVBP par Sierra-Sánchez [125] et n'ont par conséquent pas été modifiées.

Dans un deuxième temps, des corrections des termes sources liés à la phase dispersée en présence d'un modèle de combustion turbulente de flamme épaissie ont été implémentées dans CEDRE. Ces corrections ont ensuite été validées sur un cas unidimensionnel de flamme laminaire diphasique. Les corrections ne modifient pas les profils de vitesse et de température du gaz et de la phase dispersée. Les profils de taux de réaction ne sont presque pas modifiés par un épaississement constant mais sont légèrement modifiés par un épaississement dynamique.

Dans un troisième temps, des simulations d'allumage de l'écoulement dans le MERCATO ont été effectuées. Le dépôt d'énergie est réalisé selon la méthode décrite dans la section 2.2. Les premières simulations réalisées ont mené à des allumages ratés. Ensuite, des simulations avec un dépôt d'énergie plus important ont été effectuées. Parmi celles-ci, une simulation a mené à un allumage réussi. La propagation de la flamme se fait principalement via convection par l'écoulement, de manière similaire aux observations expérimentales. Dans une première phase, le noyau de flamme est transporté jusqu'à une zone de faible vitesse où la richesse est proche de la stoechiométrie. Puis, dans une deuxième phase, la flamme se propage à l'ensemble de la chambre à partir de cette zone. La propagation de la

flamme est toujours accélérée par l'écoulement. La flamme possède une structure classique pour une flamme diphasique. Une flamme de diffusion adjacente à une flamme de pré-mélange est visible du côté où les gouttes s'évaporent. De l'autre côté du front de flamme, une flamme de pré-mélange brûlant à une richesse pauvre peut être observée.

La propagation de la flamme est trop rapide comparée aux données expérimentales. De plus, une montée en pression très importante se produit dans la chambre et conduit à une inversion de l'écoulement entre la chambre et le plenum pendant un bref instant. Cette propagation trop rapide pourrait être due à une absence de prise en compte des pertes thermiques en paroi, à la présence de moins de carburant dans la chambre ou à une modélisation simplifiée de la combustion turbulente. Afin de mieux comprendre ces phénomènes, deux autres simulations de l'allumage réussi ont été effectuées. Une simulation réalisée avec des parois isothermes présente une propagation et une montée en pression beaucoup plus lente de la chambre, mais toujours plus rapide que les données expérimentales. Aucune inversion de l'écoulement n'est observée sur cette simulation. Une simulation a été réalisée en utilisant la fonction d'efficacité de Colin 1.105 plutôt que celle de Charlette 1.106. Une propagation légèrement plus lente de la flamme y est observée.

En conclusion, des simulations de l'allumage dans la chambre MERCATO ont été réalisées. Ces simulations ont reproduit qualitativement les phénomènes observés expérimentalement pendant l'allumage de la chambre, mais l'allumage se produit trop rapidement dans les simulations.

Quatrième partie

Conclusions générales

Chapitre 6

Conclusions générales et perspectives

Cette thèse s'inscrit dans le cadre de l'amélioration de la prédiction des performances des chambres de combustion aéronautiques par la simulation numérique. Elle avait plus particulièrement pour objectif d'effectuer des simulations numériques d'une phase d'allumage de l'écoulement diphasique dans une chambre de combustion aéronautique.

Dans la première partie, les principales équations et modèles permettant de décrire un écoulement turbulent diphasique dispersé et réactif ont été brièvement présentées.

Dans la deuxième partie, une présentation du phénomène d'allumage et de différentes méthodes pour le simuler a été effectué. Ensuite, l'implémentation d'une méthode de dépôt d'énergie permettant la simulation simplifiée du phénomène d'allumage dans CEDRE a été effectué. Tout d'abord, un terme source volumique a été ajouté à l'équation d'énergie. Cette approche se base sur les travaux d'Enaux [39] et Lacaze [68]. Ainsi, ce terme source possède une forme gaussienne, à la fois dans l'espace et dans le temps. Des augmentations locales de température très importantes peuvent survenir suite à ce dépôt d'énergie. Pour des raisons de stabilité numérique et de cohérence, les propriétés thermodynamiques tels la capacité thermique à pression constante, l'enthalpie et l'entropie des espèces majoritaires ont été étendues jusqu'à des températures de 20 000 K. La dissociation et les autres réactions chimiques se produisant lors de la formation éventuelle d'un plasma n'ont pas été prises en compte dans cette thèse. De même, les propriétés de transport à très haute température n'ont pas été modifiées. Cette méthode de dépôt d'énergie a ensuite été validée par comparaison avec l'expérience de Renou [112] et avec les simulations numériques réalisées par Enaux [39]. Un très bon accord a été observé au niveau de l'évolution du rayon, de la vitesse et de l'étirement de la flamme au cours du temps, à la fois pour les comparaisons aux données expérimentales et aux résultats d'Enaux. Une limitation fondamentale de ce modèle de dépôt d'énergie est la nécessité d'estimer de façon précise le montant d'énergie transmis par la bougie à l'écoulement afin de simuler la bonne taille initiale du noyau de flamme. Enfin, la méthode de dépôt d'énergie a été testée dans un écoulement diphasique. Ces tests ont permis de confirmer la nécessité d'augmenter de manière importante l'énergie déposée pour compenser l'énergie consommée par l'évaporation des gouttes et obtenir un allumage réussi. De plus, ils ont permis d'observer que l'onde de pression formée au moment du dépôt pouvait chasser les gouttes de faible inertie du volume de gaz chauds et ainsi limiter l'apport de vapeur de carburant à un éventuel noyau de flamme.

Dans la troisième partie, des simulations de l'écoulement dans le MERCATO ont été effectuées.

Tout d'abord, une présentation du banc d'essai MERCATO ainsi que des travaux expérimentaux et numériques antérieurs relatifs à ce banc a été effectuée. Ensuite, une simulation de l'écoulement turbulent gazeux non réactif dans la maquette mono-secteur du banc MERCATO a été réalisée avec le code CEDRE. Un maillage non structuré constitué de tétraèdres a été utilisé. Les profils de vitesses moyens et fluctuants issus de ces simulations étaient en très bon accord avec les données expérimentales de Linassier [81] et les données numériques obtenues par Eyssartier [42] avec le code AVBP, et ce pour les trois composantes de vitesse et l'ensemble des plans de mesures. L'instabilité tourbillonnaire due à l'écoulement swirlé dans le MERCATO a été bien reproduite dans cette simulation. Ainsi, le spectre de pression obtenu est en très bon accord avec les spectres de pression expérimentaux. En particulier, la fréquence de l'instabilité hydrodynamique principale "Precessing Vortex Core" (PVC) a été bien reproduite. Le modèle de lois de paroi standard utilisé dans cette simulation ne tenant pas compte de l'effet du gradient de pression sur le frottement pariétal, la perte de charge survenant dans le tourbillonneur n'a pas pu être correctement reproduite.

Une fois la simulation de l'écoulement gazeux inerte réalisée, une méthode d'injection du spray appelée FIMUR a été implémentée dans CEDRE. Cette méthode injecte des particules directement au niveau de l'orifice de sortie de l'atomiseur, ce dernier étant de type Simplex pour la présente configuration. La vitesse des particules est déterminée à partir de profils supposés pour l'écoulement liquide en sortie d'atomiseur, des spécifications de l'injecteur, de relations géométriques et de corrélations empiriques. Une telle approche est simple à mettre en oeuvre mais elle néglige entièrement l'influence des phénomènes d'atomisation primaire et secondaire sur la dynamique du spray. De ce fait, elle doit aussi s'appuyer sur des données expérimentales ou des corrélations empiriques pour imposer la granulométrie du spray. Dans le cas présent, les données expérimentales ont été mises à profit. La distribution de taille a été approchée par une loi log-normale. Deux paramètres, le diamètre logarithmique moyen et la variance logarithmique moyenne, ont été imposés de sorte à reproduire de façon exacte les diamètres de Sauter d_{32} et le d_{30} de la distribution expérimentale. Chaque particule numérique injectée représente la même masse de liquide, ce qui permet d'avoir une convergence statistique rapide pour les gouttes dont le diamètre est élevé, typiquement de diamètre supérieur au d_{32} . Inversement, la convergence statistique est très lente pour les gouttes de diamètre inférieur. Une approche hybride permettant de varier la masse de liquide associée aux particules numériques en fonction de leur diamètre aurait permis une meilleure convergence statistique sur les gouttes de petits diamètre sans dégrader la convergence statistique des particules de diamètre supérieure au d_{32} , cf. la thèse de Pauilhac [103]. La méthode FIMUR a été implémentée et validée dans CEDRE sur un cas d'injection dans de l'air au repos avec une loi de traînée de Stokes. Ensuite, cette méthode a été utilisée pour l'injection du spray dans une simulation de l'écoulement diphasique non-réactif dans la chambre MERCATO. Un bon accord avec les données expérimentales de Linassier [81] a été observé pour les profils de vitesse particulières moyennés en masse. De même, le profil du diamètre moyen de Sauter est en accord acceptable avec les données expérimentales. Par contre, le profil de diamètre moyen d_{10} n'est pas en accord avec les données expérimentales. De même, le profil de vitesse des gouttes de petit diamètre présente des pics de vitesse plus important que dans les données expérimentales. La répartition de flux volumique simulée est plus resserrée que dans les données expérimentales. Même en activant la prise en compte de la rétroaction des particules sur le champ gaz, la présence de la phase dispersée ne semble que peu modifier la dynamique de la phase porteuse, que ce soit pour les champs moyens ou la fréquence du PVC. Ce constat semble s'accorder aux observations expérimentales.

Après avoir réalisé une simulation de l'écoulement diphasique inerte reproduisant bien l'écoulement

gazeux et le comportement des grandes gouttes, une vérification des vitesses de flamme laminaire pour un écoulement diphasique saturé unidimensionnel a été effectuée en comparant les vitesses de flamme avec les résultats de Senoner [123]. Conformément aux attentes, la vitesse de flamme diminue quand le diamètre des gouttes augmente à richesse totale fixée. Par contre, la vitesse de flamme à richesse effective fixée ne dépend pas de manière significative du diamètre des gouttes. Les temps d'évaporation des particules sont plus longs dans les simulations CEDRE par rapport à AVBP pour des conditions identiques. Ceci pourrait être lié à une représentation des propriétés thermodynamiques et de transport des particules trop simple pour le solveur, avec notamment l'absence de prise en compte de variation de ces quantités en fonction de la température du gaz. Ainsi, les temps d'évaporation particuliers observés par Sierra-Sánchez [125] lors de l'utilisation de propriétés particulières dépendant de la température sont plus longs et nettement plus proches de ceux de CEDRE. Ensuite, une correction du modèle de flamme épaissie a été implémentée dans le code CEDRE pour traiter le régime de combustion diphasique de façon consistante, c'est à dire avec une vitesse de propagation indépendante du facteur d'épaississement. Cette correction a été validée sur le cas d'une flamme laminaire diphasique unidimensionnelle. Les profils de vitesse et de température du gaz et de la phase dispersée ne sont pas modifiés par le modèle de flamme épaissie. Les profils de taux de dégagement de chaleur et de taux d'évaporation ne sont pas changés de manière significative par le modèle de flamme épaissie statique mais ils sont légèrement modifiés par le modèle de flamme épaissie dynamique. Une correction du senseur de flamme pour réduire l'impact du modèle de flamme épaissie pourrait être intéressante. Ensuite, des simulations d'allumage ont été réalisées à partir de simulations inertes de l'écoulement diphasique en utilisant la méthode de dépôt d'énergie décrite dans le chapitre 2. Les premières simulations ont mené à des allumages ratés. Après ces premiers résultats, le dépôt d'énergie a été augmenté afin d'obtenir une simulation d'allumage réussi avec une propagation de la flamme dans l'ensemble de la chambre. Pour cette simulation, une propagation de la flamme en deux phases a été observée. Dans un premier temps, le noyau de flamme est convecté par l'écoulement mais ne se propage quasiment pas. Puis, une fois arrivé dans une zone de faible vitesse où la richesse est proche de la stoechiométrie, le noyau de flamme se propage. Pendant cette deuxième phase, la flamme est de surcroît convectée par l'écoulement. La structure de la flamme diphasique semble se composer d'une flamme de diffusion adjacente à une zone brûlant en pré-mélange du côté du mélange gaz/gouttes frais ainsi que d'une flamme de pré-mélange consommant le reste de carburant côté aval du front de flamme. Une structure de flamme diphasique similaire a été observée dans d'autres simulations telles celles de Guedot [58] ou de Paulhiac [103]. La propagation de la flamme était trop rapide dans cette simulation. De plus, une montée en pression trop importante et trop rapide comparée aux données expérimentales a été observée. Cette propagation trop rapide pourrait être due à une absence de prise en compte des pertes thermiques en paroi, à la présence de moins de carburant dans la chambre ou à une modélisation approximative de la combustion turbulente. Pour tenter d'évaluer l'influence de ces phénomènes de façon qualitative, deux autres simulations ont été effectuées. Dans la première, le modèle de paroi adiabatique a été remplacé par un modèle de paroi isotherme. Cette simulation a produit une propagation de la flamme plus lente mais toujours trop rapide comparée aux données expérimentales. De plus, la montée en pression était plus lente qu'avec un modèle de paroi adiabatique bien que plus importante que dans les données expérimentales. Enfin, une simulation a été effectuée en remplaçant la fonction d'efficacité du modèle de flamme épaissie définie par Charlette [22] par celle formulée par Colin [27]. Dans cette dernière simulation, la propagation de la flamme était très légèrement plus lente que dans la simulation effectuée avec la fonction d'efficacité de Charlette.

Comme cela a été indiqué ci-dessus, des simplifications parfois importantes ont dû être effectuées

pour mener à bien les simulations numériques dans le cadre d'une seule thèse. De plus, la compréhension des phénomènes physiques entrant en jeu demeure encore incomplète. Quelques perspectives de poursuite de ces travaux sont donc évoquées ci-dessous.

Réaliser des simulations prenant en compte le couplage thermique avec les parois pourrait permettre de mieux reproduire la dynamique du noyau pendant les premiers instants de l'allumage d'une chambre de combustion. En effet, les simulations menées dans cette thèse semblent montrer l'importance de la prise en compte des pertes thermiques aux parois dans la phase de convection du noyau par l'écoulement. Pour cela, prendre en compte le film liquide se déposant en paroi pendant la phase de remplissage de la chambre serait probablement important. Une telle prise en compte d'interactions avec un film liquide en paroi pendant une phase d'allumage d'une chambre de combustion ne semble pas avoir été effectuée à la connaissance de l'auteur. Pour ce faire, il faudrait réaliser une simulation diphasique non-réactive prenant en compte le film en paroi. Disposer de données expérimentales sur les caractéristiques du film serait utile afin de valider la modélisation de l'interaction gouttes-parois ainsi que la dynamique du film, mais la mesure expérimentale de hauteurs de films liquides demeure complexe. Dans un deuxième temps, il faudrait valider les interactions entre le film et le front de flamme. Enfin, il faudrait réaliser une simulation d'allumage à partir d'un champ initial issu de simulations diphasiques inertes avec le dépôt de film en paroi. Disposer de données expérimentales supplémentaires dans la chambre de combustion pendant une phase d'allumage, par exemple concernant le dégagement de chaleur serait très important en vue d'une meilleure validation des simulations numériques. Une campagne de mesures expérimentales ayant pour but d'estimer des dégagements de chaleur en régime réactif à l'aide de photomultiplicateurs devrait démarrer l'année prochaine au banc MERCATO.

L'allumage est le plus difficile pour les conditions froides et dépressurisées rencontrées en haute altitude et la capacité d'un moteur à se ré-allumer à haute altitude est un point de conception crucial de sa chambre de combustion en vue de sa certification. Il pourrait donc être intéressant d'étudier l'influence des conditions de haute altitude sur l'écoulement diphasique non-réactif et sur la propagation de la flamme dans la chambre de combustion. Pour ce faire, des simulations de l'écoulement inerte gazeux, puis de l'écoulement diphasique non-réactif seraient effectuées. Ensuite, des simulations d'allumage seraient réalisées afin de comparer à celles réalisées à conditions ambiantes, mais aussi aux données expérimentales disponibles. De telles simulations sont en cours de réalisation par Rouzaud à l'ONERA.

Prendre en compte les réactions de dissociation se produisant pendant la phase de plasma dans les premiers instants de la phase d'allumage permettrait d'évaluer leur impact sur le noyau de gaz chauds et éventuellement justifier certaines approximations dans la modélisation de son évolution. Pour ce faire, des modifications des cinétiques chimiques et des propriétés thermodynamiques à très haute température pour l'ensemble des espèces sont nécessaires tout en s'assurant de conserver les bonnes vitesses de flamme à température ambiante. Ce travail nécessiterait l'utilisation d'une cinétique chimique de type analytique ou tabulée afin de mieux prendre en compte l'ensemble des réactions en jeu. Ces modifications permettraient d'améliorer de manière importante la précision de la simulation des premiers instants suivant le dépôt d'énergie dans un allumage. Des travaux en ce sens sont actuellement en cours de réalisation par Collin-Bastiani au CERFACS.

Étudier les capacités de simulation du plasma produit par la bougie à partir des caractéristiques du circuit électrique pourrait permettre une estimation précise de l'énergie effectivement transmise à l'écoulement. De tels travaux ont été effectués à l'ONERA avec des plasmas de plus faible énergie dans de l'air pur [74] pour des problématiques de contrôle actif d'écoulement par des jets synthétiques de type

plasma. Dans ces travaux, le couplage entre un module prédisant le chauffage du gaz par effet Joule lors du claquage et un solveur Navier-Stokes a été effectué. Pour le solveur Navier-Stokes, les phénomènes de dissociation / ionisation étaient modélisés via la tabulation des propriétés thermo-physiques pour une espèce unique "air pur" en se basant sur les données de D'Angola [35]. Ces travaux ont ensuite permis de simuler la phase d'éjection d'un jet généré par du plasma dans une cavité. La comparaison avec des campagnes de mesure expérimentales a pu montrer que la dynamique de ce jet était très bien reproduite dans les simulations numériques. On peut donc se poser la question de la pertinence de la poursuite de ces travaux en y ajoutant un volet thermique. Dans ce cas, le noyau de gaz chauds créé par le dépôt d'énergie dans un écoulement d'air pur serait réintroduit dans le champ diphasique turbulent de la chambre de combustion une fois que la phase de plasma n'est plus présente. On pourrait imaginer imposer une composition chimique à l'équilibre thermodynamique dans chaque maille de calcul. Ce noyau de gaz chaud pourrait ensuite se propager dans la chambre dans une simulation diphasique réactive classique. Des mesures expérimentales de l'énergie effectivement transmise à l'écoulement par un système de type bougie aéronautique serait très intéressantes afin de compléter et valider cette démarche, même si elles sont délicates à mettre en œuvre. Un tel couplage pourrait également être utilisé pour réaliser des cartographies d'allumage à partir de simulation inerte. La simulation de la phase de plasma permet de fournir une taille précise de noyau de flamme en entrée d'un modèle évaluant la probabilité d'allumage en évaluant différents critères pouvant provoquer l'extinction du noyau de flamme. Par exemple, ce modèle pourrait être couplé avec ceux développés par Eyssartier et al. [43] et Neophytou et al. [98].

Enfin, l'utilisation d'un modèle d'atomisation permettrait une nette amélioration de la prédiction de la dynamique du spray. En effet, le modèle FIMUR ne permet pas d'estimer la granulométrie du spray résultant puisque l'atomisation primaire et secondaire n'y sont pas pris en compte. De plus, la répartition spatiale des gouttes étant fortement pilotée par les phénomènes d'atomisation, elle est très probablement mal reproduite par cette approche. Finalement, négliger les phénomènes d'atomisation conduit à sous-estimer la mise à l'équilibre dynamique et thermique des gouttes peu inertielles avec le gaz. Une meilleure prédiction de la répartition spatiale du carburant dans la chambre pourrait s'avérer très importante dans la prédiction de l'allumage ou de la structure de la flamme en régime de combustion établi. Des travaux de modélisation de l'atomisation ont été effectués par Zuzio [141] et sont actuellement poursuivis dans la thèse de Thuillet effectuée à l'ONERA.

Bibliographie

- [1] B. Abramzon and W. A. Sirignano. Droplet vaporisation model for spray combustion calculations. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 9 :1605–1618, 1989. cité p. [34](#), [36](#), [114](#)
- [2] S. Aggarwal. A review of spray ignition phenomena : Present status and future research. *Progress in Energy and Combustion Science*, 24(6) :565–600, 1998. cité p. [63](#), [64](#)
- [3] S. Aggarwal. Single droplet ignition : Theoretical analyses and experimental findings. *Progress in Energy and Combustion Science*, 45(C) :79–107, 2014. cité p. [41](#)
- [4] O. Akindele, D. Bradley, P. Mak, and M. McMahon. Spark ignition of turbulent gases. *Combustion and Flame*, 47(C) :129–155, 1982. cité p. [62](#), [63](#)
- [5] K. Annamalai and W. Ryan. Interactive processes in gasification and combustion. Part I : Liquid drop arrays and clouds. *Progress in Energy and Combustion Science*, 18(3) :221 – 295, 1992. cité p. [43](#), [44](#)
- [6] E. Babinsky and P. Sojka. Modeling drop size distributions. *Progress in Energy and Combustion Science*, 28 :303–329, 2002. cité p. [39](#)
- [7] S. Balachandar and J. K. Eaton. Turbulent dispersed multiphase flow. *Annual Review of Fluid Mechanics*, 42 :111–133, 2010. cité p. [38](#)
- [8] D. Ballal. Ignition and flame quenching of quiescent dust clouds of solid fuels. *Proceedings of The Royal Society of London, Series A : Mathematical and Physical Sciences*, 369(1739) :479–500, 1980. cité p. [64](#)
- [9] D. R. Ballal and A. H. Lefebvre. Ignition and flame quenching of quiescent fuel mists. *Proceedings of the Royal Society of London. Series A*, 364 :277–294, 1978. cité p. [64](#)
- [10] D. R. Ballal and A. H. Lefebvre. A general model of spark ignition for gaseous and liquid fuel-air mixtures. In T. C. Institute, editor, *Eighteenth Symposium (International) on Combustion*, pages 1737–1747, 1981. cité p. [63](#)
- [11] D. Barré. *Numerical simulation of ignition in aeronautical combustion chambers*. Thèse, Université de Toulouse, France, 2014. cité p. [2](#)

- [12] D. Barré, L. Esclapez, M. Cordier, E. Riber, B. Cuenot, G. Staffelbach, B. Renou, A. Vandell, L. Y. Gicquel, and G. Cabot. Flame propagation in aeronautical swirled multi-burners : Experimental and numerical investigation. *Combustion and Flame*, 161(9) :2387–2405, 2014. cité p. [1](#)
- [13] A. B. Basset. *Treatise on Hydrodynamics*, volume 2. Deighton Bell, London, 1888. cité p. [31](#)
- [14] M. Boileau. *Simulation aux grandes échelles de l’allumage diphasique des foyers aéronautiques*. Phd thesis, INP Toulouse, 2007. cité p. [1](#), [2](#)
- [15] M. Boivin, O. Simonin, and K. D. Squires. Direct numerical simulation of turbulence modulation by particles in isotropic turbulence. *Journal of Fluid Mechanics*, 375 :235–263, 1998. cité p. [38](#)
- [16] K. Bosschaart and L. de Goey. The laminar burning velocity of flames propagating in mixtures of hydrocarbons and air measured with the heat flux method. *Combustion and Flame*, (136) :261–269, 2004. cité p. [72](#)
- [17] J. Boussinesq. *Théorie Analytique de la Chaleur*, volume 2. Ecole Polytechnique, Paris, 1903. cité p. [31](#)
- [18] D. Bradley and F.-K. Lung. Spark ignition and the early stages of turbulent flame propagation. *Combustion and Flame*, 69(1) :71–93, 1987. cité p. [62](#)
- [19] A. Bruyat. *Influence de l’évaporation de gouttes multicomposant sur la combustion et des effets diphasiques sur l’allumage d’un foyer aéronautique*. Thèse, Université de Toulouse, France, 2012. cité p. [3](#), [40](#), [63](#), [87](#), [88](#), [90](#)
- [20] S. Candel, F. Lacas, N. Darabiha, and C. Rolon. Group combustion in spray flames. *Multiphase Science and Technology*, 11(1) :1–18, 1999. cité p. [43](#)
- [21] M. Castela, B. Fiorina, A. Coussement, O. Gicquel, N. Darabiha, and C. O. Laux. Modelling the impact of non-equilibrium discharges on reactive mixtures for simulations of plasma-assisted ignition in turbulent flows. *Combustion and Flame*, 166 :133–147, 2016. cité p. [62](#)
- [22] F. Charlette, D. Veynante, and C. Meneveau. A power-law wrinkling model for LES of premixed turbulent combustion. Part I - non-dynamic formulation and initial tests. *Combustion and Flame*, 131 :159–180, 2002. cité p. [27](#), [151](#)
- [23] P. Chassaing. *Turbulence en mécanique des fluides, analyse du phénomène en vue de sa modélisation à l’usage de l’ingénieur*. Cépaduès-éditions, Toulouse, France, 2000. cité p. [21](#)
- [24] J. H. Chen, A. Choudhary, B. De Supinski, M. DeVries, E. R. Hawkes, S. Klasky, W.-K. Liao, K.-L. Ma, J. Mellor-Crummey, N. Podhorszki, et al. Terascale direct numerical simulations of turbulent combustion using S3D. *Computational Science & Discovery*, 2(1) :015001, 2009. cité p. [18](#)
- [25] C. Chevalier and F. Pellegrini. PT-Scotch : A tool for efficient parallel graph ordering. *Parallel computing*, 34(6) :318–331, 2008. cité p. [91](#)
- [26] N. Chigier. Group combustion models and laser diagnostic methods in sprays : a review. *Combustion and Flame*, 51 :127–139, 1983. cité p. [45](#)

-
- [27] O. Colin, F. Ducros, D. Veynante, and T. Poinso. A thickened flame model for large eddy simulations of turbulent premixed combustion. *Physics of Fluids*, 12(7) :1843–1863, 2000. cité p. [25](#), [26](#), [27](#), [151](#)
- [28] O. Colin and K. Truffin. A spark ignition model for large eddy simulation based on an FSD transport equation (ISSIM-LES). *Proceedings of the Combustion Institute*, 33(2) :3097–3104, 2011. cité p. [1](#), [65](#)
- [29] M. Cordier, A. Vandell, G. Cabot, B. Renou, and A. Boukhalfa. Laser-induced spark ignition of premixed confined swirled flames. *Combustion Science and Technology*, 185(3) :379–407, 2013. cité p. [1](#)
- [30] J. Cousteix. *Turbulence et couche limite*. Cépaduès-éditions, 1989. cité p. [21](#)
- [31] R. Dahms, M. Drake, T. Fansler, T.-W. Kuo, and N. Peters. Understanding ignition processes in spray-guided gasoline engines using high-speed imaging and the extended spark-ignition model SparkCIMM. Part A : Spark channel processes and the turbulent flame front propagation. *Combustion and Flame*, 158(11) :2229–2244, 2011. cité p. [65](#)
- [32] R. Dahms, M. Drake, T. Fansler, T.-W. Kuo, and N. Peters. Understanding ignition processes in spray-guided gasoline engines using high-speed imaging and the extended spark-ignition model SparkCIMM. Part B : Importance of molecular fuel properties in early flame front propagation. *Combustion and Flame*, 158(11) :2245–2260, 2011. cité p. [65](#)
- [33] R. B. Dakhli, V. Giovangigli, and D. Rosner. Soret effects in laminar counterflow spray diffusion flames. *Combustion Theory and Modelling*, 6(1) :1–18, 2002. cité p. [10](#)
- [34] J. Dale, M. Checkel, and P. Smy. Application of high energy ignition systems to engines. *Progress in Energy and Combustion Science*, 23(5-6) :379–398, 1997. cité p. [60](#)
- [35] A. D’Angola, G. Colonna, C. Gorse, and M. Capitelli. Thermodynamic and transport properties in equilibrium air plasmas in a wide pressure and temperature range. *European Physical Journal D*, 46(1) :129–150, 2008. cité p. [68](#), [70](#), [153](#)
- [36] J. M. Duclos and O. Colin. Arc and kernel tracking ignition model for 3D spark ignition engine calculations. In *Fifth Int. Symp. on Diagnostics, Modelling of Combustion in Internal Combustion Engines (COMODIA)*, pages 343–350, Nagoya, Japan, 2001. cité p. [65](#)
- [37] J. M. Duclos, D. Veynante, and T. Poinso. A comparison of flamelet models for premixed turbulent combustion. *Combustion and Flame*, 95 :101–117, 1993. cité p. [25](#)
- [38] G. Dufour. *Modélisation multi-fluide eulérienne pour les écoulements diphasiques à inclusions dispersées*. Thèse, Université de Toulouse, France, 2005. cité p. [29](#), [30](#)
- [39] B. Enaux. *Simulation aux Grandes Echelles d’un moteur à allumage commandé - Evaluations des variabilités cycliques*. Thèse, Université de Toulouse, France, 2010. cité p. [1](#), [4](#), [59](#), [66](#), [71](#), [73](#), [75](#), [77](#), [79](#), [80](#), [82](#), [149](#)
- [40] A. Ern and V. Giovangigli. Impact of detailed multicomponent transport on planar and counter-flow hydrogen/air and methane/air flames. *Combustion Science and Technology*, 149(1-6) :157–181, 1999. cité p. [10](#)
-

- [41] A. Eucken. Über das wärmeleitvermögen, die spezifische wärme und die innere reibung der gase. *Phys. Z*, 14 :324–332, 1913. cité p. [71](#)
- [42] A. Eyssartier. *Study and modelisation of stationnary and transient two-phase flow combustion*. Thèse, INP Toulouse. France, 2012. cité p. [2](#), [3](#), [87](#), [88](#), [91](#), [93](#), [95](#), [96](#), [97](#), [98](#), [101](#), [115](#), [116](#), [123](#), [150](#)
- [43] A. Eyssartier, B. Cuenot, L. Y. Gicquel, and T. Poinso. Using LES to predict ignition sequences and ignition probability of turbulent two-phase flames. *Combustion and Flame*, 160(7) :1191–1207, 2013. cité p. [3](#), [153](#)
- [44] A. Felden, L. Esclapez, A. Misdariis, E. Riber, H. Wang, B. Cuenot, and C. CERFACS. Including real fuel chemistry in large-eddy simulations. In *EUCASS, Milan, Italy*, 2017. cité p. [28](#)
- [45] B. Fiorina, O. Gicquel, L. Vervisch, S. Carpentier, and N. Darabiha. Approximating the chemical structure of partially-premixed and diffusion counter-flow flames using FPI flamelet tabulation. *Combustion and Flame*, 140 :147–160, 2005. cité p. [28](#)
- [46] B. Fiorina, R. Vicquelin, P. Auzillon, N. Darabiha, O. Gicquel, and D. Veynante. A filtered tabulated chemistry model for LES of premixed combustion. *Combustion and Flame*, 157(3) :465–475, 2010. cité p. [28](#)
- [47] B. Franzelli. *Impact of the chemical description on Direct Numerical Simulations and Large Eddy Simulations of turbulent combustion in industrial aero-engines*. Thèse, Université de Toulouse, France, 2011. cité p. [25](#), [28](#)
- [48] B. Franzelli, E. Riber, M. Sanjosé, and P. Poinso. A two-step chemical scheme for Large-Eddy Simulation of kerosene-air flames. *Combustion and Flame*, 157(7) :1364–1373, 2010. cité p. [4](#), [28](#), [81](#), [126](#), [127](#)
- [49] J. Fritz, M. Kroner, and T. Sattelmayer. Flashback in a swirl burner with cylindrical premixing zone. *Transactions of the ASME-A-Engineering for Gas Turbines and Power*, 126(2) :276–283, 2004. cité p. [23](#), [24](#)
- [50] D. Galley. *Etude de la stabilisation de flammes turbulentes prévaporisées prémélangées pauvres*. PhD thesis, 2006. cité p. [96](#)
- [51] N. García Rosa. *Phénomènes d’allumage d’un foyer de turbomachine en conditions de haute altitude*. Thèse, Université de Toulouse, France, 2008. cité p. [55](#), [56](#), [65](#), [87](#), [88](#), [90](#)
- [52] P. Garcia-Ybarra, C. Nicoli, and P. Clavin. Soret and dilution effects on premixed flames. *Combustion Science and Technology*, 42(1-2) :87–109, 1984. cité p. [13](#)
- [53] R. Gatignol. The Faxén formulas for a rigid particle in an unsteady non-uniform stokes-flow. *Journal de Mécanique théorique et appliquée*, 2(2) :143–160, 1983. cité p. [31](#)
- [54] G. C. Gebel, T. Mosbach, W. Meier, and M. Aigner. Optical and spectroscopic diagnostics of laser-induced air breakdown and kerosene spray ignition. *Combustion and Flame*, 162(4) :1599–1613, 2015. cité p. [62](#)

-
- [55] O. Gicquel, D. Thevenin, M. Hilka, and N. Darabiha. Direct numerical simulation of turbulent premixed flames using intrinsic low-dimensional manifolds. *Combustion Theory and Modelling*, 3(3) :479–502, 1999. cité p. [28](#)
- [56] D. G. Goodwin. Cantera c++ user’s guide. *California Institute of Technology*, 2002. cité p. [127](#)
- [57] J. B. Greenberg, I. Silverman, and Y. Tambour. On droplet enhancement of the burning velocity of laminar premixed spray flames. *Combustion and Flame(Short communication)*, 113 :271–273, 1998. cité p. [63](#)
- [58] L. Guedot. *Développement de méthodes numériques pour la caractérisation des grandes structures tourbillonnaires dans les brûleurs aéronautiques : application aux systèmes d’injection multi-points*. Thèse, Rouen, INSA, 2015. cité p. [2](#), [87](#), [88](#), [91](#), [98](#), [104](#), [139](#), [151](#)
- [59] F. Haider. *Discrétisation en maillage non structuré général et applications LES*. Thèse, Université Pierre et Marie Curie-Paris VI, 2009. cité p. [49](#)
- [60] F. Haider, P. Brenner, B. Courbet, and J.-P. Croisille. Efficient implementation of high order reconstruction in finite volume methods. In *Finite Volumes for Complex Applications VI Problems & Perspectives*, pages 553–560. Springer, 2011. cité p. [49](#)
- [61] F. Halter, T. Tahtouh, and C. Mounaïm-Rousselle. Nonlinear effects of stretch on the flame front propagation. *Combustion and Flame*, 157(10) :1825–1832, 2010. cité p. [72](#)
- [62] G. Hannebique. *Étude de la structure des flammes diphasiques dans les brûleurs aéronautiques*. Thèse, Université de Toulouse, France, 2013. cité p. [2](#), [87](#)
- [63] J. O. Hirschfelder, C. F. Curtiss, and R. B. Bird. *Molecular theory of gases and liquids*. John Wiley & Sons, New York, 1969. cité p. [10](#)
- [64] G. L. Hubbard, V. E. Denny, and A. F. Mills. Droplet evaporation effects of transient and variable properties. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 18 :1003–1008, 1975. cité p. [33](#)
- [65] N. Jaouen, L. Vervisch, P. Domingo, and G. Ribert. Automatic reduction and optimisation of chemistry for turbulent combustion modelling : Impact of the canonical problem. *Combustion and Flame*, 175(Supplement C) :60 – 79, 2017. cité p. [28](#)
- [66] A. N. Kolmogorov. The local structure of turbulence in incompressible viscous fluid for very large reynolds numbers. *Comptes rendus de l’Académie des sciences, USSR*, 30 :301, 1941. cité p. [16](#)
- [67] K. K. Kuo. Principles of combustion. cité p. [8](#), [45](#)
- [68] G. Lacaze. *Simulation aux grandes échelles de l’allumage de moteurs fusées cryotechnique*. Thèse, Institut National Polytechnique de Toulouse, France, 2009. cité p. [149](#)
- [69] G. Lacaze, B. Cuenot, T. J. Poinso, and M. Oswald. Large eddy simulation of laser ignition and compressible reacting flow in a rocket-like configuration. *Combustion and Flame*, 156(6) :116–1180, 2009. cité p. [66](#), [77](#)
-

- [70] G. Lacaze, E. Richardson, and T. Poinso. Large eddy simulation of spark ignition in a turbulent methane jet. *Combustion and Flame*, 156(10) :1993 – 2009, 2009. cité p. [73](#)
- [71] N. Lamarque. *Schémas numériques et conditions limites pour la simulation aux grandes échelles de la combustion diphasique dans les foyers d'hélicoptère*. Phd thesis, INP Toulouse, 2007. cité p. [87](#)
- [72] N. Lamarque and T. Poinso. Boundary conditions for acoustic eigenmodes computation in gas turbine combustion chambers. *AIAA Journal*, 46(9) :2282–2292, 2008. cité p. [88](#), [90](#)
- [73] A. Lang, R. Lecourt, and F. Giuliani. Statistical evaluation of ignition phenomena in turbojet engines. In *ASME Turbo Expo 2010 : Power for Land, Sea, and Air*, pages 985–992. American Society of Mechanical Engineers, 2010. cité p. [90](#), [136](#)
- [74] F. Laurendeau. *Analyse expérimentale et modélisation numérique d'un actionneur plasma de type jet synthétique*. Thèse, Université de Toulouse, France, 2016. cité p. [82](#), [152](#)
- [75] C. Laurent. *Développement et validation de modèles d'évaporation multi-composant*. Thèse, Université de Toulouse, France, 2008. cité p. [32](#), [33](#)
- [76] C. Law, D. Zhu, and G. Yu. Propagation and extinction of stretched premixed flames. In *Symposium (International) on Combustion*, volume 21, pages 1419–1426. Elsevier, 1988. cité p. [72](#)
- [77] C. K. Law. *Combustion physics*. Cambridge university press, 2010. cité p. [27](#)
- [78] R. Lecourt. TIMECOP-AE WP2 D2.2.1a - Ignition and extinction results at ambient conditions. Technical report, ONERA, Fauga, France. cité p. [87](#), [88](#)
- [79] R. Lecourt. Unsteady air flow features of the timecop set-up in mercato test bench. Technical report, ONERA, Fauga, France. cité p. [88](#), [90](#)
- [80] T. Lederlin. *Conception et étude expérimentale et numérique d'un système de contrôle de trajectoire et mélange des jets de gaz dans les brûleurs à oxygène*. Thèse, Institut National Polytechnique de Toulouse, 2007. cité p. [87](#)
- [81] G. Linassier. *Étude expérimentale et numérique de l'allumage des turboréacteurs en conditions de haute altitude*. Thèse, Université de Toulouse, France, 2012. cité p. [1](#), [2](#), [65](#), [87](#), [88](#), [89](#), [90](#), [93](#), [95](#), [96](#), [97](#), [98](#), [101](#), [110](#), [115](#), [120](#), [122](#), [123](#), [133](#), [137](#), [141](#), [144](#), [150](#)
- [82] W. Lowry, J. de Vries, M. Krejci, E. Petersen, Z. Serinyel, W. Metcalfe, H. Curran, and G. Bourque. Laminar flame speed measurements and modeling of pure alkanes and alkane blends at elevated pressures. *Journal of Engineering for Gas Turbines and Power*, 133(9) :091501, 2011. cité p. [72](#)
- [83] J. Luche, M. Reuillon, J.-C. Boettner, and M. Cathonnet. Reduction of large detailed kinetic mechanisms - application to kerosene / air combustion. *Combustion Science and Technology*, 176 :1935–1963, 2004. cité p. [126](#), [127](#)
- [84] E. Machover and E. Mastorakos. Spark ignition of annular non-premixed combustors. *Experimental Thermal and Fluid Science*, 73 :64–70, 2016. cité p. [1](#)

-
- [85] R. Maly and M. Vogel. Initiation and propagation of flame fronts in lean ch4-air mixtures by the three modes of the ignition spark. In *17th International Symposium on Combustion*, pages 821–831. The Combustion Institute, Pittsburgh, 1978. cité p. [61](#)
- [86] M. Massot and P. Villedieu. Modélisation multi-fluide eulérienne pour la simulation de brouillards denses polydispersés. *Comptes rendus de l'Académie des sciences Problèmes mathématiques de la mécanique*, 332(9) :869–874, 2001. cité p. [30](#)
- [87] E. Mastorakos. Forced ignition of turbulent spray flames. *Proceedings of the Combustion Institute*, 36(2) :2367–2383, 2017. cité p. [62](#), [63](#)
- [88] M. Maxey and B. Patel. Localized force representations for particles sedimenting in stokes flow. *International Journal of Multiphase Flow*, 27(9) :1603–1626, 2001. cité p. [37](#)
- [89] M. Maxey and J. Riley. Equation of motion for a small rigid sphere in a nonuniform flow. *Physics of Fluids*, 26(4), 1983. cité p. [31](#)
- [90] B. J. McBride, M. J. Zehe, and S. Gordon. NASA Glenn coefficients for calculating thermodynamic properties of individual species. 2002. cité p. [67](#), [68](#)
- [91] M. Metghalchi and J. C. Keck. Laminar burning velocity of propane-air mixtures at high temperature and pressure. *Combustion and Flame*, 38 :143–154, 1980. cité p. [66](#), [72](#)
- [92] K. Miki, J. Schulz, and S. Menon. Large-eddy simulation of equilibrium plasma-assisted combustion in supersonic flow. *Proceedings Of The Combustion Institute*, 32(2) :2413–2420, 2009. cité p. [62](#)
- [93] V. Moureau, P. Domingo, and L. Vervisch. From large-eddy simulation to direct numerical simulation of a lean premixed swirl flame : Filtered laminar flame-pdf modeling. *Combustion and Flame*, 158(7) :1340–1357, 2011. cité p. [18](#)
- [94] A. Mura, V. Robin, and M. Champion. Modeling of scalar dissipation in partially premixed turbulent flames. *Combustion and Flame*, 149(1) :217–224, 2007. cité p. [25](#)
- [95] A. Neophytou. *Spark ignition and flame propagation in sprays*. Thèse, Cambridge University, 2010. cité p. [62](#), [126](#)
- [96] A. Neophytou, B. Cuenot, and P. Duchaine. Large-eddy simulation of ignition and flame propagation in a trisector combustor. *Journal of Propulsion and Power*, 2015. cité p. [139](#)
- [97] A. Neophytou and E. Mastorakos. Simulations of laminar flame propagation in droplet mists. *Combustion and Flame*, 156(8) :1627–1640, 2009. cité p. [1](#), [2](#)
- [98] A. Neophytou, E. Mastorakos, and R. S. Cant. The internal structure of igniting turbulent sprays as revealed by complex chemistry DNS. *Combustion and Flame*, 159(2) :641–664, 2012. cité p. [64](#), [153](#)
- [99] A. Obukhov. On the distribution of energy in the spectrum of turbulent flow. In *Dokl. Akad. Nauk SSSR*, volume 32, pages 22–24, 1941. cité p. [16](#)
- [100] ONERA. Manuel théorique de la chaine CEDRE. Technical report, ONERA, 2012. cité p. [48](#)
-

- [101] C. W. Oseen. Über die Stokes'sche Formel und über eine verwandte Aufgabe in der Hydrodynamik. , 6(29), 1910. cité p. 31
- [102] N. Ouarti. *Modélisation de l'allumage d'un brouillard de carburant dans un foyer de turbomachine*. Thèse, Université de Toulouse , France, 2004. cité p. 65, 87
- [103] D. Paulhiac. *Modélisation de la combustion d'un spray dans un bruleur aéronautique*. Thèse, Université de Toulouse, 2014. cité p. 2, 17, 41, 108, 109, 110, 111, 112, 139, 150, 151
- [104] N. Peters. The turbulent burning velocity for large-scale and small-scale turbulence. *Journal of Fluid Mechanics*, 384 :107 – 132, 1999. cité p. 65
- [105] N. Peters. *Turbulent combustion*. Cambridge University Press, 2001. cité p. 25
- [106] N. Peters and B. Rogg. *Reduced kinetic mechanisms for applications in combustion systems*, volume 15. Springer Science & Business Media, 2008. cité p. 28, 29
- [107] T. Poinso and D. Veynante. *Theoretical and Numerical Combustion*. R.T. Edwards, 2001. cité p. 8, 18, 19, 22, 23, 72
- [108] S. B. Pope. *Turbulent flows*. Cambridge University Press, 2000. cité p. 17, 18, 21
- [109] V. Quintilla. *Etude du Rallumage à Haute Altitude des Chambres de Combustion de Turbo-réacteurs*. Phd thesis, Ecole Nationale Supérieure de l'Aéronautique et de l'Espace, 2002. cité p. 87
- [110] W. E. Ranz and W. R. Marshall. Evaporation from drops. *Chem. Eng. Prog.*, 48(4) :173, 1952. cité p. 36
- [111] B. Renou and A. Boukhalfa. An experimental study of freely propagating premixed flames at various Lewis numbers. *Combustion science and technology*, 162(1) :347–370, 2001. cité p. 4, 59, 75, 77, 79, 80, 82
- [112] B. Renou, A. Mura, E. Samson, and A. Boukhalfa. Characterization of the local flame structure and the flame surface density for freely-propagating premixed flames at various lewis numbers. *Combustion Science and Technology*, 174(4) :143–179, 2002. cité p. 149
- [113] J. Réveillon and L. Vervisch. Analysis of weakly turbulent diluted-spray flames and spray combustion regimes. *Journal of Fluid Mechanics*, 537 :317–347, 2005. cité p. 43, 45, 46, 47
- [114] S. Richard, O. Colin, O. Vermorel, A. Benkenida, C. Angelberger, and D. Veynante. Towards large eddy simulation of combustion in spark ignition engines. *Proceedings of the Combustion Institute*, 31(3059-3066), 2007. cité p. 65
- [115] N. Rizk and A. Lefebvre. Internal flow characteristics of simplex atomizer. *Journal of Propulsion and Power*, 1(3) :193–199, May-June 1985. cité p. 104
- [116] P. L. Roe. Approximate riemann solvers, parameter vectors and difference schemes. *Journal of Computational Physics*, 43 :357–372, 1981. cité p. 49, 75, 92
- [117] P. Saffmann. On the settling speed of free and fixed suspensions. *Studies in Applied Mathematics*, 52(2), 1973. cité p. 37

-
- [118] M. Sanjosé. *Evaluation de la méthode Euler-Euler pour la simulation aux grandes échelles des chambres à carburant liquide*. Thèse, Institut National Polytechnique de Toulouse, 2009. cité p. [2](#), [87](#), [88](#), [90](#)
- [119] M. Sanjosé, J.-M. Senoner, F. Jaegle, B. Cuenot, S. Moreau, and T. Poinot. Fuel injection model for Euler–Euler and Euler–Lagrange large-eddy simulations of an evaporating spray inside an aeronautical combustor. *International Journal of Multiphase Flow*, 37(5) :514–529, 2011. cité p. [104](#)
- [120] J. Savre. *Simulation numérique instationnaire de la combustion turbulente au sein de foyers aéronautiques et prédiction des émissions polluantes*. Thèse, INSA de Rouen, 2010. cité p. [24](#)
- [121] L. Schiller and A. Nauman. A drag coefficient correlation. *VDI Zeitung*, 77 :318–320, 1935. cité p. [32](#), [114](#)
- [122] T. G. Scholte and P. Vaags. The burning velocity of hydrogen-air mixtures and mixtures of some hydrocarbons with air. *Combustion and Flame*, 3 :495–501, 1959. cité p. [66](#)
- [123] J.-M. Senoner. *Simulations aux grandes échelles de l'écoulement diphasique dans un brûleur aéronautique par une approche Euler-Lagrange*. Thèse, Université de Toulouse, 2010. cité p. [87](#), [88](#), [90](#), [128](#), [146](#), [151](#)
- [124] J.-M. Senoner, M. Sanjosé, T. Lederlin, F. Jaegle, M. García, E. Riber, B. Cuenot, L. Gicquel, H. Pitsch, and T. Poinot. Eulerian and Lagrangian Large-Eddy Simulations of an evaporating two-phase flow. *Comptes rendus-Mécanique*, 337(6-7) :458–468, 2009. cité p. [40](#)
- [125] P. Sierra Sánchez. *Modeling the dispersion and evaporation of sprays in aeronautical combustion chambers*. PhD thesis, 2012. cité p. [87](#), [88](#), [90](#), [129](#), [146](#), [151](#)
- [126] I. Silverman, J. B. Greenberg, and Y. Tambour. Stoichiometry and polydispersity effects in premixed spray flames. *Combustion and Flame*, 93 :97–118, 1993. cité p. [40](#)
- [127] J. Smagorinsky. General circulation experiments with the primitive equations 1. The basic experiment. *Monthly Weather Review*, 91 :99–164, 1963. cité p. [20](#), [91](#), [92](#)
- [128] A. H. Squillacote, J. Ahrens, C. Law, B. Geveci, K. Moreland, and B. King. *The paraview guide*, volume 672. Kitware, 2006. cité p. [74](#)
- [129] N. Syred. A review of oscillation mechanisms and the role of the precessing vortex core in swirl combustion systems. *Progress in Energy and Combustion Science*, 32(2) :93–161, 2006. cité p. [99](#)
- [130] M. Thiele, S. Selle, U. Riedel, J. Warnatz, and U. Maas. Numerical simulation of spark ignition including ionization. *International Symposium on Combustion*, 28(1) :1177–1185, 2000. cité p. [64](#)
- [131] L. Thobois. *Intérêt et faisabilité de la simulation aux grandes échelles dans les moteurs automobiles*. Phd thesis, INP Toulouse, 2006. cité p. [66](#)
-

- [132] A. Umemura and S. Takamori. Percolation theory for flame propagation in non- or less-volatile fuel spray : A conceptual analysis to group combustion excitation mechanism. *Combustion and Flame*, 141(4) :336 – 349, 2005. cité p. [42](#), [43](#)
- [133] B. Van Leer. Towards the ultimate conservative difference scheme. II. Monotonicity and conservation combined in a second-order scheme. *Journal of computational physics*, 14(4) :361–370, 1974. cité p. [49](#)
- [134] B. Van Leer. Towards the ultimate conservative difference scheme IV. A new approach to numerical convection. *Journal of Computational Physics*, 23 :276–299, 1977. cité p. [91](#)
- [135] B. Van Leer. Towards the ultimate conservative difference scheme. V. A second-order sequel to Godunov’s method. *Journal of Computational Physics*, 32(1) :101–136, 1979. cité p. [49](#)
- [136] D. Veynante and V. Moureau. Analysis of dynamic models for large eddy simulations of turbulent premixed combustion. *Combustion and Flame*, 162(12) :4622 – 4642, 2015. cité p. [27](#)
- [137] D. Veynante and L. Vervisch. Turbulent combustion modeling. *Progress in Energy and Combustion Science*, 28 :193 – 266, 2002. cité p. [18](#), [24](#)
- [138] R. Vicquelin. *Tabulated chemistry for turbulent combustion modeling and simulation*. Thèse, Ecole Centrale Paris, June 2010. cité p. [28](#)
- [139] A. Vié. *Prise en compte des mécanismes d’atomisation secondaire dans la simulation aux grandes échelles* . Thèse, Université de Toulouse, MEGeP, Institut Français du Pétrole, 2010. cité p. [87](#), [88](#), [90](#)
- [140] F. A. Williams. *Combustion Theory*. Benjamin Cummings, Menlo Park, CA, 1985. cité p. [8](#), [9](#), [13](#), [25](#), [29](#), [39](#), [68](#), [71](#)
- [141] D. Zuzio, J.-L. Estivalèzes, and B. DiPierro. An improved multiscale eulerian–lagrangian method for simulation of atomization process. *Computers & Fluids*, 2016. cité p. [104](#), [153](#)
- [142] D. Zuzio, J.-L. Estivalezes, P. Villedieu, and G. Blanchard. Numerical simulation of primary and secondary atomization. *Comptes Rendus Mécanique*, 341(1) :15–25, 2013. cité p. [104](#)

Simulation numérique de l'écoulement d'un mélange air et phase dispersée pour l'allumage d'une chambre de combustion aéronautique via un formalisme Euler Lagrange

Pour garantir la capacité des moteurs aéronautiques à s'allumer même dans des conditions de haute altitude, de coûteux essais sont aujourd'hui nécessaires. Disposer d'outils de simulation numérique capables de prédire précisément les performances d'allumage d'une chambre de combustion pourrait permettre de limiter le recours aux essais et d'accélérer la phase de conception d'une chambre de combustion.

L'objectif de cette thèse est de contribuer au développement et à la validation d'outils numériques permettant la Simulation aux Grandes Echelles (SGS) de l'allumage d'un écoulement turbulent diphasique dans une chambre de combustion.

Pour ce faire, une méthode de dépôt d'énergie modélisant l'apport d'énergie lié au claquage de la bougie d'allumage a été implémentée dans le code CEDRE. Cette méthode a été validée sur une simulation de l'allumage d'un écoulement laminaire purement gazeux d'air et de propane. Ensuite, une SGS de l'écoulement d'air dans la maquette mono-secteur du banc MERCATO a été effectué à l'aide du solveur Navier-Stokes CHARME de la chaîne de calcul CEDRE. Cette simulation reproduit fidèlement l'écoulement turbulent non-réactif dans la chambre de combustion, comme l'attestent les comparaisons avec les données expérimentales pour les champs de vitesse moyens et fluctuants.

Une méthode d'injection simplifiée appelée FIMUR a ensuite été implémentée dans le solveur lagrangien SPARTE de la chaîne de calcul CEDRE afin de permettre la simulation de l'écoulement turbulent diphasique dispersé non réactif de la même configuration. Dans cette méthode, des gouttes sont injectées directement au nez de l'injecteur avec une distribution de vitesse fonction de corrélations expérimentales basées sur des données géométriques et une distribution de taille issue des données expérimentales. Une SGS de l'écoulement diphasique non-réactif dans la chambre MERCATO a ensuite été réalisée avec cette méthode. La comparaison des champs particuliers moyens de vitesse et de taille obtenus par simulation numérique avec les données expérimentales est satisfaisante.

Enfin, des SGS de l'allumage de la chambre MERCATO ont été effectuées à partir du champ diphasique non-réactif simulé et de la méthode de dépôt d'énergie développée. Selon l'instant du dépôt d'énergie, les simulations conduisent à des allumages réussis ou ratés. La propagation de la flamme dans la chambre pour un allumage réussi a fait l'objet d'une analyse détaillée pour tenter de déterminer les principaux facteurs l'influençant.

Mots clefs : simulation numérique, écoulement diphasique, combustion, allumage, spray, Euler-Lagrange

Numerical simulation of an air flow with a dispersed phase for the ignition of an aeronautical combustion chamber with an Euler Lagrange method

Today, numerous experimental tests are required to ensure the ignition capability of aeronautical engines in the whole operating domain. Numerical tools able to correctly predict the ignition performance of a combustion chamber could limit the use of experimental tests and accelerate the design of new combustion chambers. The goal of this thesis is to contribute to the development and validation of numerical tools for the Large Eddy Simulation (LES) of the ignition of a turbulent multiphase flow in a combustion chamber.

An energy deposition method that models the energy supplied by the spark plug to the flow was implemented in the CEDRE code. This method was validated on a simulation of the ignition of a purely gaseous laminar propane-air flow.

Then, a LES of the non-reacting gas flow in the monosector combustor MERCATO was performed with the Navier-Stokes solver CHARME of the CEDRE code. The comparison of mean and fluctuating velocity fields between simulations and experiments demonstrates that the main flow field features are well reproduced. In order to simulate the non-reacting dispersed two-phase flow of the same configuration, a simplified injection method called FIMUR was implemented in the Lagrangian solver SPARTE of the CEDRE code. In this method, droplets are injected directly at the tip of the injector with velocities deduced from experimental correlations while the size distribution is directly obtained from experimental data. The comparison of the mean droplet velocity and diameter fields in the vicinity of the injector between simulations and experiments appears satisfactory.

Finally, LES's of the ignition of the MERCATO were performed using the non-reacting two-phase flow simulations and the aforementioned energy deposition method. Depending on the instant of energy deposition, the simulations lead to successful or failed ignitions. The flame propagation in a successful ignition was analysed in order to attempt to determine the physical phenomena at play and to better understand them.

Keywords: numerical simulation, multiphase flow, combustion, ignition, spray, Euler-Lagrange