



Université  
de Toulouse

# THÈSE

En vue de l'obtention du

## DOCTORAT DE L'UNIVERSITÉ DE TOULOUSE

Délivré par :

Institut Supérieur de l'Aéronautique et de l'Espace (ISAE)

---

**Présentée et soutenue par :**

**Anne BRUYAT**

**le** lundi 17 décembre 2012

**Titre :**

Influence de l'évaporation de gouttes multicomposant sur la combustion  
et des effets diphasiques sur l'allumage d'un foyer aéronautique

---

**École doctorale et discipline ou spécialité :**

ED MEGeP : Energétique et transferts

**Unité de recherche :**

Équipe d'accueil ISAE-ONERA EDyF

**Directeur(s) de Thèse :**

M. Gérard LAVERGNE (directeur de thèse)

M. Nicolas BERTIER (co-directeur de thèse)

**Jury :**

Gérard LAVERGNE, Professeur à l'ISAE - Directeur de thèse

Nicolas BERTIER, Ingénieur de recherche à l'ONERA - Co-directeur de thèse

Chawki HABCHI, Ingénieur de recherche à l'IFPEN - Rapporteur

Julien REVEILLON, Professeur à l'Université de Rouen - Rapporteur

Günter BRENN, Professeur à l'Université de Technologie de Graz - Examineur

Amsini SADIKI, Professeur à l'Université de Darmstadt - Examineur

Anthony ROUX, Ingénieur à Turbomeca - Examineur

Olivier ROUZAUD, Ingénieur de recherche à l'ONERA - Encadrant



# Remerciements

Je remercie tout d'abord le trio qui m'a suivie et aidée au cours de ces trois années : Gérard Lavergne l'infatigable à qui je souhaite une belle retraite, Claire Laurent, encadrante 5 étoiles dont j'ai été la première doctorante avec joie, et Olivier Rouzaud (ça s'écrit mal, mais je fais le salut avec les deux mains). Un grand merci également à Nicolas Bertier, toujours disponible quand je l'appelle. Merci également à ceux qui m'ont aidée à un moment ou à un autre : Francis Dupoirieux, Philippe Villedieu, Renaud Lecourt, Jean-Mathieu Senoner et Nicolas Garcia-Rosa. Un grand merci à Guillaume Linassier qui a toujours répondu à mes nombreuses questions.

Je tiens à remercier Pierre Millan et Pierre Gajan pour m'avoir accueillie au DMAE-MH.

Merci également à la DGA qui s'est montrée intéressée par ce travail et a financé cette thèse.

Je souhaite remercier les membres du jury de la thèse : Chawki Habchi, Julien Réveillon, Günter Brenn, Anthony Roux et Amsini Sadiki.

Merci également à de nombreuses personnes travaillant à l'ONERA et en particulier : Corinne, Valérie, Jean-Luc Estivalezes, Bertrand Aupoix, Christian Pelissier, Pierre Berthoumieu, Alain Strzelecki, Simone Pauzin, Marie-Louise Moretto, Francis Micheli... Merci également à Monique Peron et Claude Doriac, ainsi qu'à Xavier Carbonneau.

J'ai également une pensée pour ceux qui ont partagé mon bureau : Nechtan et sa bonne humeur communicative, Alicia qui est un mec trop cool et Gianluca, maah lui aussi il est un peu cool (quand il mange avec nous).

Merci à tous les doctorants, post-doctorants et stagiaires qui m'ont accueillie et que j'ai accueillis. J'espère en oublier le moins possible : merci à Géraldine qui était La seule jusqu'à ce qu'on soit... deux, à Vital comme la carte, au Professeur Corre, à Pierre, Nico, Nico, Madjid, au Docteur Galoul, Bernhard, Virginel, Davide (hey, t'as vu ma carte de cantine ?), Loïc, Jegan, Jorge-Cesar Brändle De Motta, Germain (à deux mains!), Hélène, Julien, Julien, Olivier, Jean-Yves, Farid, David, Javier, Arthur, Valentin, Ghislain, Baptiste, Bertrand, Nathalie, Craqui et Riki, Jean-Michel, Henri, Samuel, Lokman, Maxime, Rémi... Un spécial big up aux grrrls de la crew pour les soirées bière-foot : Najatt qui est un mec aussi cool qu'Alicia, Ysolde la respo-chocolat et Violaine avec qui j'ai beaucoup papo-thé.

Merci également aux amis toulousains : Roro et Chrichri, Vivi et Dorian, Gros-Cheveux et Frolic qui portent la lumière. J'ajouterai également les toulousains expatriés : Luc, Jordan et Laurène. Merci aux jeunes qui sont à présent vieux, mais toujours aussi gitans : David, Enguerran, Josselyn, Hugo, Claire, James, Martin, Samuel. Merci aux plombiers et associés : Romain, Alice et Jipé pour le support, et merci aussi à Delph', 20100, Bibi, Doudou, Cha, Chou, Batman, CiPi, PDJDC, HS. Merci aux zozos de Grenoble, toujours là pour une raclette de nouvel an : Marion, Sophie, Rosie, Benoit, Jonathan, Renaud,

Thibaud et Philippe.

Merci à la belle-famille, à la famille et surtout à Gégé et Chéchèle.

Un très grand merci à Vincent grâce à qui je me lève tous les matins, og som er en riktig eventyrer. Fram!

# Table des matières

<b>Introduction générale</b>	<b>13</b>
<b>I Modélisation des écoulements turbulents diphasiques réactifs</b>	<b>17</b>
<b>1 Présentation des équations et modèles</b>	<b>19</b>
1.1 Présentation de CEDRE . . . . .	19
1.2 Écoulement gazeux compressible . . . . .	20
1.2.1 Équations de conservation . . . . .	20
1.2.2 Lois d'état et relations de comportement . . . . .	21
1.2.3 Modélisation de la turbulence . . . . .	23
1.2.4 Loi de paroi . . . . .	27
1.2.5 Modélisation de la combustion . . . . .	29
1.2.6 Méthodes numériques . . . . .	32
1.3 Modèles physiques pour le kérosène . . . . .	33
1.3.1 Modélisation du kérosène par une pseudo-espèce . . . . .	33
1.3.2 Description du mécanisme réactionnel PEA . . . . .	34
1.4 Écoulement phase dispersée . . . . .	35
1.4.1 Efforts sur les particules . . . . .	36
1.4.2 Évaporation de la goutte . . . . .	36
1.4.3 Chauffage . . . . .	37
1.4.4 Couplage avec la phase gazeuse . . . . .	38
1.4.5 Modèles physiques pour les conditions aux limites . . . . .	39
<b>II Simulation numérique de la propagation d'une flamme plane diphasique laminaire monodimensionnelle</b>	<b>41</b>
<b>2 Etat de l'art : Flammes diphasiques laminares</b>	<b>45</b>
2.1 Introduction . . . . .	45
2.1.1 Présentation des flammes diphasiques laminares . . . . .	45
2.1.2 Structure de la flamme . . . . .	46
2.2 Combustion de gouttes monocomposant . . . . .	47
2.2.1 Travaux expérimentaux . . . . .	47
2.2.2 Travaux théoriques et numériques . . . . .	49
2.3 Effets du caractère multicomposant du carburant . . . . .	51
2.3.1 Effets sur la vitesse de flamme monophasique . . . . .	51
2.3.2 Effets sur le délai d'auto-allumage diphasique . . . . .	53

2.4	Evaluation des modèles utilisés . . . . .	55
2.4.1	Modèles de diffusion dans les gouttes . . . . .	55
2.4.2	Cinétique chimique simplifiée . . . . .	57
2.5	Conclusion . . . . .	58
<b>3</b>	<b>Flammes diphasiques laminaires monocomposant</b>	<b>61</b>
3.1	Introduction et définitions . . . . .	61
3.1.1	Richesses du mélange . . . . .	61
3.1.2	Vitesse de flamme . . . . .	64
3.1.3	Epaisseurs caractéristiques . . . . .	64
3.2	Mise en place du calcul . . . . .	65
3.2.1	Domaine de calcul . . . . .	65
3.2.2	Configuration de l'écoulement . . . . .	65
3.2.3	Conditions de saturation . . . . .	66
3.2.4	Modèles physiques . . . . .	66
3.2.5	Etudes numériques . . . . .	66
3.3	Étude paramétrique . . . . .	67
3.3.1	Profils de la flamme . . . . .	67
3.3.2	Évolution de la vitesse de flamme . . . . .	72
3.3.3	Évolution de la richesse effective . . . . .	76
3.4	Conclusion . . . . .	76
<b>4</b>	<b>Flammes diphasiques laminaires multicomposant</b>	<b>79</b>
4.1	Définitions . . . . .	79
4.1.1	Richesses du mélange . . . . .	80
4.1.2	Vitesse de flamme . . . . .	80
4.2	Cinétique chimique réduite multicomposant . . . . .	81
4.2.1	Remarque sur l'utilisation d'une cinétique simplifiée . . . . .	82
4.2.2	Cinétique multicomposant d'Aggarwal . . . . .	82
4.2.3	Cinétique multicomposant à réactions découplées . . . . .	84
4.2.4	Apports et limites des cinétiques chimiques simplifiées multicomposant . . . . .	87
4.3	Mise en place du calcul . . . . .	87
4.3.1	Choix des composants . . . . .	88
4.3.2	Conditions initiales . . . . .	89
4.4	Comparaison des cinétiques chimiques multicomposant . . . . .	90
4.5	Caractérisation des effets de l'évaporation multicomposant des gouttes sur la propagation des flammes . . . . .	91
4.5.1	Profils de la flamme en fonction de la composition . . . . .	91
4.5.2	Évolution de la vitesse de flamme . . . . .	94
4.5.3	Epaisseurs caractéristiques . . . . .	96
4.5.4	Composition des gaz chauds en régime riche . . . . .	97
4.6	Conclusion, discussion et perspectives . . . . .	100
<b>III</b>	<b>Simulation numérique instationnaire de l'allumage d'une chambre de combustion.</b>	<b>103</b>
<b>5</b>	<b>Etat de l'art : allumage et combustion diphasique</b>	<b>107</b>
5.1	Allumage par dépôt d'énergie . . . . .	107

5.1.1	Allumage par bougie électrique . . . . .	108
5.1.2	Sensibilité à l'énergie minimum d'allumage . . . . .	110
5.1.3	Contribution de l'aspect diphasique . . . . .	113
5.2	Modélisation du noyau d'allumage . . . . .	114
5.2.1	Laminar Ignition-Coherent Flamelet Model (LI-CFM) . . . . .	115
5.2.2	Couplage des équations de Navier-Stokes aux équations de Maxwell . . . . .	116
5.2.3	Discrete Particle Ignition Model (DPIK) . . . . .	116
5.2.4	Arc and Kernel Tracking Ignition Model (AKTIM), AKTImeuler, ISSIM-LES . . . . .	117
5.2.5	Modèle SparkCIMM . . . . .	118
5.3	Travaux ONERA : Modèle de noyau d'allumage . . . . .	119
5.3.1	Hypothèses pour la phase gazeuse . . . . .	120
5.3.2	Hypothèses pour la phase liquide . . . . .	121
5.3.3	Mise en équation . . . . .	122
5.3.4	Domaine de calcul, conditions initiales et aux limites . . . . .	122
5.3.5	Détermination de l'état initial du noyau . . . . .	123
5.3.6	Validation . . . . .	125
5.4	Modélisation de la probabilité d'allumage et de la propagation de la flamme . . . . .	125
5.4.1	Caractère probabiliste de l'allumage . . . . .	125
5.4.2	Prédiction d'allumage à partir d'un champ moyen . . . . .	126
5.4.3	Prédiction de l'allumage à partir de champs instantanés . . . . .	129
5.4.4	Cartographie de l'allumage : modèle ONERA . . . . .	130
5.5	Conclusion . . . . .	133
<b>6</b>	<b>Etat de l'art : combustion diphasique</b> . . . . .	<b>135</b>
6.1	Couplages des phénomènes physiques dans la combustion diphasique turbulente . . . . .	135
6.1.1	Interaction turbulence-spray . . . . .	135
6.1.2	Interaction spray-combustion . . . . .	136
6.1.3	Interaction combustion-turbulence . . . . .	136
6.2	Structures des flammes diphasiques turbulentes . . . . .	136
6.3	Diagrammes pour la combustion diphasique . . . . .	139
6.3.1	Enveloppe des états . . . . .	139
6.3.2	Diagramme richesse-température . . . . .	139
<b>7</b>	<b>Présentation du banc MERCATO</b> . . . . .	<b>141</b>
7.1	Présentation du banc MERCATO . . . . .	141
7.1.1	Introduction . . . . .	141
7.1.2	Description du dispositif expérimental . . . . .	142
7.2	Conditions opératoires et campagnes de mesures . . . . .	144
7.2.1	Champs de vitesse et granulométrie . . . . .	145
7.2.2	Visualisation directe de l'écoulement . . . . .	146
7.2.3	Essais d'allumage . . . . .	147
7.3	Simulations numériques de l'écoulement dans le MERCATO . . . . .	149
7.3.1	Simulations de l'écoulement non-réactif : méthodologie pour l'injection du carburant . . . . .	149
7.3.2	Simulations de l'allumage et de l'écoulement réactif . . . . .	154
7.4	Conclusion . . . . .	154

<b>8</b>	<b>Simulation aérodiphasique instationnaire du MERCATO</b>	<b>159</b>
8.1	Mise en place et validation du calcul de l'écoulement diphasique . . . . .	160
8.1.1	Stratégie du calcul . . . . .	160
8.1.2	Mise en place du calcul . . . . .	160
8.1.3	Couplage des solveurs phase gazeuse-phase dispersée . . . . .	165
8.2	Modélisation de l'injection . . . . .	165
8.2.1	Décalage du plan d'injection . . . . .	166
8.2.2	Traitement des données brutes . . . . .	166
8.2.3	Discretisation spatiale et temporelle de l'injection . . . . .	167
8.3	Simulation numérique de l'écoulement aérodiphasique . . . . .	167
8.3.1	Analyse de l'écoulement moyen . . . . .	167
8.3.2	Analyse de l'écoulement instationnaire . . . . .	180
8.4	Cartographie d'allumage . . . . .	184
8.4.1	Choix des paramètres . . . . .	186
8.4.2	Résultats . . . . .	186
8.5	Conclusion . . . . .	190
<b>9</b>	<b>Simulation numérique instationnaire de l'allumage du MERCATO</b>	<b>193</b>
9.1	Modèles physiques et numériques . . . . .	194
9.2	Conditions initiales . . . . .	194
9.2.1	Dépôt d'énergie . . . . .	194
9.2.2	Solution diphasique instantanée . . . . .	194
9.3	Allumage . . . . .	196
9.3.1	Champs de température . . . . .	196
9.3.2	Champs de richesse, taux de réaction . . . . .	196
9.3.3	Champs de vitesse . . . . .	196
9.3.4	Diagramme richesse effective - température . . . . .	199
9.3.5	Evolution de la pression et des débits . . . . .	201
9.4	Etude numérique de l'allumage . . . . .	203
9.4.1	Stratégie d'investigation . . . . .	204
9.4.2	Cas 2 : Pas de temps . . . . .	206
9.4.3	Cas 3 : Conditions limites de sortie . . . . .	206
9.4.4	Cas 4 et 5 : Modèle de combustion . . . . .	206
9.4.5	Cas 6 : Evaporation des gouttes . . . . .	209
9.5	Etude du comportement de l'allumage . . . . .	210
9.5.1	Allumage à la bougie $z = 116$ mm . . . . .	211
9.6	Conclusion . . . . .	214
	<b>Conclusion et perspectives</b>	<b>217</b>



# Nomenclature

## Symboles latins

Symbole	Description	Unités
$A$	Constante pré-exponentielle	$(mol.m^{-3})^{(1-\sum_i n_i)}.s^{-1}.K^{-\beta}$
$a_k$	Coefficients des polynômes, format NASA	$T^{-k}$
$c$	Vitesse du son	[m/(s)]
$c_p$	Capacité thermique massique à pression constante	[J/(kgK)]
$c_v$	Capacité thermique massique à volume constant	[J/(kgK)]
$C_d$	Coefficient de traînée	[-]
$C$	Concentration	[mol/m <sup>3</sup> ]
$d_{10}$	Diamètre moyen arithmétique	[m]
$d_{32}$	Diamètre moyen de Sauter (DMS)	[m]
$D$	Diffusivité	[m <sup>2</sup> /s]
$e_t$	Energie totale	[J]
$E_a$	Énergie d'activation	[J]
$f$	Fréquence	[s <sup>-1</sup> ]
$F, E$	Facteurs d'épaississement et d'efficacité	
$\mathbf{I}$	Matrice identité	[-]
$\mathbf{J}$	Matrice Jacobienne	[-]
$h$	Enthalpie massique	[J/kg]
$k$	Énergie cinétique turbulente	[m <sup>2</sup> /s <sup>2</sup> ]
$\mathcal{K}_r$	Vitesse de réaction	
$L_{ev}$	Chaleur latente d'évaporation	[J/kg]
$l$	Echelle intégrale de la turbulence	[m]
$\dot{m}$	Flux massique	[kg.m <sup>-3</sup> .s <sup>-1</sup> ]
$p$	Pression	[N/m <sup>2</sup> ]
$\mathbf{q}$	Flux de chaleur	[J/s/m <sup>2</sup> ]
$Q$	Débit massique	[kg/s]
$r_p(d_p)$	Rayon (diamètre) d'une goutte	[m]
$\mathcal{R}$	Constante universelle des gaz parfaits	[J/(mol K)]
$s_L$	Vitesse de flamme laminaire	[m/s]
$s_T$	Vitesse de flamme turbulente	[m/s]
$\mathbf{S}$	Partie symétrique du tenseur de gradients de vitesse	[m/s]
$t$	temps	[s]
$T$	Température	[K]
$T_{eb}$	Température d'ébullition	[K]
$T_{nb}$	Température normale d'ébullition	[K]

$\bar{U}$	Vitesse moyenne	[m/s]
$u'$	Vitesse fluctuante	[m/s]
$\mathbf{V}$	Vecteur vitesse	[m/s]
$WR$	Débit réduit	[-]
$\mathcal{M}$	Masse Molaire	[kg/mol]
$X$	Fraction molaire	[-]
$Y$	Fraction massique d'un atome ou d'une espèce	[-]
$Z$	Fraction de mélange	[-]
$\mathcal{Z}$	Coefficient de compressibilité pour l'air	[-]

## Symboles grecs

Symbole	Description	Unités
$\alpha$	Diffusivité thermique	[m <sup>2</sup> .s <sup>-1</sup> ]
$\alpha_l$	Fraction volumique liquide	[-]
$\Delta h_f^0$	Enthalpie de formation	[J/kg]
$\eta_k$	Echelle de Kolmogorov	[m]
$\lambda$	Conductivité thermique	[J/(mKs)]
$\mu$	Viscosité dynamique	[kg/(ms)]
$\nu$	Viscosité cinématique	[m <sup>2</sup> /s]
$\nu', \nu''$	Coefficients stœchiométrique directs et indirects	[-]
$\dot{\omega}$	Taux d'avancement d'une réaction chimique	[kg.m <sup>-3</sup> .s <sup>-1</sup> ]
$\mathbf{\Omega}$	Partie antisymétrique du tenseur de gradients de vitesse	[m/s]
$\Phi$	Richesse	[-]
$\rho$	Masse volumique	[kg/m <sup>3</sup> ]
$\sigma_l, \sigma_p$	Tension de surface	[N/m]
$\tau$	Temps caractéristique	[s]
$\boldsymbol{\tau}$	Tenseur de contraintes	

## Nombres sans dimension

Symbole	Description
$B_M$	Nombre de Spalding massique
$B_T$	Nombre de Spalding thermique
$CFL$	Nombre de Courant-Friedrich-Lewy
$Da$	Nombre de Damköhler
$K$	Nombre de Mundo
$Ka$	Nombre de Karlovitz
$Le$	Nombre de Lewis
$Nu$	Nombre de Nusselt
$Nu^*$	Nombre de Nusselt modifié
$Oh$	Nombre d'Ohnesorge
$Pe$	Nombre de Péclet
$Pr$	Nombre de Prandtl
$Re$	Nombre de Reynolds
$S$	Nombre de swirl

$St$	Nombre de Stokes
$Sc$	Nombre de Schmidt
$Sh$	Nombre de Sherwood
$Sh^*$	Nombre de Sherwood modifié
$We$	Nombre de Weber

## Indices

Symbole	Description
0	Total (Liquide + Gaz)
$\infty$	Relatif à l'infini
$b$	Relatif aux gaz chaud (burnt)
$F$	Relatif au carburant (Fuel)
$g$	Relatif au gaz
$ign$	Relatif à l'allumage (ign)
$i, j$ ou $k$	Relatif à l'espèce $i, j$ ou $k$
$l$	Relatif à la phase liquide
$lam$	Laminar component
$Ox$	Relatif à l'oxydant
$p$	Relatif à une particule
$q$	Relatif à l'extinction (quenching)
$RMS$	Relatif aux grandeurs fluctuantes (Root Mean Square)
$st$	Relatif à la stœchiométrie
$t$	Relatif à la turbulence
$u$	Relatif aux gaz frais (unburnt)

## Exposants

### Indice

Symbole	Description
$ini$	Relatif à l'instant initial
$sat$	Relatif à la saturation
$\beta$	Exposant de la température pour une réaction chimique

## Autres notations

Symbole	Description
$\bar{\cdot}$	Opérateur de moyenne ou de filtrage
$\tilde{\cdot}$	Opérateur de moyenne ou de filtrage de Favre
$\cdot'$	Fluctuations
$\cdot''$	Fluctuations au sens de Favre

## Abréviations

Acronymes	Description
CEDRE	Calcul d'Écoulements Diphasiques et Réactifs pour l'Energétique
DNS	Direct Numerical Simulation
LDA	Laser Doppler Anemometry
LES	Large-Eddy Simulation
MERCATO	Moyen d'Étude et de Recherche en Combustion Aérobique par Techniques Optiques
PDI	Phase Doppler Interferometry
PEA	Pré-Exponentielle Ajustée
PIV	Particle Imaging Velocimetry
PVC	Precessing Vortex Core
RANS	Reynolds Averaged Navier-Stokes
RMS	Root Mean Square
TIMECOP	Towards Innovative Methods for Combustion Prediction in aeroengines

# Introduction générale

## Contexte

En raison de la raréfaction des énergies fossiles et pour réduire, d'une part, la dépendance énergétique et, d'autre part, l'impact environnemental du trafic aérien, l'Union Européenne met en place de nouvelles normes visant à assurer le développement durable de l'industrie aéronautique. Elle espère ainsi, par exemple, que les énergies renouvelables représenteront 10% des ressources énergétiques dans les transports à l'horizon 2020. Les motoristes doivent alors développer de nouveaux systèmes propulsifs. Les turbomachines doivent être optimisées en terme d'encombrement, de pollution liée aux émissions sonores et de consommation du carburant. Enfin, les performances (rendement de combustion, taux de compression) doivent être maximisées.

La conception de nouveaux prototypes de moteurs demande en particulier de respecter des normes de sécurité concernant les performances en combustion stabilisée ou bien l'allumage à froid et le ré-allumage en conditions critiques. Par exemple, un hélicoptère doit pouvoir redémarrer après une mission de secours en haute montagne. Dans un autre cas, le moteur peut s'éteindre en cours de vol si une ingestion d'eau se produit. A haute altitude, la pression atmosphérique peut descendre à 0,5 bar et la température de l'air peut atteindre  $-40^{\circ}\text{C}$ . Dans ces conditions, la pulvérisation de carburant se dégrade et le taux d'évaporation des gouttes diminue, ce qui augmente la quantité d'énergie nécessaire à l'allumage. L'allumage d'une chambre de combustion est un phénomène transitoire dont l'étude est onéreuse lorsque sont réalisées des campagnes d'essais expérimentaux. Les industriels cherchent donc à disposer de modèles fiables assurant la prévision des performances d'allumage, avec des temps de restitution suffisamment courts pour être utilisés en phase de conception. Des méthodes numériques ont plus particulièrement été développées pour simuler l'influence des caractéristiques d'un brouillard de gouttes sur l'écoulement.

Afin d'améliorer la prédictivité des modèles, ceux-ci doivent prendre en compte le caractère multicomposant du carburant. En effet, le kérosène actuellement utilisé dans l'aviation et les carburants alternatifs progressivement introduits dans les réacteurs actuels sont des carburants multicomposant, mélange de plusieurs centaines d'espèces chimiques avec des volatilités différentes. Jusqu'à présent la composition du kérosène était représentée, dans les codes de calcul, par un seul composant de type pseudocomposant ou composant réel (n-décane, par exemple). Les carburants alternatifs actuellement étudiés présentent une composition intégrant de nouvelles espèces chimiques, parfois très différentes des espèces du Jet-A1 en terme de volatilité et de réactivité. Tant pour le kérosène que pour les carburants alternatifs se pose la question de la représentation multicomposant des gouttes dans les codes de calcul. En effet, dans certains cas l'évaporation peut présenter des temps caractéristiques importants et le taux d'évaporation pilote alors la dynamique des autres phénomènes physiques, tels que la combustion ou le mélange des espèces en phase gazeuse.

## Objectifs de la thèse

L'objectif de cette thèse est d'étudier l'influence de l'évaporation d'un brouillard de gouttes sur un écoulement réactif. Pour cela, une étude académique de la propagation d'une flamme laminaire 1D est réalisée. Un train continu de gouttes monodisperse est injecté, les gouttes étant mono ou bicomposant. Ensuite, l'effet de l'évaporation est étudié en phase d'allumage pour un brouillard de gouttes polydisperses monocomposant à l'aide d'un modèle de noyau d'allumage local. Des données expérimentales étant disponibles pour un secteur de chambre industriel (MERCATO), l'écoulement instationnaire non-réactif est calculé avec une approche LES. Cette simulation, associée au modèle d'allumage, est utilisée pour réaliser une carte de probabilité d'allumage et valider l'approche. Enfin, des essais de calcul d'allumage complet de la chambre sont réalisés.

Ces travaux ont été réalisés au sein de l'unité Multiphasique Hétérogène, dans le Département Modèles pour l'Aérodynamique et l'Energétique (DMAE) de l'ONERA, en collaboration avec le Département Energétique Fondamentale et Appliquée (DEFA). Ce travail est la rencontre de deux lignées de thèses s'intéressant, d'une part, à l'évaporation multicomposant et, d'autre part, à l'allumage des écoulements diphasiques en conditions critiques.

L'évaporation multicomposant a tout d'abord été étudiée par Doué [40], qui a développé un code de recherche pour la simulation de l'évaporation multicomposant à l'aide d'un modèle à composants discrets (DCM) et d'un modèle à thermodynamique continue (CTM). Laurent [71] a ensuite étendu l'approche CTM à une modélisation par quadrature des moments (QMoM). Le modèle DCM, introduit dans le code multiphasique CEDRE (*Calcul d'Écoulements Diphasiques Réactifs pour l'Energétique*) par Rouzaud [102], a enfin été utilisé par Bodoc [15] pour la simulation numérique instationnaire de l'évaporation d'un brouillard de gouttes multicomposant.

L'allumage des chambres de combustion est une thématique issue d'une collaboration étroite de l'ONERA avec les motoristes. Au cours des thèses successives de Quintilla [97], Ouarti [92], Garcia-Rosa [48] et Linassier [79], une importante base de données expérimentales a été constituée. L'écoulement non-réactif, l'allumage et l'écoulement réactif dans une chambre de combustion mono-secteur ont été caractérisés au banc d'essai MERCATO par Lecourt [74] [73]. Un modèle numérique de noyau d'allumage, 0D puis 1D, couplé au code de simulation CEDRE, a été développé pour modéliser l'allumage local d'un brouillard de gouttes. Ce modèle a fourni un champ initial pour la simulation numérique de l'allumage de la chambre de combustion mono-secteur.

## Organisation du mémoire

La présentation de ce travail de thèse est organisée en trois parties. La première partie est consacrée à la présentation des équations générales et modèles présents dans le code CEDRE pour la modélisation des écoulements diphasiques réactifs.

Dans la seconde partie, un état de l'art est réalisé sur les flammes planes 1D diphasiques pour des gouttes monocomposant, ainsi que sur les configurations académiques caractérisées pour le multicomposant. Une étude paramétrique de la propagation d'une flamme plane au travers de gouttes monocomposant est ensuite réalisée pour valider l'approche adoptée par rapport à la littérature. Enfin, l'influence de l'évaporation multicomposant sur la flamme est étudiée en faisant varier la composition des gouttes.

La dernière partie s'intéresse à l'allumage des chambres de combustion pour des

gouttes monocomposant. Un état de l'art de l'allumage, du point de vue expérimental et pour les modèles d'allumage, est tout d'abord mené. La notion de probabilité d'allumage est introduite dans le but de définir les positions les plus favorables au dépôt d'énergie. Le banc d'essai MERCATO, permettant la caractérisation expérimentale de l'allumage dans des conditions atmosphériques ou critiques, est présenté, ainsi que la banque de données disponible et les simulations numériques déjà réalisées. Le code multiphysique CEDRE est par la suite employé pour simuler par une approche LES l'écoulement diphasique non-réactif instationnaire au sein de la chambre mono-secteur. Les interactions des gouttes avec l'écoulement porteur sont mises en évidence et une carte de probabilité d'allumage est réalisée. Enfin, une série d'essais de l'allumage du foyer aéronautique est réalisée par des simulations numériques instationnaires.





## Première partie

# Modélisation des écoulements turbulents diphasiques réactifs



# Chapitre 1

## Présentation des équations et modèles

### Sommaire

---

<b>1.1</b>	<b>Présentation de CEDRE</b>	<b>19</b>
<b>1.2</b>	<b>Écoulement gazeux compressible</b>	<b>20</b>
1.2.1	Équations de conservation	20
1.2.2	Lois d'état et relations de comportement	21
1.2.3	Modélisation de la turbulence	23
1.2.4	Loi de paroi	27
1.2.5	Modélisation de la combustion	29
1.2.6	Méthodes numériques	32
<b>1.3</b>	<b>Modèles physiques pour le kérosène</b>	<b>33</b>
1.3.1	Modélisation du kérosène par une pseudo-espèce	33
1.3.2	Description du mécanisme réactionnel PEA	34
<b>1.4</b>	<b>Écoulement phase dispersée</b>	<b>35</b>
1.4.1	Efforts sur les particules	36
1.4.2	Évaporation de la goutte	36
1.4.3	Chauffage	37
1.4.4	Couplage avec la phase gazeuse	38
1.4.5	Modèles physiques pour les conditions aux limites	39

---

### 1.1 Présentation de CEDRE

Le code CEDRE (Calcul d'Écoulements Diphasiques Réactifs pour l'Energétique) est un environnement logiciel pour la simulation d'écoulements multiphysiques internes, développé à l'ONERA. Le logiciel est structuré en plusieurs solveurs, chacun étant dédié à des problématiques spécifiques : écoulement monophasique, diphasique, thermique, etc. La figure 1.1 présente un diagramme des interactions entre solveurs.

Dans cette étude, le solveur pour la phase gazeuse CHARME a été couplé au solveur lagrangien pour la phase dispersée SPARTE. Cette partie a pour vocation de présenter les équations générales, les modèles et les méthodes numériques au sein de ces solveurs. Les modèles retenus seront précisés avant chaque calcul réalisé dans les chapitre 3 et 8.

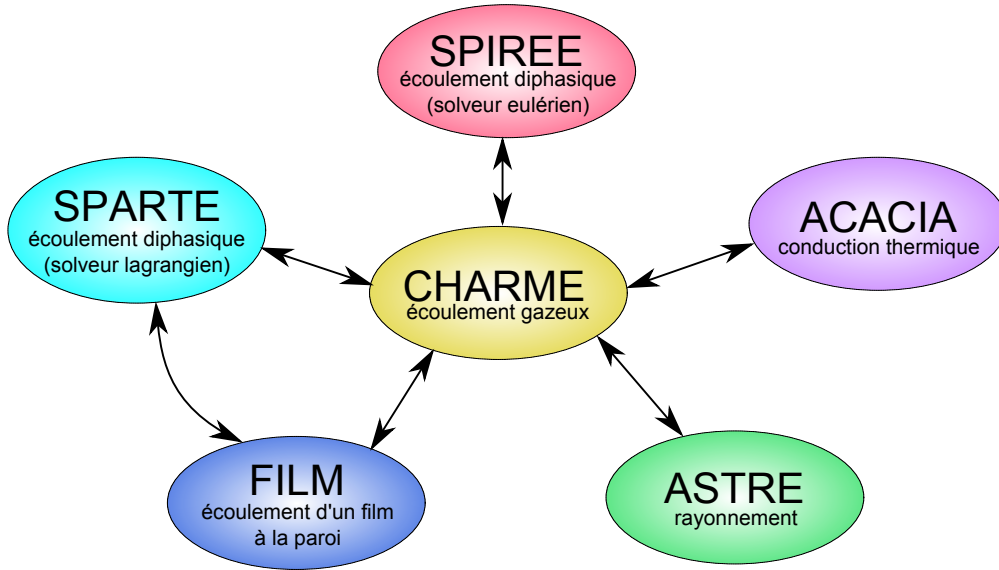


FIGURE 1.1 – Architecture du code CFD CEDRE.

## 1.2 Écoulement gazeux compressible

Dans un premier temps, nous rappelons les équations de Navier-Stokes pour un mélange gazeux dans l'approximation des milieux continus. La conservation de la masse, des espèces, de la quantité de mouvement et de l'énergie totale permettent d'établir ces équations sur les grandeurs macroscopiques d'un volume élémentaire de fluide.

### 1.2.1 Équations de conservation

#### 1.2.1.1 Conservation de la masse

La conservation de la masse d'un volume élémentaire se traduit par l'équation de continuité (1.1), mettant en jeu la masse volumique  $\rho$  et le vecteur vitesse  $\mathbf{V}$  :

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{V}) = 0 \quad (1.1)$$

#### 1.2.1.2 Conservation des espèces

Dans le cas d'un écoulement multi-espèce et réactif, le gaz est composé de  $N_e$  espèces distinctes. En utilisant la notation d'Einstein dans l'équation (1.2), on obtient  $N_e$  équations de conservation des espèces :

$$\frac{\partial \rho Y_k}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{V} Y_k) = -\nabla \cdot \mathbf{J}_k + \dot{\omega}_k + S_k^d \quad (1.2)$$

Ici  $Y_k$  désigne la fraction massique de l'espèce  $k$ ,  $\dot{\omega}_k$  est le terme source lié aux réactions chimiques et  $S_k^d$  est le terme source apporté par la phase dispersée. Enfin,  $\mathbf{J}_k$  est le flux de diffusion de l'espèce  $k$  décrit par l'équation (1.3), faisant intervenir  $\mathcal{V}_k$  la vitesse de diffusion de l'espèce  $k$  :

$$\mathbf{J}_k = \rho \mathcal{V}_k Y_k \quad (1.3)$$

La somme des équations de conservation des espèces (1.2) doit permettre de retrouver l'équation de conservation de la masse (1.1). Pour cela, les deux conditions suivantes doivent être respectées :

1. la somme des flux diffusifs doit être nulle :

$$\sum_{k=1}^{N_e} \mathbf{J}_k = 0 \quad (1.4)$$

2. la somme des termes sources d'espèces doit être nulle :

$$\sum_{k=1}^{N_e} \dot{\omega}_k = 0 \quad (1.5)$$

### 1.2.1.3 Conservation de la quantité de mouvement

On écrit l'équation de conservation de la quantité de mouvement (1.6) dans le cas où la force due à la gravité est négligeable devant les autres effets :

$$\frac{\partial \rho \mathbf{V}}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{V} \otimes \mathbf{V}) = \nabla \cdot (\boldsymbol{\tau} - p \mathbf{I}) + \mathbf{S}_{qdm} \quad (1.6)$$

Ici  $\boldsymbol{\tau}$  est le tenseur des contraintes visqueuses,  $p$  est la pression,  $\mathbf{I}$  est la matrice identité.  $\mathbf{S}_{qdm}$  est le terme source des forces volumiques. Etant donné que dans cette étude, la force par gravité est négligée, le terme source  $\mathbf{S}_{qdm}$  est uniquement lié à l'action de la phase dispersée. Son expression est détaillée dans la partie 1.4.

### 1.2.1.4 Conservation de l'énergie totale

L'énergie totale est la somme de l'énergie interne et de l'énergie cinétique :

$$e_t = e + \frac{1}{2} \mathbf{V} \cdot \mathbf{V} \quad (1.7)$$

On peut alors écrire l'équation de conservation de l'énergie totale :

$$\frac{\partial \rho e_t}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho e_t \otimes \mathbf{V}) = \nabla \cdot [(\boldsymbol{\tau} - p \mathbf{I}) \cdot \mathbf{V}] - \nabla \cdot \mathbf{J}_{et} + S_{et} \quad (1.8)$$

où  $\mathbf{J}_{et}$  est le flux d'énergie totale, défini par l'enthalpie  $h_k$  des espèces  $k$  et le flux de diffusion de chaleur  $\mathbf{q}$  :

$$\mathbf{J}_{et} = \mathbf{q} + \sum_{k=1}^{N_e} h_k \mathbf{J}_k \quad (1.9)$$

Le travail lié à la force de gravité et les termes radiatifs étant négligés, le terme source  $S_{et}$  ne dépend que de la phase dispersée.

## 1.2.2 Lois d'état et relations de comportement

### 1.2.2.1 Loi d'état des gaz parfaits

La loi d'état des gaz parfaits est la suivante :

$$p = \frac{\rho \mathcal{R} T}{\mathcal{M}} \quad (1.10)$$

où  $\mathcal{R}$  est la constante universelle des gaz parfaits  $\mathcal{R} \approx 8,314\,472 \text{ J.mol}^{-1}.\text{K}^{-1}$ . La masse molaire du mélange  $\mathcal{M}$  est définie par :

$$\mathcal{M} = \sum_{k=1}^{N_e} X_k \mathcal{M}_k \quad (1.11)$$

où  $X_k$  est la fraction molaire de l'espèce  $k$  et  $\mathcal{M}_k$  est sa masse molaire. Les fractions massique et molaire sont reliées par la relation :

$$Y_k = \frac{X_k \mathcal{M}_k}{\mathcal{M}} \quad (1.12)$$

### 1.2.2.2 Propriétés de transport et fonctions thermodynamiques

Cette partie définit les termes de diffusion présents dans les équations de conservation.

**Diffusion de quantité de mouvement** Dans cette étude, les fluides sont supposés Newtoniens. On peut ainsi relier linéairement le tenseur des contraintes visqueuses au gradient de vitesse  $\nabla \mathbf{V}$  et à la divergence du vecteur vitesse :

$$\boldsymbol{\tau} = \mu [\nabla \mathbf{V} + (\nabla \mathbf{V})^T] + \eta (\nabla \cdot \mathbf{V}) \mathbf{I} \quad (1.13)$$

avec  $\mu$  la viscosité dynamique reliée à la viscosité cinématique par la relation  $\mu = \rho \nu$ .  $\eta$  est le coefficient de viscosité obtenu par la relation de Stokes :

$$\eta = -\frac{2}{3}\mu \quad (1.14)$$

**Diffusion des espèces** La vitesse de diffusion  $\mathbf{V}_k$  de l'espèce  $k$  est approximée par la relation de Fick, à l'aide du coefficient de diffusion  $D_k$  :

$$\mathbf{V}_k = -D_k \frac{1}{Y_k} \nabla Y_k \quad (1.15)$$

Le flux de diffusion de l'espèce  $k$  s'écrit alors :

$$\mathbf{J}_k = -\rho D_k \nabla Y_k \quad (1.16)$$

L'effet Soret, qui représente l'effet du gradient de température sur la diffusion moléculaire, est négligé.

**Diffusion de chaleur** La diffusion de chaleur est modélisée par la loi de Fourier :

$$\mathbf{q} = -\lambda \nabla T \quad (1.17)$$

où  $\lambda$  est la conductivité thermique. L'effet Dufour, qui consiste à prendre en compte l'effet du gradient de concentration sur le flux de chaleur, est négligé.

**Viscosité dynamique** Dans cette étude, la viscosité  $\mu_k$  des espèces est calculée grâce à la loi de Sutherland :

$$\mu_k = \mu_k^0 \frac{T_k^0 + T_k^1}{T + T_k^1} \left( \frac{T}{T_k^0} \right)^{\frac{3}{2}} \quad (1.18)$$

où  $\mu_k^0$ ,  $T_k^0$  et  $T_k^1$  sont des constantes relatives à l'espèce  $k$ .

La viscosité du mélange est définie selon une loi barycentrique :

$$\mu = \sum_{k=1}^{N_e} Y_k \mu_k \quad (1.19)$$

**Conductivité thermique** La conductivité thermique  $\lambda_k$  de l'espèce  $k$  est évaluée à l'aide du nombre de Prandtl de l'espèce :  $\lambda_k = \frac{\mu_k c_{p,k}}{Pr_k}$ . Le terme  $c_{p,k}$  est la capacité calorifique massique à pression constante de l'espèce  $k$ , définie selon le polynôme en température, de degré  $n_d$  :

$$c_{p,k}(T) = \sum_{i=1}^{n_d} a_{k,i} \left( \frac{T}{\theta} \right)^i \quad (1.20)$$

où les coefficients  $a_{k,i}$  sont donnés pour chaque espèce  $k$  et  $\theta$  est une échelle de température, généralement égale à  $\theta = 1000$  K.

La conductivité thermique du mélange  $\lambda$  est définie par la conductivité thermique et la viscosité de chaque espèce ainsi que la viscosité du mélange :

$$\lambda = \mu \sum_{k=1}^{N_e} \frac{\lambda_k}{\mu_k} Y_k \quad (1.21)$$

**Nombres adimensionnels** Le nombre de Prandtl compare les transports de quantité de mouvement et de chaleur :

$$Pr_k = \frac{\nu_k}{\alpha_k} = \frac{\mu_k c_{p,k}}{\lambda_k} \quad (1.22)$$

où  $\alpha$  est la diffusivité thermique et  $\lambda$  la conductivité thermique.

Le coefficient de diffusion  $D_k$  de l'espèce  $k$  peut être relié à la viscosité  $\mu_k$  en définissant le nombre de Schmidt  $Sc_k$ . Ce nombre compare la diffusion de quantité de mouvement à la diffusion moléculaire de l'espèce  $k$ , supposée constante :

$$Sc_k = \frac{\nu}{D_k} \quad (1.23)$$

Enfin, le nombre de Lewis  $Le_k$  compare la vitesse de diffusion de la chaleur avec celle de la diffusion moléculaire :

$$Le_k = \frac{Sc_k}{Pr_k} = \frac{\lambda_k}{\rho c_{p,k} D_k} \quad (1.24)$$

### 1.2.3 Modélisation de la turbulence

Un écoulement turbulent se caractérise par la présence de structures aux échelles très variées. Cette section décrit les différentes approches utilisées pour la simulation de la turbulence au sein de l'écoulement. Plus de détails sur la turbulence et sa modélisation sont disponibles par exemple dans les ouvrages de référence de Pope [96], Chassaing [28] et Lesieur [76].

### 1.2.3.1 Résolution et modélisation numérique

L'écoulement de la phase gazeuse peut être simulé selon trois approches. Pour chacune de ces approches, la répartition entre les échelles résolues et les échelles modélisées est différente.

**Approche RANS** L'approche RANS (*Reynolds-Averaged Navier-Stokes*) cherche une solution asymptotique stationnaire au problème. L'ensemble du spectre de la turbulence est modélisé. La méthode consiste à résoudre les équations de Navier-Stokes, après avoir appliqué une moyenne statistique d'ensemble, équivalente à une moyenne temporelle pour un processus aléatoire, définie par :

$$\bar{\varphi} = \lim_{t \rightarrow \infty} \frac{1}{t - t_0} \int_{t_0}^t \varphi(t) dt \quad (1.25)$$

Cette opération peut être interprétée comme un filtrage et on peut alors introduire des notations communes pouvant être employées à la fois en RANS et en LES. En RANS, toute valeur instantanée d'une grandeur  $\varphi$  peut être décomposée en la somme de sa moyenne temporelle et de ses fluctuations autour de cette moyenne :

$$\varphi = \bar{\varphi} + \varphi' \quad (1.26)$$

L'opérateur de filtrage obéit ainsi aux propriétés de linéarité, de conservation des constantes, de commutativité par rapport à la dérivation et de projectivité. Cela induit les relations suivantes lors du filtrage :

$$\overline{\bar{\varphi}} = \bar{\varphi} \quad \text{et} \quad \overline{\varphi'} = 0 \quad (1.27)$$

La moyenne de Favre est introduite dans les codes de simulation pour les écoulements compressible afin de prendre en compte la nature inertielle des différents phénomènes. Elle met en œuvre une moyenne pondérée par la masse volumique :

$$\tilde{\varphi} = \frac{\overline{\rho\varphi}}{\bar{\rho}} \quad (1.28)$$

Les fluctuations autour de la moyenne de Favre sont notées  $\varphi''$ , et la décomposition d'une grandeur  $\varphi$  est alors :

$$\varphi = \tilde{\varphi} + \varphi'' \quad (1.29)$$

La moyenne de Favre est telle que :

$$\tilde{\tilde{\varphi}} \neq \tilde{\varphi} \quad \text{et} \quad \tilde{\varphi'} \neq 0 \quad (1.30)$$

**Approche LES** Dans l'approche LES (*Large Eddy Simulation*), les grandeurs sont filtrées dans l'espace physique par rapport à un filtre passe-haut. Cela revient à utiliser un filtre passe-bas dans l'espace spectral. Les grandes structures tourbillonnaires de la turbulence sont résolues, tandis que les petites structures sont modélisées. Pour modéliser les interactions entre les petites et les grandes échelles de la turbulence et au sein même des petites échelles, une modélisation de sous-maille est introduite.

L'opération de filtrage de la grandeur  $\varphi$  dans l'espace spectral est obtenue par convolution :

$$\bar{\varphi}(\kappa) = \int_{-\infty}^{\infty} \varphi(\kappa') G_{\Delta}(\kappa - \kappa') d\kappa' \quad (1.31)$$



où  $G_\Delta$  est le noyau du filtre.

En pratique, le logiciel CEDRE impose le filtrage dans l'espace physique à la fois par le maillage et par le schéma numérique. La majorité du spectre d'énergie cinétique turbulente, portée par les plus grosses structures tourbillonnaires, est ensuite résolue. Comme pour le RANS, la moyenne de Favre est fréquemment utilisée et les notations restent alors les mêmes qu'en RANS. Enfin des termes supplémentaires sont introduits par le filtrage des équations de Navier-Stokes au sens LES, par rapport aux équations RANS. Ces termes sont pris en compte par les modèles de sous-maille (ou modèles *SGS*, pour *Sub Grid Scale model*).

**Approche DNS** L'approche DNS (*Direct Numerical Simulation*) calcule l'ensemble du spectre de la turbulence. La description de la dynamique nécessite un maillage très fin, et un pas de temps assez faible. Le nombre de points nécessaires à la résolution d'un écoulement de turbulence homogène isotrope d'échelle intégrale  $\mathcal{L}$  est estimé être de l'ordre de  $Re_{\mathcal{L}}^{\frac{9}{4}}$ . L'important coût de calcul de cette approche rend son utilisation marginale, mais l'augmentation de la puissance de calcul devrait développer son utilisation.

### 1.2.3.2 Équations filtrées

On présente ici les équations filtrées effectivement résolues par CEDRE. Valables pour les approches RANS et LES selon le filtre appliqué, elles sont obtenues en appliquant le filtre  $(\bar{\cdot})$  aux équations, puis en décomposant chaque grandeur avec la décomposition de Favre.

$$\frac{\partial \bar{\rho}}{\partial t} + \nabla \cdot (\bar{\rho} \tilde{\mathbf{V}}) = 0 \quad (1.32)$$

$$\frac{\partial \bar{\rho} \tilde{Y}_k}{\partial t} + \nabla \cdot (\bar{\rho} \tilde{Y}_k \tilde{\mathbf{V}}) + \nabla \cdot \bar{\mathbf{J}}_k - \bar{\dot{\omega}}_k - \bar{S}_k^d = -\nabla \cdot \mathbf{J}_k^t \quad (1.33)$$

$$\frac{\partial \bar{\rho} \tilde{\mathbf{V}}}{\partial t} + \nabla \cdot (\bar{\rho} \tilde{\mathbf{V}} \otimes \tilde{\mathbf{V}}) - \nabla \cdot (\bar{\boldsymbol{\tau}} - \bar{p} \mathbf{I}) - \bar{\mathbf{S}}_{qdm} = \nabla \cdot \boldsymbol{\tau}^t \quad (1.34)$$

$$\frac{\partial \bar{\rho} \tilde{e}_t}{\partial t} + \nabla \cdot (\bar{\rho} \tilde{e}_t \tilde{\mathbf{V}}) + \nabla \cdot \bar{\mathbf{J}}_{et} - \nabla \cdot [(\bar{\boldsymbol{\tau}} - \bar{p} \mathbf{I}) \cdot \tilde{\mathbf{V}}] - \bar{S}_{et} = -\nabla \cdot \mathbf{J}_{et}^t \quad (1.35)$$

où  $\mathbf{J}_k^t$  est le flux de diffusion turbulente de l'espèce  $k$ ,  $\boldsymbol{\tau}^t$  le tenseur des contraintes turbulentes et  $\mathbf{J}_{et}^t$  le flux de diffusion turbulente d'énergie totale. Ces grandeurs issues du filtrage s'expriment ainsi :

$$\mathbf{J}_k^t = \overline{\bar{\rho} \mathbf{V}'' Y_k''} \quad (1.36)$$

$$\boldsymbol{\tau}^t = -\overline{\bar{\rho} \mathbf{V}'' \otimes \mathbf{V}''} \quad (1.37)$$

$$\mathbf{J}_{et}^t = \overline{\bar{\rho} \mathbf{V}'' e_t''} + \overline{(\boldsymbol{\tau}'' - p'' \mathbf{I}) \cdot \mathbf{V}''} \quad (1.38)$$

### 1.2.3.3 Fermeture des équations

On définit les termes à fermer afin de pouvoir résoudre les équations. Les approximations ou les modèles utilisés pour le calculs seront précisés dans les chapitres concernés.

**Flux de diffusion laminaire et tenseur des contraintes visqueuses** Les coefficients de diffusion  $D_k$ ,  $\mu$  et  $\lambda$  sont évalués directement à partir de la valeur filtrée de la température  $\tilde{T}$ . Les termes de transport s'écrivent :

$$\overline{\mathbf{J}}_k \approx -\bar{\rho} D_k \nabla \tilde{Y}_k \quad (1.39)$$

$$\overline{\boldsymbol{\tau}} \approx \mu(\tilde{T}) \left[ \nabla \tilde{\mathbf{V}} + (\nabla \tilde{\mathbf{V}})^T - \frac{2}{3} (\nabla \cdot \tilde{\mathbf{V}}) \mathbf{I} \right] \quad (1.40)$$

$$\overline{\mathbf{J}}_{et} \approx -\lambda(\tilde{T}) \nabla \tilde{T} + \sum_{k=1}^{N_e} \overline{h_k \mathbf{J}_k} \quad (1.41)$$

**Termes sources chimiques** L'expression des termes sources produits par réaction chimique, et plus particulièrement par la combustion, est décrite en section 1.2.5.

**Tenseur des contraintes turbulentes** Dans le logiciel CEDRE, l'hypothèse de viscosité turbulente de Boussinesq est faite, réduisant le tenseur  $\boldsymbol{\tau}^t$  à l'expression du tenseur de Reynolds :

$$\boldsymbol{\tau}^t = \mu_t \left[ \nabla \tilde{\mathbf{V}} + (\nabla \tilde{\mathbf{V}})^T - \frac{2}{3} (\nabla \cdot \tilde{\mathbf{V}}) \mathbf{I} \right] - \frac{2}{3} \bar{\rho} k \mathbf{I} \quad (1.42)$$

où  $\mu_t$  est le coefficient de viscosité turbulente (ou de sous-maille en LES) et  $k$  est l'énergie cinétique de la turbulence. En général, la partie isotrope du tenseur (dernier terme de l'équation (1.42)) n'est pas prise en compte en LES.

La viscosité turbulente  $\mu_t$  peut être décrite de multiples façons. Seuls les modèles utilisés pour les calculs de cette étude sont présentés :

**RANS : modèle  $k - \omega$ -SST.** Le modèle  $k - \omega$  combine les avantages du modèle  $k - \omega$  (pour ses capacités à reproduire les couches limites attachées) et ceux du modèle  $k - \epsilon$ , moins sensible aux conditions aux limites sur les grandeurs turbulente. Le modèle effectue une transition entre le modèle  $k - \omega$  en proche paroi et le modèle  $k - \epsilon$  en dehors de la couche limite via une fonction de raccord.

Le terme  $\omega$  est la pseudo-dissipation reliée à l'énergie cinétique turbulente  $\epsilon$  par :

$$\omega = \frac{\epsilon}{\beta^* k} \quad (1.43)$$

avec  $\beta^* = 0.09$ .

La viscosité turbulente est définie par :

$$\mu_t = \rho \frac{a_1 k}{\max(a_1 \omega, F_2 |\tilde{S}|)} \quad (1.44)$$

avec  $a_1 = 0.31$ ,  $\tilde{S}$  la partie symétrique du tenseur de gradients de vitesse filtré et  $F_2$  une fonction de raccord permettant d'éviter à la limitation SST de s'appliquer en dehors des couches limites. Pour plus de détails sur le calcul de la fonction  $F_2$ , le lecteur peut se rapporter au manuel CEDRE [25] et à la publication de Menter [84].

**LES : modèle de Smagorinsky.** Le modèle de Smagorinsky calcule la viscosité turbulente grâce à la relation suivante :

$$\mu_t = \bar{\rho}(C_s\Delta)^2 \left(2\tilde{\mathbf{S}} : \tilde{\mathbf{S}}\right)^{\frac{1}{2}} \quad (1.45)$$

où  $\tilde{\mathbf{S}}$  est la partie symétrique du tenseur des gradients de vitesses filtrées :

$$\tilde{\mathbf{S}} = \frac{1}{2} \left( \nabla \tilde{\mathbf{V}} + (\nabla \tilde{\mathbf{V}})^T \right) \quad (1.46)$$

$C_s$  est une constante qui dépend de la configuration de l'écoulement et qui est généralement fixée à  $C_s = 0,18$ . Enfin, la taille de maille  $\Delta$  est évaluée comme suit pour une cellule :

$$\Delta = 6 \frac{Volume}{Surface} \quad (1.47)$$

**Flux de diffusion turbulente** Une analogie est faite avec les flux de diffusion moléculaire :

$$\mathbf{J}_k^t \approx -D_k^t \nabla \tilde{Y}_k \quad \text{où} \quad D_k^t = \frac{\nu_t}{Sc_k^t} \quad (1.48)$$

$$\mathbf{J}_{et}^t \approx -\lambda^t \nabla \tilde{T} + \sum_{k=1}^{N_e} \bar{h}_k \mathbf{J}_k^t + \tau^t \tilde{\mathbf{V}} \quad (1.49)$$

Les nombres de Prandtl et Schmidt turbulents sont introduits afin d'évaluer les coefficients de diffusion turbulente.

$$D_k^t = \frac{\mu_t}{\bar{\rho} Sc_k^t} \quad \text{et} \quad \lambda^t = \frac{\mu_t \bar{c}_p}{Pr^t} \quad (1.50)$$

Les nombres de Prandtl et Schmidt sont fixés habituellement à 0,9.

### 1.2.4 Loi de paroi

La présence d'une paroi modifie la phénoménologie de l'écoulement turbulent car une couche limite se forme près des parois. Cette section décrit brièvement un modèle basique pour le traitement de la condition limite aux parois. On pourra se référer à Chassaing [28] pour plus de détails. Les lois de paroi sont définies à partir du comportement de la couche limite turbulente de plaque plane sans gradient de pression.

Dans la couche limite, on suppose que les dérivées partielles sont telles que :

$$\frac{\partial}{\partial x} \ll \frac{\partial}{\partial y} \quad (1.51)$$

Dans l'écoulement de la couche limite, l'équation de quantité de mouvement se simplifie de la sorte :

$$\frac{\partial \tau_{tot}}{\partial y} = \frac{\partial}{\partial y} \left( \mu \frac{\partial U}{\partial y} - \overline{\rho u'v'} \right) = 0 \quad (1.52)$$

$$\text{donc} \quad \tau_{tot} = \text{constante} = \rho U_\tau^2 \quad (1.53)$$

Dans la zone de proche paroi, trois parties peuvent être distinguées selon l'influence de la viscosité moléculaire.

### 1.2.4.1 Sous-couche linéaire

Dans cette zone les effets de la turbulence sont négligeables devant les effets de la viscosité moléculaire. Les conditions d'adhérence à la paroi donnent  $U(y=0) = 0 = u' = v'$ , donc le frottement total s'écrit :

$$\tau_{tot}(y=0) = \tau_w \approx \mu \left. \frac{\partial U}{\partial y} \right|_{y=0} \quad (1.54)$$

où l'indice  $w$  désigne les valeurs aux parois. Le frottement total étant constant, la vitesse moyenne peut s'écrire :

$$U(y) = y \frac{\tau_w}{\mu} \quad (1.55)$$

D'où un profil linéaire en fonction de la distance à la paroi. Par analyse dimensionnelle, on peut alors introduire le système suivant :

$$U_\tau = \sqrt{\frac{\tau_w}{\rho_w}} \quad (1.56)$$

$$U^+ = \frac{U}{U_\tau} \quad (1.57)$$

$$y^+ = \frac{y U_\tau}{\nu} \quad (1.58)$$

La loi linéaire, valable pour  $y^+ < 5$  d'après les expériences, s'écrit alors :

$$U^+ = y^+ \quad (1.59)$$

### 1.2.4.2 Zone tampon

Dans cette zone, définie par  $5 < y^+ < 30$ , les effets visqueux sont du même ordre de grandeur que le frottement turbulent.

### 1.2.4.3 Zone inertielle

Dans cette zone, également appelée zone logarithmique, le frottement dû à la turbulence devient plus important que la contribution de la viscosité moléculaire  $\mu \ll \mu_t$ , on a donc :

$$\tau_w \approx -\rho \overline{u'v'} \quad (1.60)$$

avec la contrainte de Reynolds égale à la vitesse de frottement :  $-\overline{u'v'} = U_\tau^2$ . Par analyse dimensionnelle on obtient alors :

$$\frac{\partial Y}{\partial y} = \frac{U_\tau}{\kappa y} \quad (1.61)$$

d'où, après intégration :

$$U^+ = \frac{1}{\kappa} \ln(y^+) + C \quad (1.62)$$

où  $C$  est une valeur comprise entre 5,2 et 5,5 et  $\kappa = 0,41$  est la constante de Von Karman.

Dans le logiciel CEDRE, l'approche pour les lois de paroi consiste à calculer le cisaillement à la paroi grâce aux valeurs dans la première cellule (indice 1) :

$$\tau_w = \left( \mu \frac{\partial U}{\partial y} \right)_w = (1 + \alpha) \mu \frac{U_1}{y_1} \quad (1.63)$$

où  $\alpha$  est un coefficient qui corrige la valeur de la pente reliant  $\tau_w$  à  $U_1$  en sous-couche laminaire, évalué selon plusieurs approches. L'approche utilisée pour les calculs de cette étude s'appuie sur le modèle de longueur de mélange. Ainsi  $\alpha$  s'exprime comme suit, d'après le manuel CEDRE [25] :

$$\alpha = \frac{f_c}{1 + f_c} \left( \frac{Re_\Delta}{447} \right)^{0.825} \quad \text{avec} \quad f_c = \frac{Re_\Delta}{80} + \left( \frac{Re_\Delta}{120} \right)^2 \quad (1.64)$$

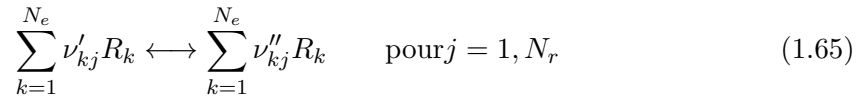
où  $Re_\Delta$  est le nombre de Reynolds lié à la première cellule.

## 1.2.5 Modélisation de la combustion

### 1.2.5.1 Modélisation d'un schéma cinétique

Les différents régimes de combustion, et plus particulièrement en écoulement diphasique, sont décrits dans la partie 1.3. On introduit ici les notations et les relations décrivant la cinétique chimique dans CEDRE.

Tout d'abord, le processus chimique est décrit.  $N_e$  espèces différentes peuvent être reliées entre elles par  $N_r$  réactions élémentaires. Chacune de ces réactions peut s'écrire sous la forme suivante :



où  $\nu'_{kj}$  et  $\nu''_{kj}$  sont les coefficients stœchiométriques respectivement direct et inverse liés à l'espèce  $R_k$  pour la réaction  $j$ .

Le terme source chimique massique de l'espèce  $k$  est déterminé par la théorie cinétique des gaz :

$$\dot{\omega}_k = \mathcal{M}_k \sum_{j=1}^{N_r} (\nu''_{kj} - \nu'_{kj}) \left( \mathcal{K}_r^f \prod_{k=1}^{N_e} C_k^{\tilde{\nu}'_{kr}} - \mathcal{K}_r^b \prod_{k=1}^{N_e} C_k^{\tilde{\nu}''_{kr}} \right) \quad (1.66)$$

où  $\mathcal{K}_r^f$  et  $\mathcal{K}_r^b$  représentent les vitesses de réaction directe (*forward*) et inverse (*backward*) et  $C_k = \rho Y_k / \mathcal{M}_k$  est la concentration de l'espèce  $k$ . Enfin, les exposants  $\tilde{\nu}$  sont appelés coefficients exotiques. Pour des schémas cinétiques détaillés, on a généralement pour une espèce  $k$  dans une réaction  $r$  l'égalité :  $\tilde{\nu}_{kr} = \nu_{kr}$ . Pour des schémas cinétiques très réduits, des ajustements sont nécessaires et bien souvent ces coefficients sont différents.

Les vitesses de réaction  $\mathcal{K}_r^i$  ( $i = f$  ou  $b$ ) sont évaluées suivant la loi d'Arrhenius :

$$\mathcal{K}_r^i = A_r^i T^{\beta_r^i} \exp \left( - \frac{Ea^i}{RT} \right) \quad (1.67)$$

où  $A_i$  est appelée constante pré-exponentielle,  $\beta_i$  est l'exposant de température tel que  $\beta_i \leq 0$ , et  $Ea^i$  est l'énergie d'activation reliée à la température d'activation par  $Ta^i = Ea^i / R$ . Enfin si aucun modèle d'interaction chimie-turbulence n'est pris en compte, pour une espèce  $k$  le taux de consommation turbulent filtré est considéré égal au taux de consommation laminaire, soit :  $\dot{\omega}_k = \dot{\omega}_k$ .

### 1.2.5.2 Mécanisme cinétique PEA

Face au coût de calcul qu'engendrerait l'emploi d'un mécanisme cinétique détaillé, faisant intervenir plusieurs centaines d'espèces et de réactions, des mécanismes réduits ont été développés. Ces mécanismes, souvent composés de 1 à 4 réactions, ont pour but de reproduire correctement quelques aspects de la combustion : délai d'allumage, vitesse de flamme, ... Pour cela les paramètres des réactions, c'est à dire les constantes d'Arrhenius, sont ajustés. Quelques-uns de ces mécanismes ont été proposés par Westbrook et Dryer [123]. Pour le n-décane, ils consistent en 1 étape et 5 espèces, ou 2 étapes et 6 espèces. La deuxième étape est la réaction d'oxydation. La prise en compte de l'équilibre  $CO-CO_2$  est importante pour la bonne estimation de la température adiabatique de flamme. Ces mécanismes sont néanmoins incapables de reproduire la décroissance de la vitesse de flamme laminaire  $s_L$  à partir de la stœchiométrie et pour des richesses supérieures.

Afin d'élargir la validité de ces mécanismes réactionnels simplifiés, des approches ont été développées, mettant en œuvre des fonctions de correction basées sur la richesse  $\Phi$ . C'est, par exemple, le cas du mécanisme global de Fernandez-Tarrazo [45], pour lequel la constante pré-exponentielle  $A_r^f$  et la température d'activation  $Ta^f$  dépendent de la richesse. Pour sa part, Franzelli [46] a développé un mécanisme réduit à 2 étapes pour la combustion kérosène/air, où seules les constantes pré-exponentielles sont ajustées en fonction de la richesse. On parle alors de mécanisme PEA (*Pre-Exponential Adjusted*). La vitesse de réaction directe d'une réaction  $r$  s'écrit alors :

$$\mathcal{K}_r^i = A_r^i f_r(\Phi) T^{\beta_r^i} \exp\left(-\frac{Ea^i}{RT}\right) \quad (1.68)$$

où  $f_r(\Phi)$  est la fonction de correction de la réaction  $r$ . Pour un écoulement diphasique au sein duquel plusieurs réactions prennent place, l'expression de la richesse  $\Phi$  à considérer est détaillée dans la section 3.1.1.4.

La section 1.3 décrit plus précisément le mécanisme PEA.

### 1.2.5.3 Modèle de flamme épaisse

La bonne estimation de la vitesse de flamme nécessite que le front de flamme soit correctement résolu. Il faut pour cela un maillage suffisamment fin, ce qui n'est pas réalisable lors de la simulation d'une configuration industrielle complexe. Butler et O'Rourke [22] ont ainsi eu l'idée d'épaissir le front de flamme artificiellement afin d'avoir un nombre de mailles suffisant pour calculer correctement les termes sources.

Avant de détailler la procédure d'épaississement, on rappelle que l'épaisseur de flamme laminaire  $\delta_L^0$  et la vitesse de flamme laminaire  $s_L^0$  peuvent être estimées de la façon suivante :

$$\delta_L^0 = \frac{D}{s_L^0} \quad (1.69)$$

$$s_L^0 \propto \sqrt{D\dot{\omega}_c} \quad (1.70)$$

où  $D$  est un coefficient de diffusion caractéristique et  $\dot{\omega}_c$  le taux de production chimique d'une variable d'avancement (dans le cas d'une chimie globale à une étape, cela peut être la concentration du carburant).

**Écoulement monophasique laminaire** Dans le cas d'une flamme laminaire prémélangée, Butler et O'Rourke [22] proposent de résoudre les équations en épaississant le front de flamme. L'épaississement  $F$  agit de deux façons :

- les coefficients de diffusion des espèces sont multipliés par  $F$ , donc la flamme s'épaissit du même facteur, et l'épaisseur de la flamme laminaire épaissie vaut alors  $\delta_L^F = F\delta_L^0$ ;
- les termes sources chimiques  $\dot{\omega}_i$  sont divisés par  $F$ , afin de conserver une vitesse de flamme laminaire constante.

Les équations de conservations des espèces (1.2) et de l'énergie totale (1.8) deviennent donc, pour un écoulement monophasique :

$$\frac{\partial \rho Y_k}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{V} Y_k) = -\nabla \cdot (F \mathbf{J}_k) + \frac{\dot{\omega}_k}{F} \quad (1.71)$$

$$\frac{\partial \rho e_t}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho e_t \otimes \mathbf{V}) = \nabla \cdot [(\boldsymbol{\tau} - p\mathbf{I}) \cdot \mathbf{V}] - \nabla \cdot (F \mathbf{J}_{et}) \quad (1.72)$$

Le facteur d'épaississement  $F$  est une donnée utilisateur. Il peut également être calculé en entrant  $\eta_f$  le nombre de points nécessaires à la bonne résolution du front de flamme laminaire.

**Écoulement monophasique turbulent** Pour un écoulement turbulent, le front de flamme est plissé par les plus petites structures de la turbulence, ce qui augmente sa surface. La vitesse de propagation de la flamme turbulente  $s_T$  n'est plus égale à la vitesse de flamme laminaire  $s_L^0$ . La correction des termes source chimiques doit alors prendre en compte les effets de la turbulence sur la vitesse de flamme.

Plusieurs modèles existent. Ils sont ici décrits brièvement (pour plus de détails, voir la thèse de Sainte-Rose [103]). Le modèle TFLES développé par Colin [33] introduit un facteur d'efficacité  $E$  défini comme le rapport entre le facteur de plissement de la flamme non-épaissie et épaissie, de façon à avoir  $s_T = E s_L^0$ . Le coefficient de diffusion de la flamme épaissie  $D_T$  et les termes sources d'espèces deviennent alors :

$$D_T = E F D \quad (1.73)$$

$$\widetilde{\dot{\omega}}_k = \frac{E}{F} \dot{\omega}_k \quad (1.74)$$

Le modèle de flamme épaissie dynamique (DTF - *Dynamic Thickened Flame*) proposé par Legier [75] permet de simuler des situations où le prémélange n'est que partiel. Le facteur d'épaississement n'est appliqué que dans la zone de flamme. Il est alors défini par :

$$F^\alpha = 1 + (F_{max} - 1) \alpha_{DTF} \quad (1.75)$$

où  $\alpha_{DTF}$  est un senseur valant 1 dans la flamme, et 0 en dehors. La diffusion turbulente et les termes sources d'espèces valent alors :

$$D_T = E F^\alpha D \quad (1.76)$$

$$\widetilde{\dot{\omega}}_k = \frac{E}{F^\alpha} \dot{\omega}_k \quad (1.77)$$

L'enjeu et les performances de l'épaississement de flamme pour les écoulements diphasiques sont présentés dans la section 2.2.2.2.

## 1.2.6 Méthodes numériques

Cette partie présente quelques aspects des différents schémas et méthodes numériques utilisés. Pour plus de détails, on pourra se référer au manuel utilisateur CEDRE [25].

### 1.2.6.1 Formulation volumes finis

Le code de calcul CEDRE repose sur une approche volumes finis *cell-centered*. Le système continu d'équations aux dérivées partielles (EDP) est transformé en un système discrétisées que l'on résout numériquement sur un espace discret. Pour cela, les grandeurs aux interfaces sont interpolées et les flux sur chaque face sont calculés et cumulés.

La formulation *cell-centered* veut que les cellules du maillage soient également les volumes de contrôle sur lesquels sont effectués les bilans. Ainsi les quantités conservées  $Q_i$  correspondent aux quantités conservatives moyennes de la cellule :

$$Q_i = \frac{1}{V_i} \int_{V_i} Q dV \quad (1.78)$$

$$\text{avec } Q = \begin{bmatrix} \rho \\ \rho Y_k \\ \rho u \\ \rho e_t \end{bmatrix} \quad (1.79)$$

### 1.2.6.2 Discrétisation spatiale

Les méthodes de traitement des flux et d'interpolation spatiales ne sont pas présentées en détail dans ce mémoire. Les thèses de Bertier [12] et Haider [55] ainsi que le manuel du code CEDRE [25] pourront renseigner le lecteur. Les schémas et méthodes utilisés seront précisés dans la mise en place des calculs pour le MERCATO (voir chapitre 8.1).

### 1.2.6.3 Intégration temporelle

Le système d'équations obtenu après discrétisation spatiale est ensuite intégré temporellement :

$$M\dot{Q} = F(U, \nabla U, t) \quad (1.80)$$

où  $U$  est l'ensemble des variables primitives. La solution exacte  $Q(t)$  est remplacée par une suite de valeurs discrètes à différents instants. L'intégration temporelle consiste à évaluer  $\delta Q$  entre deux instants  $t^n$  et  $t^{n+1}$  :

$$M\delta Q = \frac{1}{\Delta t} \int_{t^n}^{t^{n+1}} F(U) dt \quad \text{avec} \quad \delta Q = \frac{Q^{n+1} - Q^n}{\Delta t} \quad (1.81)$$

où  $\Delta t = t^{n+1} - t^n$ . Par la suite, l'inconnue du système est  $\delta Q$ ; c'est la formulation en delta. Les méthodes d'intégration temporelle peuvent être :

- à un pas : seuls les instants physiques  $t^n$  et  $t^{n+1}$  sont considérés. Ces méthodes peuvent néanmoins être à multi-évaluation (utilisation d'états intermédiaires);
- multipas : des instants antérieurs à  $t^n$  sont utilisés.



**Méthodes explicites** Les méthodes explicites sont simples à mettre en œuvre car seul l'état au temps  $t^n$  est nécessaire au calcul de l'état à l'instant  $t^{n+1}$ . La stabilité de ces méthodes est conditionnée par une contrainte CFL (Courant-Friedrichs-Lewy). A tout instant et pour tout point, l'inégalité suivante doit être respectée :

$$\Delta t < CFL_{max} \cdot \frac{\Delta x}{|u| + c} \quad (1.82)$$

où  $\Delta x$  est la taille de maille,  $u$  la vitesse convective,  $c$  la vitesse du son, et  $CFL_{max}$  est une valeur dépendant de la limite de stabilité du schéma considéré.

**Méthodes implicites -  $\Theta$  schéma** Il est possible de s'affranchir en partie ou totalement de la contrainte CFL en utilisant des schémas implicites. Les schémas implicites, également appelés  $\Theta$ -schémas, nécessitent néanmoins une mise en œuvre plus complexe, puisqu'apparaît au second membre du système l'évaluation des flux des états calculés au temps  $t^{n+1}$ . Le  $\Theta$ -schéma présent dans CEDRE est défini comme :

$$M\delta Q = F [\Theta U^{n+1} + (1 - \Theta)U^n] \quad (1.83)$$

Selon les valeurs de  $\Theta$ , les schémas suivants sont obtenus :

- $\Theta = 0$  : méthode d'Euler explicite ;
- $\Theta = 0,5$  : méthode de Crank-Nicholson ;
- $\Theta = 1$  : méthode d'Euler implicite.

Pour la méthode d'Euler implicite, trois étapes successives sont nécessaires pour la résolution du système. Ces étapes introduisent des approximations qui peuvent dégrader la solution :

1. **linéarisation du second membre** : la linéarisation de l'équation (1.83) rend possible la résolution du système par des méthodes itératives :

$$(M - \Theta \Delta t J^n) \delta Q = F(U^n) \quad (1.84)$$

où  $J^n$  est la matrice jacobienne des seconds membres par rapports aux états, à l'itération  $n$  :

$$J^n = \left. \frac{\partial F}{\partial Q} \right|^n \quad (1.85)$$

2. **approximation du Jacobien** : afin de réduire le coût de calcul du Jacobien, qui fait intervenir les cellules du second voisinage, un jacobien approché est construit à l'aide d'une discrétisation spatiale d'ordre un ;
3. **résolution itérative du système linéaire** : le nouvel état  $Q^{n+1}$  est déterminé à l'aide de la méthode GMRES, utilisant les paramètres standards, détaillée dans la thèse de Bertier [12] et de Selva [106].

Enfin, étant donné que les calculs réalisés sont instationnaires, un pas de temps global est utilisé.

## 1.3 Modèles physiques pour le kérosène

### 1.3.1 Modélisation du kérosène par une pseudo-espèce

Le kérosène est un mélange d'hydrocarbures dont la composition exacte dépend du fournisseur. Il est essentiellement composé de paraffines, de naphènes et d'aromatiques.

Par souci de simplification pour le traitement de l'évaporation et de la combustion, le kérosène est généralement représenté par un modèle. Dans le cas le plus simple, ce modèle correspond à une espèce. Il s'agit le plus souvent du n-décane :  $n - C_{10}H_{22}$ .

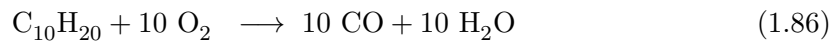
Afin de se rapprocher de la composition réelle du kérosène, Luche [81] définit une pseudo-espèce, c'est-à-dire une espèce fictive dont les propriétés sont assimilées à celle d'un mélange de trois espèces. Chacune de ces espèces représente une famille différente (paraffine, naphène, aromatique). Les espèces prises en compte, la pseudo-espèce qui en résulte et celle qui est réellement utilisée dans CEDRE sont présentées par le tableau 1.1. L'espèce KERO, également appelée  $C_{10}H_{20}$  par la suite, conserve les propriétés thermodynamiques (chaleur massique, enthalpie et entropie) de la pseudo-espèce de Luche.

Famille	Formule	Masse molaire (kg.mol <sup>-1</sup> )	Fraction massique
Paraffine	$C_{10}H_{22}$	$1,422\ 84 \cdot 10^{-1}$	0,767
Aromatique	$C_9H_{12}$	$1,201\ 961\ 6 \cdot 10^{-1}$	0,132
Naphène	$C_{10}H_{18}$	$1,262\ 41 \cdot 10^{-1}$	0,101
Pseudo-espèce	$C_{9.7396}H_{20.0542}$	$1,422\ 84 \cdot 10^{-1}$	1
KERO	$C_{10}H_{20}$	$1,40 \cdot 10^{-1}$	1

TABLE 1.1 – Composition de la pseudo-espèce modélisant le kérosène.

### 1.3.2 Description du mécanisme réactionnel PEA

**Présentation du mécanisme** Le mécanisme PEA proposé par Franzelli [46] utilise l'espèce  $C_{10}H_{20}$  et comporte deux étapes :



Les valeurs relatives à cette cinétique, c'est à dire les constantes de la loi d'Arrhenius, les exposants de concentration ainsi que les fonctions de correction et les valeurs associées, sont données par Franzelli [46]. Les fonctions de correction ne sont actives que lorsque la richesse du mélange est supérieure à la stœchiométrie.

**Implémentation et validation du mécanisme** Ce mécanisme cinétique a été implémenté dans le logiciel CEDRE par Dorey [39] [13]. Linassier [79] l'a quant à lui implémenté dans le modèle de noyau d'allumage qui sera utilisé par la suite (voir partie 5.3).

La validation du mécanisme a été réalisée en calculant la propagation d'une flamme 1D laminaire prémélangée pour plusieurs richesses. La figure 1.2 montre l'évolution de la vitesse de flamme en fonction de la richesse du prémélange gazeux. Sont comparées les valeurs obtenues par le mécanisme référence de Luche [81] contenant 91 espèces et 991 réactions, ainsi que par la cinétique de Franzelli [46] avec et sans fonction de correction. On constate ainsi que l'utilisation des fonctions de correction est essentielle à la bonne prédiction de la vitesse de flamme.

La section 2.4.2 présente succinctement les limitations de cette cinétique chimique.

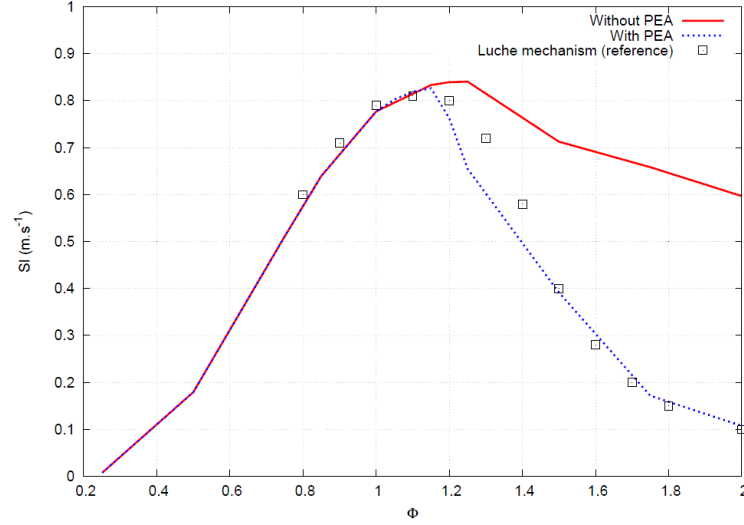


FIGURE 1.2 – Vitesse de flamme en fonction de la richesse du prémélange gazeux, d’après Dorey [39].

## 1.4 Ecoulement phase dispersée

L’évolution de la phase dispersée dans l’écoulement porteur est traitée par le solveur lagrangien SPARTE de la chaîne CEDRE. Cette section a pour but de présenter brièvement les modèles utilisés dans cette étude. Plus de détails sont donnés dans le manuel CEDRE [25].

Le nombre de gouttes à décrire étant souvent très grand, la fonction densité de particules  $f_p$  est introduite afin de décrire la phase dispersée de manière statistique. Ainsi, chaque particule numérique dans SPARTE représente en réalité plusieurs gouttes réelles. En l’absence de fragmentation ou de collision, le poids de la particule numérique restera constant. Par définition, le nombre moyen de particules situées à l’instant  $t$ , dans l’hypervolume  $dx_p dV_p dr_p dT_p$ , autour du point de coordonnées  $(x_p, V_p, r_p, T_p)$  dans l’espace des phases vaut  $f_p(t, x_p, V_p, r_p, T_p) dX dV_p dr_p dT_p$

La méthode numérique consiste à déterminer à chaque pas de temps les caractéristiques suivantes de la goutte :

- sa position  $x_p$ ,
- son rayon  $r_p$ ,
- sa vitesse  $V_p$ ,
- sa température  $T_p$ .

L’approche lagrangienne repose sur le suivi de gouttes isolées dans l’écoulement porteur. La rotation de la particule est négligée et seul le mouvement de translation est pris en compte. L’équation pour le mouvement d’une particule  $p$  est donc :

$$\frac{dx_p}{dt} = \mathbf{V}_p \quad (1.88)$$

Le bilan de quantité de mouvement de la particule est :

$$\frac{dm_p \mathbf{V}_p}{dt} = \mathbf{F}_p \quad (1.89)$$

### 1.4.1 Efforts sur les particules

La masse volumique des particules  $\rho_p$  est supposée grande devant celle du gaz  $\rho$ . Pour de fortes vitesses des gouttes, les forces de gravité peuvent être négligées et seule la force de traînée s'applique sur une particule :

$$\mathbf{F} = \frac{1}{2} \pi \rho r_p^2 C_d \|\mathbf{V} - \mathbf{V}_p\| (\mathbf{V} - \mathbf{V}_p) \quad (1.90)$$

où  $\mathbf{V}$  est la vitesse du gaz porteur et  $C_d$  est le coefficient de traînée. L'évaluation de ce coefficient peut se faire de différentes manières. Pour les calculs de cette étude, il sera calculé à partir de la loi de Schiller et Neumann, valable à faible nombre de Mach :

$$C_d = \begin{cases} \frac{24}{Re_p} (1 + 0,15 Re_p^{0,687}) & \text{si } Re_p \leq 1000 \\ 0,445 & \text{si } Re_p > 1000 \end{cases} \quad (1.91)$$

où  $Re_p$  est le nombre de Reynolds particulaire, dont la définition fait intervenir  $\mu$  la viscosité dynamique du gaz :

$$Re_p = \frac{2\rho r_p \|\mathbf{V} - \mathbf{V}_p\|}{\mu} \quad (1.92)$$

### 1.4.2 Évaporation de la goutte

Un goutte peut être monocomposant ou multicomposant. Dans le premier cas, les équations régissant l'évaporation des particules, présentées par la suite, seront simplifiées par rapport au cas multicomposant. Cette partie présente l'évaporation monocomposant et multicomposant d'une goutte isolée, celle-ci étant modélisée par un modèle à composants discrets (*DCM - Discret Component Model*). Le modèle d'évaporation multicomposant a été implémenté dans le logiciel CEDRE par Rouzaud [102]. Pour plus de détails sur l'évaporation multicomposant, le lecteur pourra se référer aux travaux de Sirignano [111], Nje Nje [91] et Laurent [71].

L'intégration des équations de conservation des espèces dans la couche limite autour de la goutte montre que le débit d'évaporation pour l'espèce  $k$  peut se mettre sous la forme :

$$\dot{m} = 2\pi r_p \rho_g D_g^k Sh_g^{*,k} \ln(1 + B_M^k) \quad (1.93)$$

où  $Sh_g^{*,k}$  est le nombre de Sherwood modifié de l'espèce  $k$ ,  $D_g^k$  est le coefficient de diffusion et  $B_M^k$  est le nombre de Spalding massique. Dans le cas où le nombre de composants est supérieur à  $N > 2$ , il faudra se référer au travail de Ebrahimian et Habchi [42]. La corrélation de Ranz-Marshall [98] permet de prendre en compte l'effet de la convection sur le nombre de Sherwood pour une particule sphérique solide, c'est-à-dire en l'absence d'évaporation (indice  $\theta$ ) :

$$Sh_{g,0}^k = 2 + 0,57 Re_p^{\frac{1}{2}} \left( Sc_g^k \right)^{\frac{1}{3}} \quad (1.94)$$

Ce modèle a été établi en supposant un écoulement quasi-stationnaire à symétrie sphérique.

Afin de prendre en compte l'épaississement du film de diffusion autour de la goutte, provoqué par le soufflage dû à l'évaporation, un coefficient correcteur peut être appliqué. Abramzon et Sirignano [2] l'ont défini par la relation :

$$Sh_g^{*,k} = 2 + \frac{Sh_{g,0}^k - 2}{F_M(B_M^k)} \quad (1.95)$$

où  $F_M(B_M^k)$  correspond à la fonction  $F(B)$  appliquée au nombre de Spalding massique :

$$F(B) = (1 + B)^{0.7} \frac{\ln(1 + B)}{B} \quad (1.96)$$

Le nombre de Spalding massique  $B_M$  est défini de la manière suivant en multicomposant :

$$B_M^k = \frac{y_{g,s}^k - y_{g,\infty}^k}{\xi^k - y_{g,s}^k} \quad (1.97)$$

où  $s$  désigne les quantités à la surface de la goutte et  $\xi^k$  est le rapport du flux massique de l'espèce  $k$  et du flux massique total :

$$\xi^k = \frac{\dot{m}^k}{\dot{m}} \quad (1.98)$$

Le problème de l'évaporation multicomposant se ramène à la résolution d'un système à  $N + 1$  inconnues (les débits  $\dot{m}_k$  + le débit total  $\dot{m}$ ) avec  $N + 1$  équations, où  $N$  est le nombre de composants dans la goutte. Ces équations sont définies par les équations (1.93) et par :

$$\sum_k^N \dot{m}_k = \dot{m} \quad (1.99)$$

### 1.4.3 Chauffage

Plusieurs modèles de conduction au sein de la goutte existent. Voici succinctement les caractéristiques de quelques-uns d'entre-eux :

1. **modèle à conduction infinie** : la température et la composition de la goutte sont supposées uniformes, mais elles varient dans le temps ;
2. **modèle à conduction limitée** : la convection dans la goutte est négligée, mais les gradients de concentration et de température sont calculés ;
3. **modèle à conduction effective** : les effets de convection dans la goutte sont pris en compte.

Dans le logiciel CEDRE, les modèles à conduction infinie et à conduction effective sont disponibles. Le dernier, implémenté par Laurent [71], repose sur l'hypothèse que le profil de température dans la goutte est parabolique. Le modèle à conduction infinie sera utilisé en raison de son plus faible coût de calcul. Etant donné que le modèle à conduction limitée est également rencontré dans les résultats de la littérature, une comparaison des modèles est présentée dans la partie 2.4.

Avec le modèle à conduction infinie, le bilan d'énergie pour la goutte permet de déduire la température  $T_p$  :

$$m_p c_{p_p} \frac{dT_p}{dt} = -Q_{l,s} \quad (1.100)$$

avec  $Q_{l,s}$  le flux de chaleur dans le liquide reçu par la goutte et  $c_{p_p}$  la chaleur massique à pression constante du liquide.

La conservation du flux de chaleur permet d'écrire :

$$Q_{l,s} = Q_{g,s} + \sum_k \dot{m}_k L_{v,k} \quad (1.101)$$

où  $Q_{g,s}$  est le flux de chaleur de conduction dans la phase gazeuse et  $L_{v,k}$  la chaleur latente de vaporisation de l'espèce  $k$ . Pour obtenir  $Q_{g,s}$ , on intègre l'équation de diffusion de la chaleur dans la couche limite autour de la goutte, en faisant l'hypothèse de symétrie sphérique et de quasi-stationnarité. On obtient :

$$\dot{m} = 2\pi r_p \rho_g \alpha_g Nu_g^* \frac{C_{p,g}}{C_{p,v}} \ln(1 + B_T) \quad (1.102)$$

où  $c_{p_v}$  est la chaleur massique de la vapeur,  $c_{p_g}$  celle du gaz avoisinant,  $\alpha_g$  la diffusivité thermique,  $Nu_g^*$  est le nombre de Nusselt modifié et  $B_T$  le nombre de Spalding thermique :

$$B_T = \frac{c_{p_v}(T_{g,\infty} - T_{g,s})}{-\frac{\dot{Q}_{g,s}}{\dot{m}}} \quad (1.103)$$

où  $c_{p_g}$  la chaleur massique du gaz avoisinant et  $c_{p_v}$  est la chaleur spécifique à pression constante de la vapeur :

$$c_{p_v} = \sum_{i=1}^N \xi_i c_{p_g}^i \quad (1.104)$$

En considérant l'effet de la convection sur une sphère solide sans évaporation, le nombre de Nusselt  $Nu_p$  peut être estimé par les corrélations de Ranz-Marshall [98] :

$$Nu_{g,0}^k = 2 + 0.57 Re_p^{\frac{1}{2}} Pr^{\frac{1}{3}} \quad (1.105)$$

Comme pour l'évaporation, le soufflage par l'évaporation est pris en compte grâce à un nombre de Nusselt modifié, dont la définition fait appel à la fonction  $F$  définie par l'équation (1.96) :

$$Nu_g^* = 2 + \frac{Nu_{g,0} - 2}{F_T(B_T)} \quad (1.106)$$

Une fois connu  $\dot{m}$ , on en déduit le nombre de Spalding thermique  $B_T$ . Comme on connaît également  $\dot{m}_k$ , on en déduit  $Q_{l,s}$ . On résout alors l'équation de la chaleur pour trouver  $T_p$ .

#### 1.4.4 Couplage avec la phase gazeuse

Pour un couplage prenant en compte l'influence de la phase dispersée sur l'écoulement gazeux (*two-way coupling*), l'échange se traduit par des termes sources dans les équations de conservation de la phase gazeuse. Les termes sources prennent en compte les échanges de masse, de quantité de mouvement, d'énergie totale et l'influence des particules sur la turbulence.

Le taux d'échange de masse de l'équation de transport de l'espèce vapeur  $k$  est :

$$S_k^d = - \int \dot{m} f_p d\mathbf{V}_p dr_p dT_p \quad (1.107)$$

Le taux d'échange de la quantité de mouvement entre les gouttes et le gaz est :

$$\mathbf{S}_{qdm}^d = - \int \frac{dm_p \mathbf{V}_p}{dt} f_p d\mathbf{V}_p dr_p dT_p \quad (1.108)$$

Enfin, le taux d'échange d'énergie comprend quatre termes : le travail de la force de traînée, la chaleur fournie pour le chauffage de la goutte, l'enthalpie totale de vapeur créée et la chaleur fournie pour la vaporisation du liquide. De manière compacte, cela s'écrit :

$$S_{e_t}^d = - \int \left( \frac{1}{2} \frac{dm_p \mathbf{V}_p^2}{dt} - Q_l + h_l(T_p) \right) f_p d\mathbf{V}_p dr_p dT_p \quad (1.109)$$

où l'enthalpie liquide est :

$$h_l = h_v - L_v \quad (1.110)$$

Afin d'éviter des instabilités numériques sur la phase gazeuse, provoquées par d'importants termes sources issus du solveur Lagrangien, une méthode de sous-relaxation peut être activée pour le couplage des termes. A l'itération  $i$  les termes sources  $S_g^i$  provenant du solveur SPARTE, ajoutés aux termes sources  $S_d^i$  du solveur CHARME, sont alors calculés comme :

$$S_g^i = \Theta S_d^{i-1} + (1 - \Theta) S_g^{i-1} \quad \Theta \leq 1 \quad (1.111)$$

où  $\Theta$  est le paramètre de sous-relaxation. La valeur  $\Theta = 0.5$  est généralement suffisante.

### 1.4.5 Modèles physiques pour les conditions aux limites

Le solveur SPARTE propose plusieurs modèles pour simuler l'interaction entre les gouttes et la paroi. Cette partie présente deux d'entre-eux.

#### 1.4.5.1 Rebond fusant

Au moment de l'impact, une goutte de vitesse  $\mathbf{V}_p$  rebondit selon un vecteur unitaire  $\mathbf{k}$ , qui forme un angle  $\theta$  avec la paroi. L'angle  $\theta$  du rebond est choisi aléatoirement entre deux extrema spécifiés par l'utilisateur. La vitesse après le rebond est :

$$\mathbf{V}'_p = \xi^{\frac{1}{2}} \|\mathbf{V}_p\| \mathbf{k} \quad (1.112)$$

où  $\xi$  est le coefficient de restitution énergétique. A défaut d'un modèle de formation d'un film liquide à la paroi, ce modèle peut être utilisé avec  $\xi \simeq 0,1$  et des angles de rebond petits (entre  $1^\circ$  et  $2^\circ$ ).

#### 1.4.5.2 Paroi complexe

Ce modèle, proposé par Garcia-Rosa [49], traite de manière plus réaliste l'impact d'une goutte sur la paroi. En fonction des propriétés de la goutte et de la paroi, trois régimes sont distingués : le dépôt, l'éclaboussement (*splashing*) et le rebond. Afin de déterminer quel traitement est réservé à une goutte lors de l'impact, deux paramètres sont calculés :

1. la température de paroi adimensionnée  $T^*$  :

$$T^* = \frac{T_W - T_B}{T_L - T_B} \quad (1.113)$$

où  $T_W$  est la température de la paroi,  $T_B$  la température d'ébullition et  $T_L$  la température de Leidenfrost ;

2. le nombre de Mundo  $K$  :

$$K = We.Oh^{-\beta} \quad (1.114)$$

où  $\beta = 0,4$  est une constante,  $We$  est le nombre de Weber calculé pour la vitesse normale d'impact de la goutte à la paroi :

$$We = \frac{\rho_l |\vec{U}_l \cdot \vec{n}_W|^2 d_l}{\sigma_l} \quad (1.115)$$

et  $Oh$  le nombre d'Ohnesorge :

$$Oh = \sqrt{\frac{\mu_l}{\rho_l d_l \sigma_l}} \quad (1.116)$$

La figure 1.3 montre la répartition des régimes dont les frontières ont été définies à partir d'un grand nombre de données expérimentales.

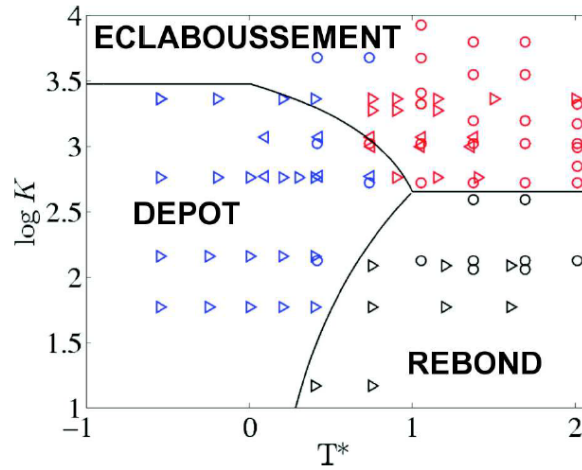


FIGURE 1.3 – Classification des différents régimes d'interaction goutte/paroi, d'après Garcia-Rosa [49].

Lorsqu'il y a dépôt à la paroi, les gouttes ne sont plus prises en compte dans le calcul. S'il y a éclaboussement, après l'impact la goutte est fragmentée en un ensemble de gouttes numériques dont la distribution est décrite par une loi log-normale.



## Deuxième partie

# Simulation numérique de la propagation d'une flamme plane diphase laminaire monodimensionnelle



# Introduction

Dans le but de prédire les performances d'allumage et le comportement d'une flamme lors de sa propagation dans une chambre de combustion, la question se pose de savoir si la composition des gouttes joue un rôle important sur ces phénomènes. La composition des gouttes est prise en compte, dans la plateforme CEDRE par des lois de mélange et un modèle d'évaporation multicomposant implémenté dans le solveur phase dispersée SPARTE.

Cette partie a pour but de caractériser l'effet de l'évaporation multicomposant sur un cas académique, la flamme laminaire diphasique 1D. L'étude s'articule en deux temps : une première étude dans le monocomposant pour valider notre approche par rapport à la littérature. Les effets du diamètre des gouttes et de la richesse totale du mélange sur les vitesses de flamme et les profils de la flamme sont examinés. Ensuite, l'étude est étendue au cas multicomposant. La propagation d'une flamme le long d'un train continu de gouttes bicomposant est alors simulée. Les effets de la composition sur les vitesses de flamme, les profils et la composition des gaz chauds sont analysés.



# Chapitre 2

## Etat de l'art : Flammes diphasiques laminaires

### Sommaire

---

<b>2.1 Introduction</b>	<b>45</b>
2.1.1 Présentation des flammes diphasiques laminaires	45
2.1.2 Structure de la flamme	46
<b>2.2 Combustion de gouttes monocomposant</b>	<b>47</b>
2.2.1 Travaux expérimentaux	47
2.2.2 Travaux théoriques et numériques	49
<b>2.3 Effets du caractère multicomposant du carburant</b>	<b>51</b>
2.3.1 Effets sur la vitesse de flamme monophasique	51
2.3.2 Effets sur le délai d'auto-allumage diphasique	53
<b>2.4 Evaluation des modèles utilisés</b>	<b>55</b>
2.4.1 Modèles de diffusion dans les gouttes	55
2.4.2 Cinétique chimique simplifiée	57
<b>2.5 Conclusion</b>	<b>58</b>

---

## 2.1 Introduction

### 2.1.1 Présentation des flammes diphasiques laminaires

Les flammes diphasiques laminaires peuvent être classées en deux catégories, comme le préconisent Williams [124] et Boileau [16] : les flammes homogènes et les flammes hétérogènes. Ce classement s'effectue en comparant le temps convectif  $\tau_{conv}$  et le temps d'évaporation  $\tau_{evap}$  du brouillard. La figure 2.1 représente les différents types de flamme rencontrés. Sur la schéma, la vitesse des gaz frais est l'exacte opposée de la vitesse de flamme  $s_L$  afin d'avoir un front de flamme stationnaire. Le temps convectif a pour valeur  $\tau_{conv} = \frac{\mathcal{L}}{S_L}$ , où  $\mathcal{L}$  est la longueur d'évaporation primaire.

Dans le cas de la flamme **homogène**, le spray est totalement évaporé avant le front de flamme :  $\tau_{conv} \geq \tau_{evap}$ . Au niveau du front de flamme, le mélange est alors monophasique. Suivant la distribution des gouttes, des hétérogénéités peuvent être créées dans la phase gazeuse, aussi les flammes seront-elles prémélangées ou partiellement prémélangées.

A l'inverse, lorsque le temps de convection est plus petit que le temps d'évaporation ( $\tau_{conv} \leq \tau_{evap}$ ), le spray n'est pas complètement évaporé en arrivant au front de flamme, qui rencontre alors un écoulement diphasique. La flamme est alors dite **hétérogène**. Cela

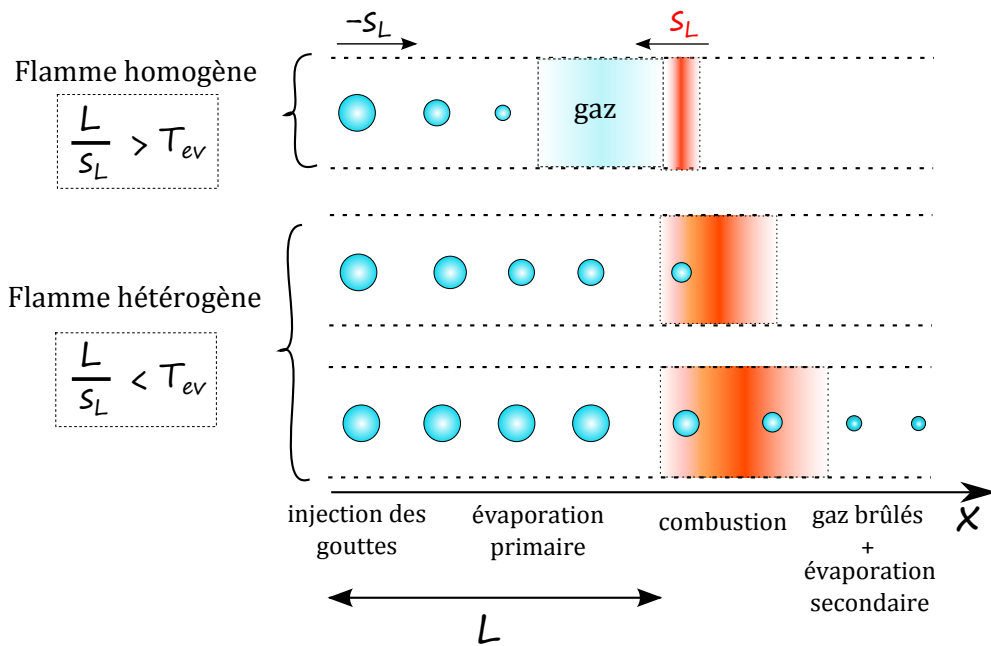


FIGURE 2.1 – Schéma des différents types de flammes laminaires diphasiques.

arrive notamment lorsque le temps d'évaporation est infiniment long, c'est à dire lorsque les gaz frais sont saturés.

Les flammes planes laminaires diphasiques hétérogènes se divisent encore en deux catégories, d'après [37] : les flammes ancrées et les flammes saturées.

**Une flamme ancrée**, correspondant au cas où les gaz frais ne sont pas saturés en carburant, est caractérisée par un processus d'évaporation non figé en amont de la flamme. L'évaporation se produit depuis la position d'entrée des gouttes jusqu'au front de flamme. La vitesse de flamme ne dépend alors plus seulement des caractéristiques du mélange diphasique, mais également de ce que Neophytou [88] appelle la longueur primaire d'évaporation. Cette longueur correspond à la distance entre l'entrée des gouttes dans le domaine de calcul et le front de flamme. A même vitesse des gouttes, une grande longueur induit un temps d'évaporation plus long, donc une richesse gazeuse au front de flamme plus importante, ce qui a un effet direct sur la vitesse de propagation de la flamme.

**Une flamme saturée** se rencontre lorsque le processus d'évaporation des gouttes injectées est figé. C'est notamment le cas lorsque le mélange est froid ou lorsque le carburant est peu volatil. De ce fait, l'état thermodynamique du mélange diphasique en amont de la flamme est à l'équilibre. En arrivant au niveau du front de flamme, les gaz chauds réchauffent les gouttes qui, en s'évaporant, alimentent la flamme en carburant gazeux. Dans ce cas, la vitesse de flamme ne dépend que des caractéristiques du mélange, d'où une définition claire de la vitesse de flamme.

### 2.1.2 Structure de la flamme

Les modifications sur la structure de flamme apportées par le caractère diphasique de l'écoulement se remarquent d'autant plus que le diamètre des gouttes est grand. La figure 2.2 est un schéma de la structure d'une flamme diphasique.

Les cinq zones caractéristiques de la structure de flamme diphasique se retrouvent :

1. évaporation primaire : les gouttes s'évaporent de façon à être à l'équilibre avec le gaz, en le saturant éventuellement ;
2. préchauffage : en approchant du front de flamme, la chaleur diffusée par le gaz chauffent les gouttes jusque la température des gouttes  $T_l$  atteigne la température d'ébullition  $T_{eb}$  ;
3. évaporation : après une augmentation légère du diamètre due à la dilatation des gouttes, chauffées, celles-ci s'évaporent avec un débit  $\dot{m}_l$  et alimentent la zone de réaction en carburant ;
4. zone de réaction : le carburant gazeux et l'oxydant réagissent. Le taux de réaction du carburant est  $\dot{\omega}_F$  ;
5. évaporation secondaire : les plus grosses gouttes continuent à s'évaporer dans les gaz chauds, après la zone de réaction.

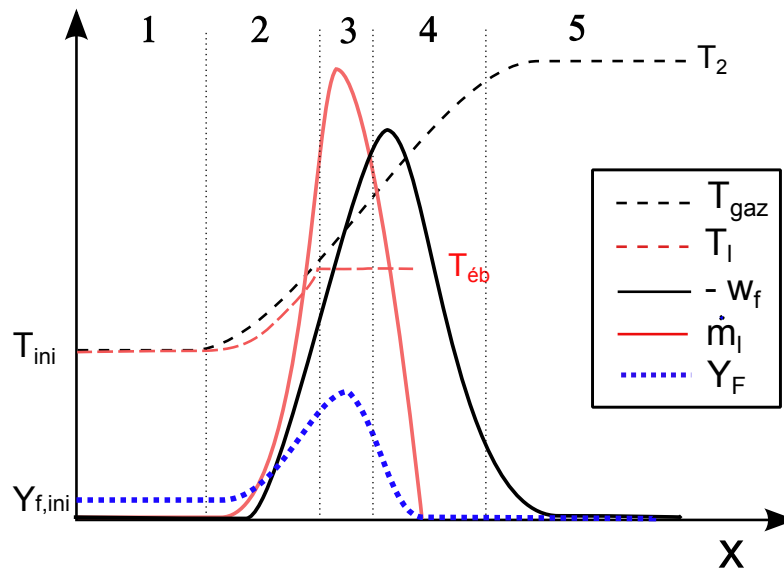


FIGURE 2.2 – Schéma d'une flamme laminaire 1D diphasique à saturation.

## 2.2 Combustion de gouttes monocomposant

Les flammes diphasiques laminares ont été étudiées expérimentalement et numériquement.

### 2.2.1 Travaux expérimentaux

Les flammes diphasiques monocomposant ont été étudiées expérimentalement par Hayashi [57] [58]. Le brouillard monodisperse de gouttes est composé d'éthanol ou de n-octane. La présence de gouttes semble avoir plus d'influence sur la vitesse de flamme des mélanges à réaction rapide (*ie* lorsque la vitesse de flamme est élevée) que sur les mélanges à réaction lente. Les auteurs constatent que pour des gouttes de grand diamètre, en régime riche, la vitesse de flamme diphasique peut être supérieure à la vitesse de flamme

monophasique à la même richesse totale. D'après les auteurs, les gouttes continueraient alors à s'évaporer dans le front de flamme, ce qui augmenterait la surface effective du front de flamme et ainsi, pensent-ils, la vitesse de flamme. De plus, Hayashi et al. [57] précisent qu'en régime pauvre, la présence de gouttes diminue la vitesse de flamme. Enfin, une expression du diamètre critique séparant les structures de flammes homogènes des structures hétérogènes est proposée.

La propagation de flamme dans un brouillard a également été étudiée par Ballal et Lefebvre [11]. A partir de l'analyse des temps de coïncement (ou *quenching*), d'évaporation et de combustion, les auteurs obtiennent une expression générale de la vitesse de flamme diphasique en fonction de la vitesse de flamme monophasique (voir Eq. 2.5). Le raisonnement est détaillé ici. Le temps de coïncement  $\tau_q^*$  compare les pertes par diffusion thermique dans le front de flamme au dégagement de chaleur. Pour une flamme diphasique, le temps de coïncement est égal au temps chimique :

$$\tau_c = \tau_q^* = \frac{D_{th}}{s_{L,0}^2} \quad (2.1)$$

où  $D_{th}$  est la diffusivité thermique, et  $s_{L,0}$  la vitesse de flamme laminaire monophasique.

Pour une flamme diphasique la même expression du temps de coïncement est retrouvée, cette fois avec la vitesse de flamme laminaire diphasique  $s_L$  :

$$\tau_q = \frac{D_{th}}{s_L^2} \quad (2.2)$$

Par ailleurs, le temps de coïncement pour la flamme diphasique est défini comme la somme du temps d'évaporation  $\tau_{ev}$  et du temps chimique  $\tau_c$  :

$$\tau_q = \tau_{ev} + \tau_c \quad (2.3)$$

En simplifiant l'équation, cela devient :

$$s_L = \left( \frac{\tau_{ev}}{D_{th}} + \frac{1}{s_{L,0}^2} \right)^{-\frac{1}{2}} \quad (2.4)$$

En exprimant le temps d'évaporation  $\tau_{ev}$  grâce à la loi du  $d^2$  basée sur le nombre de Spalding massique, Ballal et Lefebvre définissent la vitesse de flamme diphasique en fonction de la vitesse de flamme monophasique et des propriétés du fluide et de l'écoulement par la relation :

$$s_L = D_{th} \left[ \frac{C_3^3(1-\Omega)\rho_L D_{32}^2}{8C_1\rho_g \ln(1+B_M)} + \frac{D_{th}^2}{s_{L,0}^2} \right]^{-0.5} \quad (2.5)$$

où  $D_{32}$  est le diamètre moyen de Sauter,  $B_M$  le nombre de Spalding massique,  $D_{th}$  et  $\rho_g$  sont respectivement la diffusion thermique et la densité du gaz à  $T = 1200$  K et  $\Omega$  est la part de carburant initialement sous forme gazeuse.  $C_1$  et  $C_3$  sont des coefficients permettant de prendre en compte le caractère polydisperse des gouttes qui sont égaux à 1 dans le cas monodisperse. Enfin, on peut définir  $\lambda_{eff} = \frac{8D_{th}\rho_g}{\rho_L} \ln(1+B_M)$ . Myers et Lefebvre [86] ont évalué  $\lambda_{eff}$  sous de nombreuses conditions, et ont déterminé que  $\lambda_{eff}^{n-decane} = 0,38 \text{ mm}^2/\text{s}$  à  $T = 1200$  K.

Cette relation a été validée par comparaison à des résultats expérimentaux pour différents combustibles liquides, pour une large gamme de diamètres moyens (de  $30 \mu\text{m}$  à



150  $\mu\text{m}$ ). Ainsi, la figure 2.3 :a) montre les résultats expérimentaux et théoriques de l'étude de l'influence de  $\Omega$ , la part de carburant déjà sous forme gazeuse, sur la vitesse de flamme pour du diesel. La figure 2.3 :b) montre les vitesses de flammes obtenues par application de la relation (2.5) à des flammes dont le carburant n-décane est injecté sous formes de gouttes de diamètre variable et pour différentes richesses. L'évolution de la vitesse de flamme correspond aux observations expérimentales de Ballal et Lefebvre [11] et de Hayashi [57][58] lorsque la richesse du mélange est en dessous de la stœchiométrie. En revanche, les observations expérimentales de Hayashi ne sont pas retrouvées pour des mélanges riches.

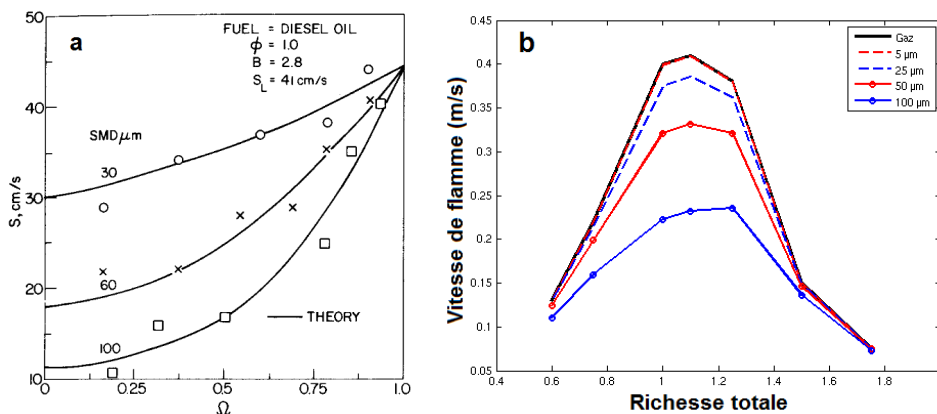


FIGURE 2.3 – a) Etude de l'influence de la part de carburant déjà gazeux sur la vitesse de flamme diphasique pour du diesel, comparaison des valeurs théoriques aux valeurs expérimentales, d'après Ballal et Lefebvre [11]. b) Application de la formule de Ballal et Lefebvre pour  $\Omega = 0,117$  : vitesse de flamme diphasique en fonction de la richesse, pour plusieurs diamètres de gouttes de n-décane.

Enfin, les mesures expérimentales des brouillards de gouttes en suspension par Atzler [9] montrent que, en régime pauvre, une oscillation des flammes peut être observée. Ce phénomène a été attribué aux inhomogénéités de la richesse gazeuse.

## 2.2.2 Travaux théoriques et numériques

Parallèlement aux travaux expérimentaux, des approches théoriques et numériques ont été mises en place afin d'étudier les flammes diphasiques laminaires monodimensionnelles. Cette section présente les principaux résultats obtenus tant pour les phénomènes de pulsation de la flamme que pour la vitesse de propagation.

### 2.2.2.1 Approche théorique

Une approche asymptotique de la flamme hétérogène a été développée par Lin [77][78], pour des mélanges dont la teneur en carburant liquide est faible. Les gouttes sont représentées comme des perturbations dans la flamme gazeuse. Les auteurs retrouvent les observations expérimentales suivantes : en régime pauvre, la présence de la phase dispersée réduit la vitesse de flamme par rapport au cas monophasique à même richesse globale. En revanche en régime riche, pour des diamètres de gouttes suffisants, la vitesse de flamme diphasique est supérieure à la vitesse de flamme monophasique à la même richesse totale du mélange.

La propagation d'une flamme plane laminaire prémélangée dans un brouillard polydisperse a été étudiée par Silvermann et Greenberg [110] à l'aide d'une méthode sectionnelle. Elle prend en compte les effets de coalescence et le caractère polydisperse : le spray est divisé en sections contenant chacune une classe de goutte. Les auteurs montrent que, en combustion riche, les gouttes peuvent continuer à s'évaporer après la zone de réaction. La zone des gaz brûlés est alors légèrement refroidie. En combustion pauvre, les gouttes traversant le front de flamme peuvent brûler soit individuellement, soit sous forme de groupes de gouttes (également appelés *clusters*). Greenberg a également montré que la perte de chaleur due à l'évaporation des gouttes agit sur la stabilité des flammes. Dans certaines conditions, une flamme diphasique peut être instable, alors que la flamme monophasique correspondante est stable.

### 2.2.2.2 Simulations numériques

**Phénomènes de pulsation** Cannevière [24] a réalisé des simulations numériques directes (DNS) monodimensionnelles prenant en compte la dilatation des gaz, pour du méthane, de l'éthyne et du propane. Des pulsations sont mises en évidence : elles sont simples lorsque le temps d'évaporation est très grand par rapport au temps caractéristique de combustion ( $\tau_{ev} \gg \tau_c$ ), ou doubles lorsque ces grandeurs sont comparables ( $\tau_{ev} \approx \tau_c$ ). La figure 2.4 montre les pulsations observées sur le taux de réaction maximal au cours du temps. Cannevière explique que le premier pic, noté B, est corrélé à un fort taux d'évaporation tandis que le second pic, noté D, correspond à un faible taux d'évaporation maximal car la flamme s'est éloignée du front d'évaporation.

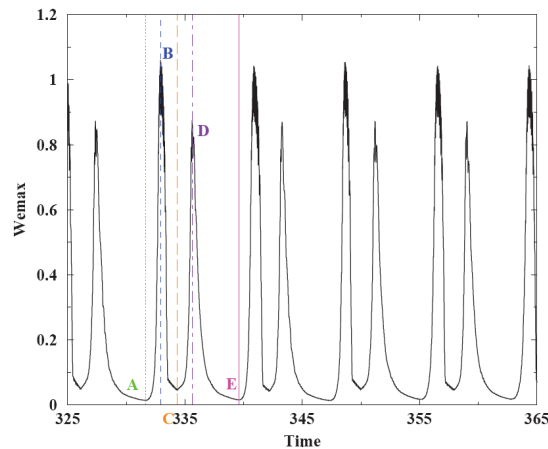


FIGURE 2.4 – Evolution temporelle du taux de réaction maximal de la flamme diphasique à richesse totale  $\Phi_0 = 1,48$ , d'après Cannevière [24].

Suard [113] a également réalisé des simulations numériques de flammes diphasiques dans un milieu pauvre en carburant, mettant en évidence un mode de propagation pulsant. Il met en évidence le rôle du nombre de Damköhler dans l'apparition des pulsations.

**Vitesse de propagation de la flamme** Les flammes de spray ont également été calculées par Ben Dakhlija [37]. L'auteur a utilisé une chimie complexe. Il retrouve les résultats de Versaavel [120] : déformation de la courbe de vitesse de flamme  $s_L(\Phi)$  et extension des limites d'inflammabilité en régime de combustion riche. Ben Dakhlija montre par ailleurs

que le diamètre des gouttes modifie l'épaisseur de flamme par rapport au cas monophasique.

La propagation des flammes laminaires dans un mélange diphasique est étudiée dans le cas monodimensionnel par Boileau [16] et Senoner [107], pour du *JP-16* et du kérosène dont la combustion est décrite par une cinétique globale. L'évolution de la vitesse de flamme diphasique par rapport à la vitesse de flamme monophasique correspond à la formule théorique donnée par Ballal et Lefebvre (Eq. 2.5). Qui plus est, des nombres adimensionnels (Damköhler d'évaporation) rapportant notamment l'épaisseur d'évaporation à l'épaisseur de flamme sont introduits afin de décrire la structure de la flamme.

Neophytou [88] étudie la propagation d'une flamme laminaire au travers de gouttes de n-heptane ou de n-décane. Il utilise pour cela une cinétique détaillée prédisant l'oxydation à haute température et la pyrolyse. Les effets de la volatilité des composants sont étudiés. L'influence de la longueur d'évaporation primaire des gouttes sur la vitesse de flamme est mise en évidence pour des gouttes de n-heptane (voir Fig 2.5 :a). La figure 2.5 :b) montre que pour du n-décane, la richesse effective est peu affectée par la longueur d'évaporation primaire. La formule théorique de Ballal et Lefebvre 2.5 décrit correctement, en combustion pauvre, les évolutions de vitesse de flamme diphasique en fonction du diamètre des gouttes (voir Fig 2.5 :a) et c) ). En revanche, l'évolution de la vitesse de flamme en fonction de la richesse totale et du diamètre, présentée figure 2.5 :d), montre que la formule semi-empirique de Ballal et Lefebvre (représentée sur la figure 2.3) est erronée en combustion riche. Neophytou montre par ailleurs que le caractère diphasique des flammes permet de repousser les limites d'inflammabilité, c'est à dire que les plus grosses gouttes ( $d = 100 \mu\text{m}$ ) peuvent brûler pour une richesse totale supérieure à la limite d'inflammabilité gazeuse. Enfin, les simulations montrent que la vitesse de flamme laminaire gazeuse maximale sur la plage de richesse peut être dépassée dans le cas diphasique. Neophytou précise que cela se produit lorsqu'apparaît un phénomène de pyrolyse dû à un excès de particules dans les gaz chauds.

**Flamme épaissie pour les écoulement diphasiques** Boileau [16] et Senoner [107] se sont intéressés aux performances du modèle de flamme épaissie dans le cas d'une combustion diphasique. Ils mettent en évidence qu'une correction par le facteur d'épaississement  $F$ , décrit dans la partie 1.2.5.3, du terme de traînée d'une goutte et du terme source d'évaporation semble nécessaire. Sans cela les gouttes rencontrent un front de flamme épais, et leur temps de résidence est plus long qu'il ne l'est en réalité. Par exemple, la figure 2.6 montre que la vitesse de flamme dérive lorsque l'on augmente le facteur d'épaississement.

## 2.3 Effets du caractère multicomposant du carburant

La combustion de gouttes multicomposant offre une littérature moins fournie que le cas monocomposant. Les effets du caractère multicomposant du carburant peuvent être observés sur les vitesses de flamme ainsi que sur les délais d'auto-allumage, tant pour des mélanges monophasiques que diphasiques.

### 2.3.1 Effets sur la vitesse de flamme monophasique

Des travaux expérimentaux menés dans une chambre à volume constant, et des calculs monophasiques utilisant une cinétique chimique détaillée et le logiciel PREMIX intégrant la librairie CHEMKIN ont été faits par Byun [23]. Celui-ci a ainsi établi une banque de

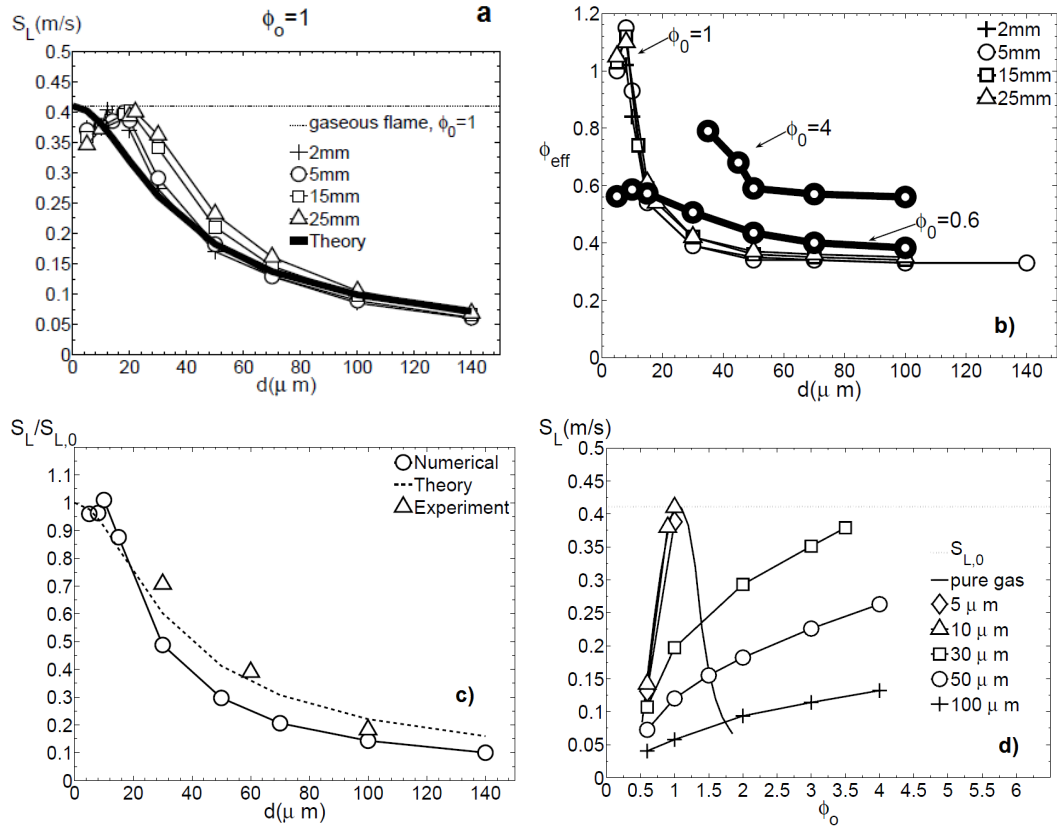


FIGURE 2.5 – a) Vitesse de flamme diphasique pour du n-heptane, influence de la longueur primaire d'évaporation, b) Richesse effective dans le front de flamme pour du n-décane, en fonction du diamètre initial des gouttes, pour différentes richesses et longueurs d'évaporation primaire, c) Vitesse de flamme en fonction du diamètre initial des gouttes, pour du n-décane. Comparaison à la formule théorique de Ballal et Lefebvre et à des valeurs expérimentales, d'après Neophytou [88]. d) Vitesse de flamme diphasique en fonction de la richesse totale et du diamètre des gouttes, pour du n-décane et une longueur d'évaporation primaire  $l = 5$  mm.

données parmi lesquelles figure la vitesse de flamme pour des mélanges gazeux, pour des pressions allant de 2 Pa à 40 Pa, des températures comprises entre 450 K et 660 K et une plage de richesse allant de  $\Phi = 0,7$  à  $\Phi = 1,5$ . Trois espèces ont été étudiées : le n-heptane, l'éthanol et l'iso-octane, ainsi que divers mélanges (exemple : 50% de n-heptane + 50% d'iso-octane).

Byun s'intéresse à une corrélation de Mallard et Le Chatelier [68] permettant d'approcher la vitesse de flamme selon :

$$s_L = \frac{\lambda}{\rho C_p} \frac{T_f - T_{ig}}{T_{ig} - T_0} \frac{1}{\delta_r} \quad (2.6)$$

où  $\delta_r$  est la longueur de la zone de réaction,  $T_0$  la température des gaz frais,  $T_{ig}$  la température d'allumage, et  $T_f$  est la température de flamme. L'estimation de la longueur de la

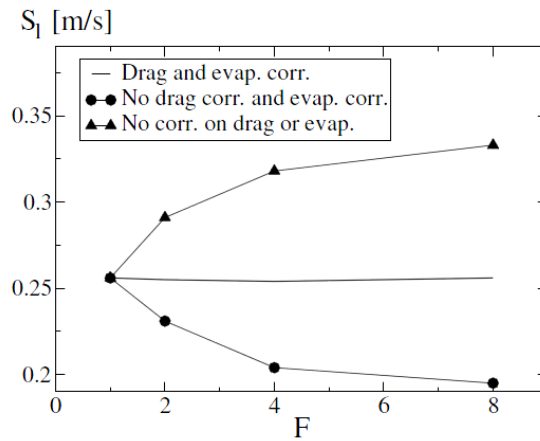


FIGURE 2.6 – Vitesse de flamme en fonction du facteur d'épaississement  $F$ , pour un modèle de flamme épaissie. Comparaison pour différentes finesses de maillage des modèles : épaississement + correction de l'évaporation et de la trainée , épaississement + correction de l'évaporation, épaississement sans correction sur les termes diphasiques, d'après Senoner[107].

zone de réaction amène à la corrélation suivante :

$$s_L = \sqrt{\frac{\lambda}{\rho C_p} \frac{T_f - T_{ig}}{T_{ig} - T_0} \exp\left[-\frac{Ea}{RT_f}\right]} P^{n-1} \quad (2.7)$$

où  $n$  dépend de la réaction chimique. A partir de l'équation 2.7, Byun propose une nouvelle corrélation des mélanges de n-heptane et d'iso-octane :

$$s_L = s_{L,0} \alpha^{k_1} \left(\frac{\lambda}{\rho C_p} \frac{T_f - T_{ig}}{T_{ig} - T_0}\right)^{k_2} k_3 \exp\left[-\frac{Ea}{RT_f}\right] P^{k_4} \quad (2.8)$$

où  $s_{L,0} = 24$  cm/s, et où les paramètres  $k_i$  et  $Ea$  sont définis afin de retrouver les vitesses de flamme expérimentales. La température  $T_{ig}$  est définie par la corrélation suivante :

$$T_{ig}(K) = 695.72 + 0.24097 N_{octane} \quad (2.9)$$

où  $N_{octane}$  est l'indice d'octane du carburant.

Après vérification de la pertinence de cette approximation (voir Fig. 2.7), Byun présente (Fig. 2.8) les vitesses de flamme monophasique pour divers rapports de composition entre le n-heptane et l'iso-octane. Les résultats montrent que la vitesse de flamme laminaire d'un mélange composé de deux espèces évolue linéairement entre les vitesses de flamme des deux espèces pures.

### 2.3.2 Effets sur le délai d'auto-allumage diphasique

Lorsque le carburant est composé de plusieurs espèces, la vitesse de flamme ainsi que le délai d'auto-allumage sont modifiés. Dans le cas diphasique, des études numériques et expérimentales ont été menées pour définir l'influence de l'aspect multicomposant du carburant sur le délai d'auto-allumage.

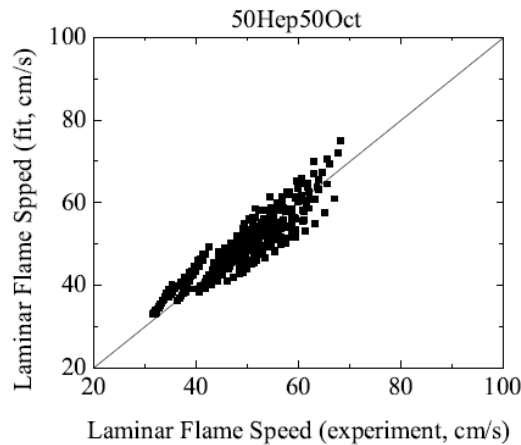


FIGURE 2.7 – Approximation de la vitesse de flamme laminaire pour un mélange monophasique bicomposant : 50% iso-octane, 50% n-heptane, d'après Byun [23].

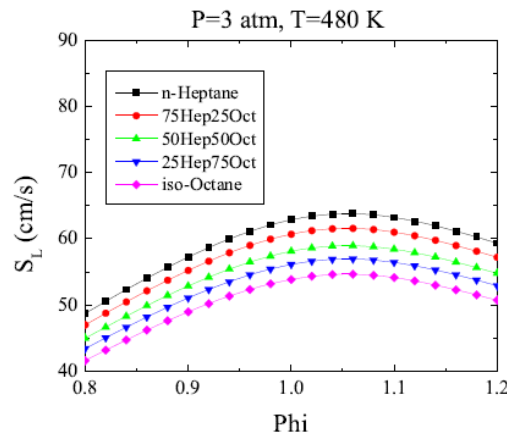


FIGURE 2.8 – Vitesse de flamme laminaire pour l'iso-octane, le n-heptane et divers mélanges, d'après Byun [23].

### 2.3.2.1 Etude numérique

Une cinétique détaillée reste lourde et coûteuse dans le cas d'une configuration complexe. Il est alors intéressant d'étudier une cinétique globale pour un cas où le carburant est représenté par deux espèces. Aggarwal [3] a proposé une cinétique globale bicomposant dans laquelle les deux espèces forment un pseudocomposant qui réagit avec l'oxydant. Les termes sources, calculés pour le pseudocomposant, sont ensuite répartis de façon conservative et attribués aux composants du carburant. De plus amples détails sont donnés dans la partie 4.2.2.

Aggarwal a étudié l'effet de l'aspect multicomposant des gouttes sur les délais d'auto-allumage. La figure 2.9 montre l'évolution du délai d'auto-allumage en fonction de la fraction massique d'hexane ou de décane dans les gouttes. L'auto-allumage se produit plus rapidement lorsque le carburant est composé de n-hexane pure. L'ajout d'un peu de n-décane ne modifie quasiment pas le délai. A contrario, lorsque le n-décane est majoritaire, l'ajout d'un peu de composant volatil permet de réduire significativement le délai d'auto-

allumage.

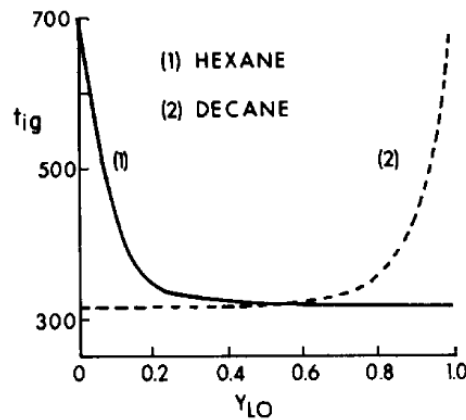


FIGURE 2.9 – Délai d'autoallumage normalisé par le pas de temps ( $\Delta t = 5 \mu s$ ) en fonction de la fraction massique de n-hexane ou de n-decane dans les gouttes, de diamètre  $d = 100 \mu m$ , d'après Aggarwal [3].

### 2.3.2.2 Etude expérimentale

Yang et Yukao [125] ont mené une étude expérimentale sur l'auto-allumage de brouillards de gouttes mono et bicomposant. Les espèces chimiques étudiées sont le n-heptane, l'iso-octane, le n-dodécane et le n-hexadécane. Les tailles de gouttes varient entre  $300 \mu m$  et  $1500 \mu m$ . Les auteurs précisent que l'auto-allumage des plus petites gouttes est contrôlé par la réaction chimique : le carburant liquide s'évapore facilement et c'est alors la réactivité des espèces qui contrôle la combustion. Dans le cas où les gouttes ont un diamètre important, l'auto-allumage est contrôlé par le processus d'évaporation : l'évaporation étant plus lente, l'espèce la plus volatile s'évapore et brûle. Dans ce dernier cas, la composition des gouttes a une grande influence sur le délai d'auto-allumage : plus la part de composant peu volatil est importante, plus le délai d'auto-allumage est grand.

## 2.4 Evaluation des modèles utilisés

L'utilisation de modèles plus ou moins détaillés, présentés dans le chapitre 1, peut introduire des approximations. Cette partie présente les résultats obtenus en particulier par les modèles pour l'évaporation des gouttes et pour la combustion.

### 2.4.1 Modèles de diffusion dans les gouttes

Le choix du modèle de diffusion dans la goutte a des effets sur son temps d'évaporation. Les performances des différents modèles présentés dans la partie 1.4.3 ont été comparés entre autres par Abramzon et Sirignano [2] (voir figure 2.10).

Les résultats montrent clairement que le modèle à diffusion infinie sous-estime le délai d'évaporation de la goutte, tandis que le modèle à diffusion limitée surestime ce délai. Au début de l'évaporation, la température de surface augmente lentement dans le cas de la diffusion infinie, comparées au modèle 1, en raison de la distribution de la chaleur au sein

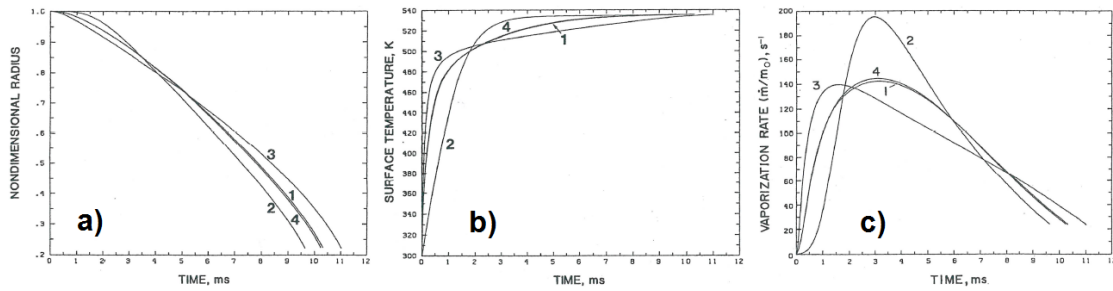


FIGURE 2.10 – Comparaison des modèles de diffusion pour l'évaporation d'une goutte de n-décane, impact sur l'évolution temporelle du diamètre (a), de la température de surface (b) et le débit des gouttes (c), pour différents modèles : 1/ Résolution complète de l'écoulement et de la thermique, 2/ Modèle à diffusion infinie, 3/ Modèle à diffusion limitée, 4/ Modèle à diffusion effective, d'après Abramzon et Sirignano [2].

de la goutte. Une fois que la température d'équilibre est atteinte, l'énergie reçue du gaz est principalement dédiée à l'évaporation. Le flux de masse évaporée est alors très élevé. Le modèle à diffusion limitée permet un échauffement rapide de la température de surface, amenant à un fort débit initial. Après ces premiers instants, la chaleur arrive lentement au centre de la goutte, et il en reste peu pour alimenter le processus d'évaporation. La modélisation des effets provoqués par l'écoulement au sein de la goutte permet de mieux répartir la chaleur entre la surface et le cœur de la goutte. Ainsi, l'évaporation de la goutte est mieux décrite avec le modèle à diffusion effective.

Par ailleurs, lorsque les gouttes rencontrent des conditions instationnaires où la température varie brusquement, une sous-estimation de la température de surface par le modèle de conduction infinie entraîne une sous-estimation du taux d'évaporation. Les délais d'évaporation en combustion peuvent donc être sur-estimés. Cela est notamment illustré par Doué [40], qui a calculé le délai d'auto-allumage d'un brouillard de gouttes multicomposant (n-hexane et n-décane) à température  $T_{gaz} = 1000$  K, pour une pression ambiante  $P = 10$  atm (voir Fig. 2.11). Il a comparé les modèles suivants :

- Diffusion infinie,
- Diffusion effective,
- Diffusion effective + température uniforme,
- Diffusion effective + composition uniforme.

Les résultats montrent que le délai d'auto-allumage est plus faible lorsque le modèle de conduction effective est utilisé. Cela signifie que, contrairement au cas d'évaporation de la goutte simulé par Abramzon et Sirignano, le temps d'évaporation est plus faible pour la conduction effective que pour la conduction infinie.

Les modèles décrivant les gradients de température au sein de la goutte peuvent être étendus afin de prendre en compte les gradients de composition. Les résultats obtenus par Doué et présentés sur la figure 2.11 montrent que la prise en compte des gradients de concentration dans la goutte n'a pas d'impact significatif, tandis que le gradient de température modifie la dynamique d'évaporation.

Enfin, le coût de calcul des modèles modélisant les gradients de température des gouttes est important. Doué [40] a utilisé les modèles à diffusion infinie et à diffusion limitée et a montré que le temps CPU nécessaire était au moins deux fois plus grand dans le cas du modèle à diffusion limitée. Le faible coût du modèle à diffusion infinie en fait un



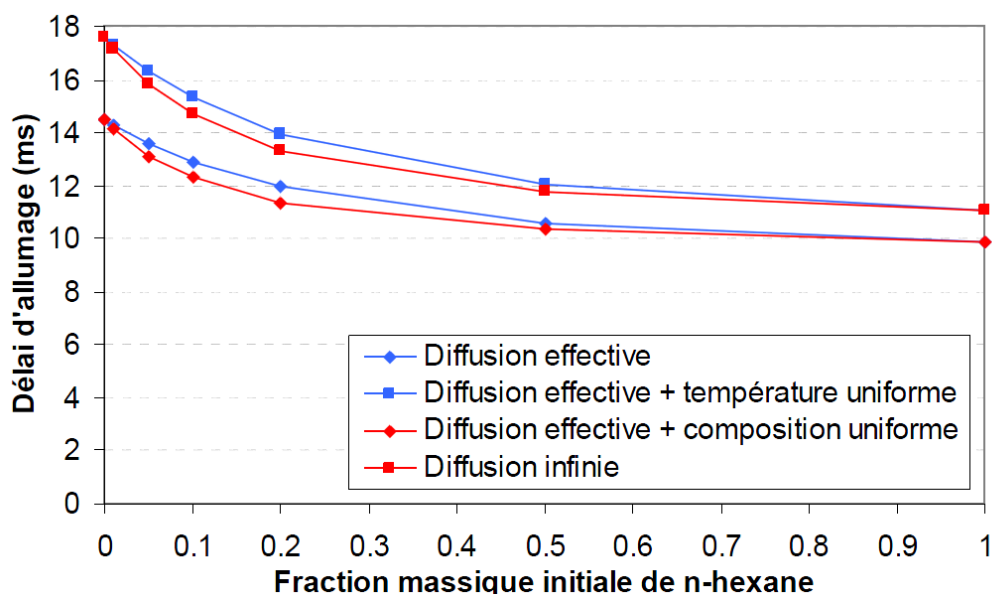


FIGURE 2.11 – Comparaison des modèles de diffusion dans la goutte. Effets sur le délai d’auto-allumage d’un nuage de gouttes en fonction de la fraction massique liquide initiale de n-hexane (mélange n-hexane et n-décane), d’après Doué [40].

excellent compromis d’après Sazhin [105].

## 2.4.2 Cinétique chimique simplifiée

Les travaux exposés précédemment utilisent des cinétiques chimiques différentes. La simplification des schémas cinétiques introduit des erreurs. Nous allons donc présenter les résultats obtenus par ces cinétiques afin de qualifier les différences que nous pourrions observer dans la suite de notre étude.

Senoner [107] a utilisé le schéma à deux étapes pour l’espèce moyenne  $C_{10}H_{20}$ , proposé par Franzelli [46] et présenté dans la partie 1.3.2. Franzelli a comparé la cinétique aux résultats expérimentaux ainsi qu’au mécanisme détaillé de Dagaut [35] (209 espèces, 1673 réactions) et au mécanisme semi-simplifié de Luche [81] (91 espèces, 991 réactions). La figure 2.12 présente les résultats en terme de vitesse de propagation de la flamme pour des conditions atmosphériques ( $T = 300\text{ K}$  et  $P = P_{atm}$ ), et la figure 2.13 présente les délais d’auto-allumage obtenus avec cette cinétique réduite pour une pression  $P = 10\text{ atm}$ . L’accord est bon avec le schéma détaillé de Luche et la diminution de la vitesse de flamme en combustion riche est retrouvée, mais les vitesses de flamme sont légèrement surestimées par rapport au mécanisme détaillé de Dagaut. En monophasique, la cinétique simplifiée permet néanmoins de retrouver des délais d’auto-allumage corrects, qui peuvent également être comparés à la formule empirique proposée par Horning [59]. L’équation 2.10 permet de ramener à la même échelle de pression et de température les résultats expérimentaux :

$$\tau_{ign} = 9,40 \cdot 10^{-6} P^{-0.55} X_{O_2}^{-0.63} C^{-0.5} e^{46.55/RT} \quad (2.10)$$

où  $C$  est le nombre d’atomes de carbone de l’alcane,  $X_{O_2}^{-0.63}$  est la fraction molaire de  $O_2$ , l’énergie d’activation  $Ea$  est exprimée en cal/mol,  $P$  est en atmosphères et  $T$  en Kelvin. Le délai d’auto-allumage  $\tau_{ign}$  est alors exprimé en microsecondes ( $\mu s$ ).

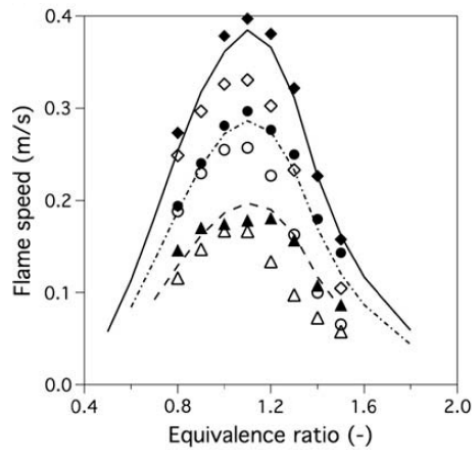


FIGURE 2.12 – Vitesse de flamme laminaire en fonction de la richesse à température  $T = 300$  K. Comparaison des cinétiques de Franzelli (—, --, ---), de Luche ( $\blacklozenge$ ,  $\bullet$ ,  $\blacktriangle$ ), et de Dagaut ( $\diamond$ ,  $\circ$ ,  $\triangle$ ), pour des pressions respectives de  $P = 1, 3, 12$  atm, d'après Franzelli [46].

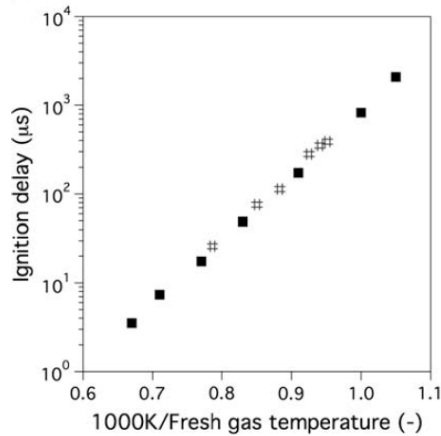


FIGURE 2.13 – Délai d'auto-allumage en fonction de l'inverse de la température, pour une flamme à la stoechiométrie à pression  $P = 10$  atm. Comparaison du mécanisme de Franzelli ( $\blacksquare$ ) aux valeurs expérimentales de Dagaut ( $\#$ ), d'après Franzelli [46].

## 2.5 Conclusion

Les flammes laminaires diphasiques ont été étudiée théoriquement, expérimentalement et numériquement pour des brouillards et des trains de gouttes. La structure de la flamme est modifiée par l'aspect diphasique : l'évaporation des gouttes influence la fraction massique vue par la flamme, ce qui affecte le taux de consommation du carburant. Cela peut avoir deux conséquences. Tout d'abord, des phénomènes de pulsations peuvent apparaître : le taux d'évaporation des gouttes et le taux de consommation deviennent des phénomènes périodiques. Ensuite, la vitesse de flamme diphasique peut, selon le diamètre et la composition des gouttes, être plus ou moins grande que la vitesse de flamme monophasique à la même richesse. Le caractère multicomposant du carburant affecte la vitesse de flamme et les délais d'auto-allumage. L'ajout d'un peu de carburant volatil permet de diminuer considérablement le délai d'auto-allumage d'un mélange diphasique. Enfin, la

---

problématique de la description de la cinétique chimique multicomposant est soulevée.



# Chapitre 3

## Flammes diphasiques laminaires monocomposant

### Sommaire

---

<b>3.1 Introduction et définitions</b> . . . . .	<b>61</b>
3.1.1 Richesses du mélange . . . . .	61
3.1.2 Vitesse de flamme . . . . .	64
3.1.3 Epaisseurs caractéristiques . . . . .	64
<b>3.2 Mise en place du calcul</b> . . . . .	<b>65</b>
3.2.1 Domaine de calcul . . . . .	65
3.2.2 Configuration de l'écoulement . . . . .	65
3.2.3 Conditions de saturation . . . . .	66
3.2.4 Modèles physiques . . . . .	66
3.2.5 Etudes numériques . . . . .	66
<b>3.3 Étude paramétrique</b> . . . . .	<b>67</b>
3.3.1 Profils de la flamme . . . . .	67
3.3.2 Évolution de la vitesse de flamme . . . . .	72
3.3.3 Évolution de la richesse effective . . . . .	76
<b>3.4 Conclusion</b> . . . . .	<b>76</b>

---

### 3.1 Introduction et définitions

Le cas de la flamme laminaire en diphasique monocomposant est étudié pour comprendre les effets de l'évaporation sur la combustion dans un cas académique et valider l'approche avec le code CEDRE, par rapport à la littérature.

#### 3.1.1 Richesses du mélange

Dans le cas de la flamme diphasique, plusieurs richesses peuvent être définies, aussi est-il important de bien les préciser.

### 3.1.1.1 Richesse gazeuse

La richesse gazeuse est définie à partir des fractions massiques gazeuses du carburant et du comburant. Elle est identique au cas d'une flamme de prémélange.

$$\Phi_g = \frac{\frac{Y_F}{Y_{Ox}}}{\left(\frac{Y_F}{Y_{Ox}}\right)_{stoch.}} = s \frac{Y_F}{Y_{Ox}} \quad (3.1)$$

où  $F = Fuel$ ,  $Ox = Oxydant$  et  $s$  est appelé le rapport stœchiométrique.

Ainsi, à partir de la fraction massique de carburant dans le gaz saturé, on peut connaître la richesse gazeuse du mélange de gaz frais à l'instant initial, et aux limites :

$$\Phi_g^{sat} = s \frac{Y_{F,g}^{sat}}{Y_{Ox}^{sat}} \quad (3.2)$$

### 3.1.1.2 Richesse liquide

La richesse liquide peut se définir à partir de la quantité de carburant liquide, par rapport à la quantité d'oxydant présente dans le mélange.

$$\Phi_{liq} = s \frac{m_{F,l}}{m_{Ox}} = s \frac{\rho_l \alpha_l}{Y_{Ox} \rho_g} \quad (3.3)$$

où  $\rho_l$  et  $\alpha_l$  sont respectivement la masse volumique et la fraction volumique des gouttes et  $\rho_g$  la masse volumique du mélange gazeux.

### 3.1.1.3 Richesse globale

La richesse globale du mélange multiphasique est définie par le rapport de masse totale de carburant sur celle de l'oxydant. Elle correspond ainsi à la somme de la richesse gazeuse et de la richesse liquide.

$$\Phi_0 = \Phi_g + \Phi_{liq} \quad (3.4)$$

### 3.1.1.4 Richesse effective

Dans le cas de la flamme diphasique, cette nouvelle notion est introduite afin de pouvoir se ramener à un cas monophasique. La richesse effective permet de définir localement la richesse gazeuse *si la combustion n'avait pas été effectuée*. Elle dépend donc directement de la quantité de carburant évaporée. La définition de la richesse effective demande l'introduction de nouvelles notions, en particulier d'un traceur de mélange.

**Définition d'un traceur de mélange** Le traceur de mélange  $Z$  est introduit. Un traceur de mélange est un scalaire passif qui présente la particularité de rester constant pour une flamme monophasique prémélangée.

Lorsqu'une cinétique chimique à une étape est mise en œuvre, la variable de Zel'dovitch est généralement utilisée :

$$Z_{FO} = sY_F - Y_O \quad (3.5)$$

Le scalaire passif peut également être normalisé :

$$Z = \frac{Z_{FO} - Z_{FO}^O}{Z_{FO}^F - Z_{FO}^O} \quad (3.6)$$

où  $Z_{FO}^i$  est égal à la valeur de  $Z_{FO}$  dans le milieu  $i$  (carburant pur ou oxydant pur).

Lorsque la cinétique chimique est décrite par plusieurs réactions, la variable de Zel'dovich n'est plus utilisable, car elle suppose que le dioxygène ne réagit qu'avec le carburant F. Un nouveau scalaire passif a donc été élaboré et intégré dans CEDRE par Dorey et Bertier [13]. La construction de ce scalaire passif est présenté dans ce paragraphe.

On définit la fraction massique d'élément, c'est à dire d'atomes :

$$Y_l = \frac{m_l}{m} \quad \text{avec } l \in \{C, H, O, N\} \quad (3.7)$$

où  $m_l$  est la masse de l'élément  $l$  et  $m$  est la masse du mélange.  $Y_l$  peut être définie à partir des fractions massiques d'espèces :

$$Y_l = \frac{n_l \mathcal{M}_l}{m} = \frac{1}{m} \sum_k^{N_e} \mu_k^l n_k \mathcal{M}_l = \frac{1}{m} \sum_k^{N_e} \mu_k^l \frac{m_k}{\mathcal{M}_k} \mathcal{M}_l = \sum_k^{N_e} \mu_k^l \frac{\mathcal{M}_l}{\mathcal{M}_k} Y_k \quad (3.8)$$

où  $N_e$  est le nombre d'espèces,  $\mu_k^l$  est le nombre d'atomes  $l$  dans l'espèce  $k$ , et  $\mathcal{M}_k$  est la masse molaire de l'espèce  $k$ . A partir des atomes de carbone, d'hydrogène et d'oxygène, il est possible de définir le scalaire passif normalisé suivant :

$$Z_{CHO} = \frac{\frac{Y_C}{\mu_C \mathcal{M}_C} + \frac{Y_H}{\mu_H \mathcal{M}_H} + \frac{2(Y_O^0 - Y_O)}{\mu_O \mathcal{M}_O}}{\frac{Y_C^0}{\mu_C \mathcal{M}_C} + \frac{Y_H^0}{\mu_H \mathcal{M}_H} + \frac{2Y_O^0}{\mu_O \mathcal{M}_O}} \quad (3.9)$$

$Z_{CHO}$  est une grandeur normalisée, valant 0 dans l'oxydant  $O_2$ , et valant 1 dans le combustible.

**Définition des fractions massiques à partir de la fraction de mélange** Les fractions massiques des réactants pour un mélange ne réagissant pas peuvent être définies comme suit :

$$Y_F = Y_F^0 Z_{CHO} \quad (3.10)$$

$$Y_O = Y_O^0 (1 - Z_{CHO}) \quad (3.11)$$

où  $Y_O^0$  et  $Y_F^0$  sont les fractions massiques avant l'établissement du prémélange. En pratique, pour les flammes diphasiques, on a  $Y_F^0 = 1$  car il n'y a qu'un seul composant dans le kérosène, et  $Y_O^0 = 0.2331$  est la part de dioxygène dans l'air.

A partir de l'expression classique 3.1, on définit donc la richesse effective :

$$\Phi_{eff} = s \frac{Y_F^0 Z_{CHO}}{Y_O^0 (1 - Z_{CHO})} \quad (3.12)$$

Au sein d'une flamme plane laminaire diphasique, cette valeur est donc locale et dépend de l'évaporation des gouttes. Notons que, par la suite, une richesse effective particulière pourra être utilisée pour définir la combustion (voir parties 3.3.2.1 et 4.5.2). Dans ce cas, la valeur rapportée sera celle au point où le taux de dégagement de chaleur  $\dot{\omega}_T$  est maximal.

### 3.1.2 Vitesse de flamme

Dans le cas de la flamme plane laminaire diphasique, Kaufmann [63] a intégré les équations de continuité et de conservation des espèces afin d'obtenir la vitesse de flamme :

$$s_L = \frac{\dot{\Omega}_F}{\rho_u(Y_{F,b} - Y_{F,u}) + \rho_{l,u}\alpha_{l,u}(Y_{F,b} - 1)} \quad (3.13)$$

où  $Y_{F,u}$  et  $Y_{F,b}$  sont les fractions massiques de carburant respectivement dans les gaz frais et dans les gaz brûlés,  $\rho_u$  est la masse volumique des gaz frais,  $\rho_{l,u}$  est la masse volumique des gouttes et  $\alpha_{l,u}$  est la fraction volumique. Enfin,  $\dot{\Omega}_F$  est l'intégrale sur le domaine, de longueur  $L$ , du taux de consommation du carburant :

$$\dot{\Omega}_F = \int_0^L \dot{\omega}_F(x) dx \quad (3.14)$$

La démonstration du cas multicomposant est faite dans la partie 4.1.2. La vitesse de consommation d'une flamme plane laminaire monophasique, d'après Poinot [95], est retrouvée lorsque la fraction volumique  $\alpha_l$  tend vers zéro :

$$s_L^* = \frac{\dot{\Omega}_F}{\rho_1(Y_{F2} - Y_{F1})} \quad (3.15)$$

### 3.1.3 Epaisseurs caractéristiques

Afin de quantifier les propriétés de la flamme par rapport à l'écoulement, plusieurs épaisseurs caractéristiques sont définies.

**Epaisseur de flamme** La définition classique de l'épaisseur de flamme, d'après Poinot [95], se base sur le profil de la température des gaz :

$$\delta_L = \frac{T_2 - T_1}{\max\left(\left|\frac{dT}{dx}\right|\right)} \quad (3.16)$$

**Epaisseur d'évaporation** Boileau [16] a défini l'épaisseur d'évaporation totale comme la somme de l'épaisseur de préchauffage des gouttes et de l'épaisseur de vaporisation pure lorsqu'elles sont à température d'ébullition  $T_{eb}$  :

$$\delta_e = \delta_h + \delta_v = \frac{T_{eb} - T_{l,1}}{\max\left(\left|\frac{dT_l}{dx}\right|\right)} + \frac{d_1^2}{\max\left(\left|\frac{dd^2}{dx}\right|\right)} \quad (3.17)$$

où  $d$  est le diamètre des gouttes, et  $T_{eb}$  est la température d'ébullition.

Cependant, dans le cas multicomposant les différentes espèces du carburant n'ont pas les mêmes propriétés. Ainsi, l'évaporation d'un composant peut commencer alors que le second composant n'a pas encore fini de préchauffer. Afin de pouvoir comparer les résultats des cas monocomposant et multicomposant, la définition de l'épaisseur d'évaporation totale est modifiée. On la prend égale à la longueur nécessaire pour l'évaporation de la goutte à partir de l'abscisse où la température commence à s'élever.



Paramètres	Valeurs
$T$	298 K
$P$	$P_{atm}$
$Y_F^{sat}$	$7,914 \cdot 10^{-4}$
$\Phi^{sat}$	0,117
$\frac{Y_{N_2}^g}{Y_{O_2}^g}$	3,29

TABLE 3.1 – Conditions initiales de la phase gazeuse

## 3.2 Mise en place du calcul

### 3.2.1 Domaine de calcul

Le domaine de calcul est présenté par la figure 3.1. Le pas d'espace vaut  $\Delta x = 0,5 \cdot 10^{-4}$  m afin d'assurer un nombre de mailles suffisant dans le front de flamme et la longueur du domaine de calcul est égale à  $L = 0,02$  m

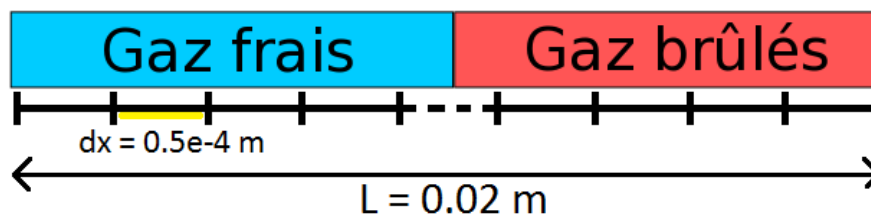


FIGURE 3.1 – Maillage 1D pour la simulation de la flamme plane laminaire diphasique monocomposant.

### 3.2.2 Configuration de l'écoulement

Dans cette étude, on s'intéresse à la combustion des gouttes dans les conditions atmosphériques. La température initiale des gaz, avant saturation, est prise à 300 K et la pression est  $P = P_{atm}$ . Dans ces conditions, les gouttes s'évaporent légèrement jusqu'à saturation du gaz. L'état du gaz à saturation est donné par le tableau 3.1.

Les gouttes sont injectées de façon régulière au niveau de la frontière amont du domaine. Leur vitesse est égale à la vitesse des gaz. La vitesse des gaz est choisie à peu près égale à la vitesse de flamme attendue, afin que la flamme reste dans le domaine numérique.

Pour le cas monocomposant, l'étude paramétrique porte sur l'influence du diamètre de gouttes et la richesse totale du mélange. Les diamètres sont choisis entre  $5 \mu\text{m}$ , afin d'étudier un cas où le temps d'évaporation est faible, et  $100 \mu\text{m}$ . Dans ce dernier cas, le temps d'évaporation sera beaucoup plus long et on s'attend à ce que ce processus soit limitant pour la vitesse de flamme. Ce diamètre correspond à peu près aux tailles de gouttes maximales rencontrées dans les moteurs aéronautiques après atomisation. La richesse totale varie entre 0,73 et 1,93 afin d'évaluer les effets de l'évaporation dans diverses conditions

Le tableau 3.2 résume les valeurs prises par ces paramètres. Les diamètres indiqués sont ceux avant saturation. Ainsi une goutte dont le diamètre donné est  $25 \mu\text{m}$  avant saturation aura un diamètre de  $d = 24,86 \mu\text{m}$  en réalité.

Paramètres	Valeurs
Diamètre des gouttes $d$ $\mu\text{m}$	5, 25, 50, 100
Richesse totale $\Phi_0$	0,73, 0,97, 1,47, 1,93
Vitesse des gouttes	$V_{goutte}^{ini} = V_{gaz}^{ini}$
Répartition des gouttes	homogène

TABLE 3.2 – Conditions initiales de la phase liquide

Paramètres	Choix
Modèle de combustion	PEA Franzelli
Diffusion	$Le = 1$

TABLE 3.3 – Modèle de combustion

### 3.2.3 Conditions de saturation

Dans le cas où les gaz frais ne contiennent pas de vapeur de carburant, Neophytou et al. [88] ont montré que la longueur d'évaporation primaire de la goutte avait une influence sur la vitesse de flamme : plus cette longueur est grande, plus la goutte peut s'évaporer, et donc plus la richesse gazeuse sera élevée. Pour une même longueur, la richesse gazeuse dépendra du diamètre des gouttes ainsi que de la richesse totale. Afin de s'affranchir de ce biais sur les résultats de vitesse de flamme laminaire, les gaz frais sont saturés en carburant.

La résolution des conditions de saturation débute par le calcul de la pression de saturation à partir de l'équation de Clausius-Clapeyron :

$$P_{sat} = P_{atm} \exp \left( L_{vb} \frac{M_F}{R} \left( \frac{1}{T_{nb}} - \frac{1}{T} \right) \right) \quad (3.18)$$

où  $T_{nb}$  est la température normale d'ébullition. La loi de Raoult donne alors la fraction molaire de fuel dans le gaz saturé à la surface de la goutte selon :

$$X_{sat} = \frac{P_{sat}}{P_{atm}} \quad (3.19)$$

et la fraction massique du carburant dans le gaz saturé :

$$Y_{sat} = X_{sat} \frac{M_F}{M_F * X_{sat} + M_{air}(1 - X_{sat})} \quad (3.20)$$

### 3.2.4 Modèles physiques

Les modèles utilisés ont été décrits précédemment, notamment le modèle de diffusion infinie au sein de la goutte, l'écoulement de Stefan et la traînée. La cinétique chimique employée ici est la cinétique 2S\_KERO\_BFER développée par Franzelli [46] et présentée dans la partie 1.3.2.

Les tableaux 3.3, et 3.4 synthétisent les modèles choisis.

### 3.2.5 Etudes numériques

Des études de convergence ont été faites : les maillages testés avaient 200, 400 ou 800 mailles, pour une longueur  $L = 0,02$  m. La vitesse de flamme calculée avec le maillage à 400 mailles présente une erreur d'environ 1 % par rapport au calcul effectué avec 800 mailles.

Paramètres	Choix
Modèle de diffusion dans la goutte	Conduction infinie
Modèle de traînée	Schiller et Neumann
Écoulement de Stefan	Abramzon et Sirignano
Echange gaz-gouttes	Two-way coupling

TABLE 3.4 – Modèles de la phase liquide

Qui plus est, étant donné que la présence de gouttes au sein de l'écoulement épaissit le front de flamme à cause de processus d'évaporation : en combustion diphasique, le front de flamme s'étale donc sur plus de mailles que lors de nos tests en combustion gazeuse. Le gain de temps étant appréciable, le maillage à 400 mailles représente un bon compromis. Le pas de temps  $\Delta t$  a également fait l'objet d'un test de convergence concluant : des calculs ont été faits avec un pas de temps  $\frac{\Delta t}{2}$  et  $2\Delta t$ .

### 3.3 Étude paramétrique

Une étude paramétrique est menée. Pour différentes richesses totales, le diamètre des gouttes est modifié. Les profils de température, de fractions massiques, etc, sont analysés, ainsi que la vitesse de flamme.

#### 3.3.1 Profils de la flamme

##### 3.3.1.1 Effets du diamètre

Les résultats sont montrés sous forme de profils. Ces profils sont centrés dans le repère de la flamme, ce qui signifie qu'à l'abscisse  $x = 0$  m le taux de dégagement de chaleur est maximal. En fonction des grandeurs montrées, le zoom est fait sur le front de flamme.

Les profils de fraction massique, taux de dégagement de chaleur, température, etc, varient en fonction du diamètre et de la richesse totale. Nous nous intéressons d'abord aux effets produits par une modification du diamètre des gouttes. Dans cette section, sauf contre-indication, les profils montrent les résultats obtenus pour une richesse totale  $\Phi_0 = 0,97$ . Les profils obtenus pour des richesses inférieures ou supérieures sont sensiblement différents, aussi une étude des effets de la richesse totale est effectuée dans la section 3.3.1.2.

**Taux d'évaporation des gouttes.** La figure 3.2 présente les profils de taux d'évaporation de la phase dispersée. Les gouttes de tailles  $d = 5 \mu\text{m}$  s'évaporent entièrement avant le front de flamme : le carburant sera alors sous forme gazeuse. Les gouttes de taille plus importante s'évaporent dans le front de flamme. Conformément à la loi du  $d^2$ , plus le diamètre des gouttes est important, plus le taux d'évaporation maximal est faible et plus l'épaisseur d'évaporation est importante.

**Fraction massique et taux de dégagement de chaleur.** La figure 3.3 :a) présente les profils de la fraction massique gazeuse du carburant  $Y_F$ . La forte évaporation des gouttes de diamètre  $d = 5 \mu\text{m}$  entraîne un pic de fraction massique de carburant avant la flamme. En raison du plus faible taux d'évaporation, la valeur maximale de fraction massique diminue avec le diamètre des gouttes jusqu'à ne plus présenter de maximum local pour des gouttes de diamètre supérieur à  $d > 50 \mu\text{m}$ . Dans ce cas, la vapeur de

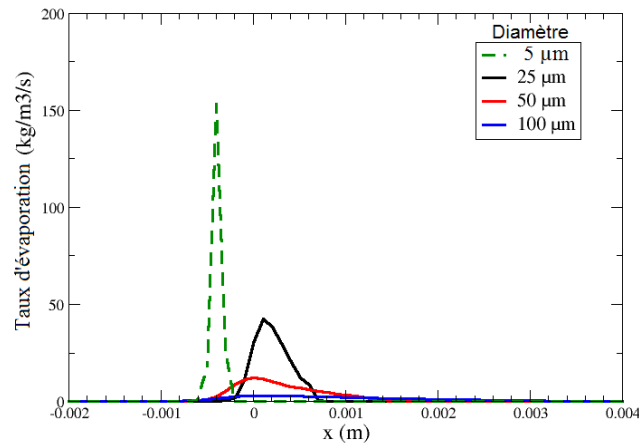


FIGURE 3.2 – Profils du taux d'évaporation à  $\Phi_0 = 0,97$ , pour différents diamètres de gouttes.

carburant produite par l'évaporation est directement consommée par la combustion. Les profils de taux de dégagement de chaleur adimensionné par la valeur maximale à  $d = 5 \mu\text{m}$  sont présentés par la figure 3.3 :b). Les gouttes de taille  $d = 5 \mu\text{m}$  étant complètement évaporées avant d'entrer dans le front de flamme, les conditions sont proches de la flamme gazeuse et le taux de dégagement de chaleur est maximal. A cause de leur évaporation moins rapide, les plus grosses gouttes présentent un taux de dégagement de chaleur très étalé en espace.

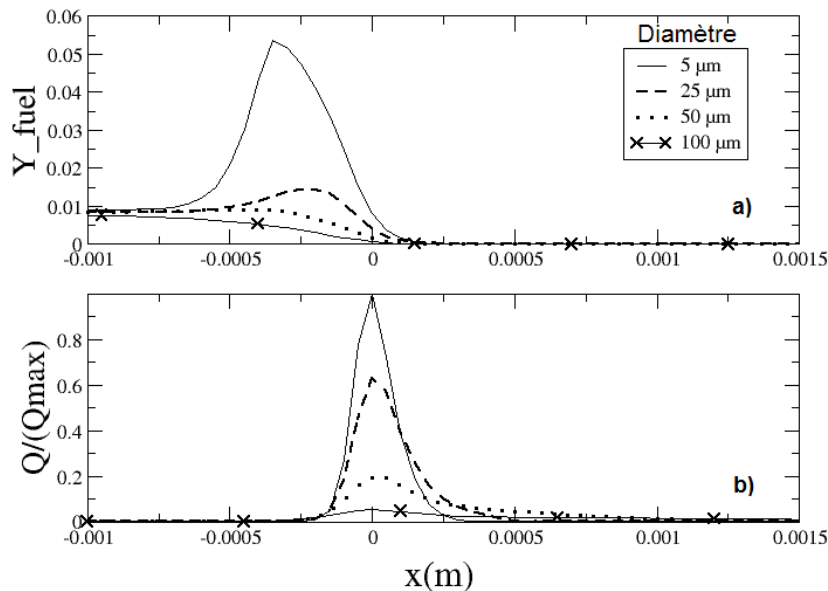


FIGURE 3.3 – Profils de fraction massique gazeuse de carburant et de taux de dégagement de chaleur adimensionné par la valeur maximale obtenue pour  $d = 5 \mu\text{m}$ .

**Température du gaz.** Le taux de dégagement de chaleur influence directement la température. La figure 3.4 présente les profils de température du gaz. Pour les petites gouttes,

le fort taux de dégagement de chaleur entraîne une variation brutale de la température. Le gradient de température étant très important, l'épaisseur de flamme définie par l'équation 3.16 est faible. Au contraire, pour les gouttes de grande taille le taux de dégagement de chaleur est très étalé et la température des gaz passe de la température des gaz frais  $T = 298 \text{ K}$  à la température des gaz brûlés  $2305 \text{ K}$  de manière plus progressive. L'épaisseur de flamme est donc plus importante.

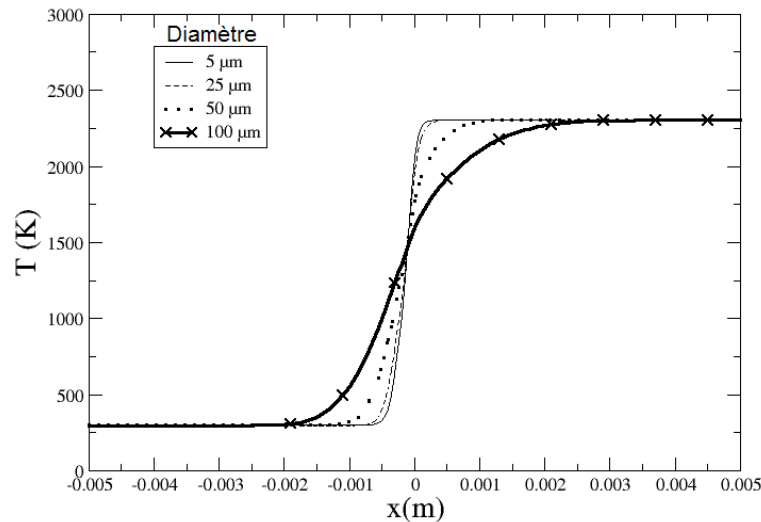


FIGURE 3.4 – Profils de température du gaz à  $\Phi_0 = 0,97$ , pour différents diamètres de gouttes.

**Vitesse des gouttes.** On s'intéresse à l'inertie des gouttes. Les profils de différence de vitesse entre la phase gazeuse et la phase liquide, adimensionnée par la vitesse du gaz à l'infini aval, sont tracés sur la figure 3.5. Les gouttes ont initialement la même vitesse que la phase gazeuse. Au niveau du front de flamme, lorsque les gaz se réchauffent, la vitesse gazeuse augmente. Les gouttes suivent cette accélération avec un léger retard dû à leur inertie. Celle-ci augmente avec le diamètre des gouttes. Par ailleurs, ce dernier diminue en traversant le front de flamme. Lorsque les gouttes sont évaporées, leur vitesse est fixée à  $0 \text{ m/s}$ , d'où le brusque saut sur les profils. La zone de transition de vitesse est plus courte pour les petites gouttes, ce qui s'explique de deux façons : le gradient de température des gaz est plus élevé pour les petites gouttes, donc la zone de transition de vitesse aussi, et enfin le temps de réponse des gouttes proportionnel au carré du diamètre favorise les petites gouttes.

**Richesse effective dans la flamme.** Les résultats présentés dans cette partie ont montré que les profils de fraction massique, taux de dégagement de chaleur, etc, dépendait directement du processus d'évaporation des gouttes. Afin de connaître la quantité de carburant sous forme vapeur disponible pour la combustion, la richesse effective a été définie par l'équation 3.9. La richesse effective dépend directement de l'évaporation. Lorsque le mélange est homogène, elle évolue entre la valeur de la richesse gazeuse à saturation  $\Phi_g^{sat}$  et, lorsque toutes les gouttes sont évaporées, la richesse totale  $\Phi_0$ . La figure 3.6 présente les profils de richesse effective pour une richesse totale  $\Phi_0 = 1,47$ . Plus le diamètre des gouttes est faible, plus la valeur de la richesse effective dans le front de flamme ( $x = 0 \text{ m}$ )

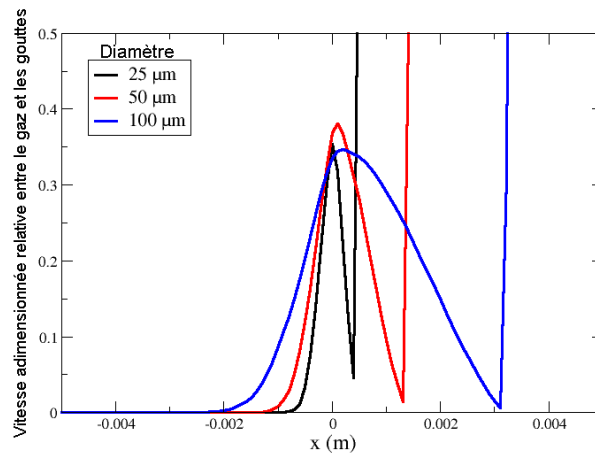
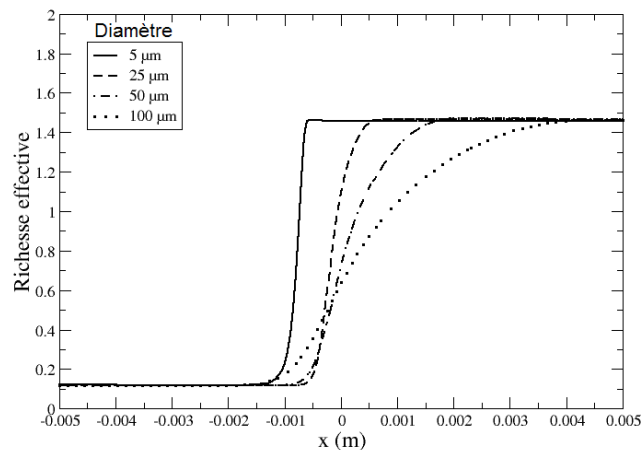


FIGURE 3.5 – Profil de flamme

est importante. Ainsi, les gouttes de taille  $d = 5 \mu\text{m}$  sont toutes évaporées avant la flamme et la richesse effective vaut  $\Phi_{eff} = \Phi_0$ . Pour des gouttes de diamètre  $d = 25 \mu\text{m}$ , la richesse effective est quasiment égale à  $\Phi_{eff} = 1$ , enfin les gouttes de tailles  $d > 50 \mu\text{m}$  mène une richesse effective inférieure à la stœchiométrie.

FIGURE 3.6 – Profils de richesse effective, à  $\Phi_0 = 1,47$ , pour différents diamètres de gouttes.

Les profils précédents ont été présentés pour une richesse totale  $\Phi_0 = 0,97$ . Cela correspond, pour un mélange monophasique à richesse totale équivalente, à des conditions quasi-optimales pour le taux de consommation du carburant et donc le taux de dégagement de chaleur. A richesse totale proche de la stœchiométrie, plus les gouttes s'évaporent, plus elles se rapprochent de ces conditions optimales. La figure 3.6 présente les profils de richesse effective pour un cas où la richesse totale du mélange est supérieure à la stœchiométrie. Dans ce cas, les petites s'évaporant entièrement avant le front de flamme mène à une richesse effective  $\Phi_{eff} = \Phi_0 > 1$  tandis que des gouttes de diamètre plus important (ici  $d = 25 \mu\text{m}$ ) permettent d'obtenir une richesse effective presque égale à la stœchiométrie, c'est à dire quasi-optimale pour obtenir un taux de consommation de carburant maximal. La richesse totale joue donc un rôle important sur les profils de flamme.

### 3.3.1.2 Effets de la richesse totale

On s'intéresse à présent à l'évolution de la structure de flamme lorsque le diamètre des gouttes est fixé. A nouveau, les résultats sont centrés dans le référentiel de la flamme : le taux de dégagement de chaleur est maximal à l'abscisse  $x = 0$  m. Les résultats présentés sont représentatifs de l'ensemble des résultats qui peuvent être rencontrés.

On trace les profils de taux de consommation et de fraction massique du carburant pour des gouttes de diamètre  $d = 5 \mu\text{m}$  et  $d = 50 \mu\text{m}$  (voir respectivement les figures 3.7 et 3.8).

**Petites gouttes ( $d = 5 \mu\text{m}$ ).** L'évolution des profils de flammes diphasiques avec des gouttes de diamètre  $d = 5 \mu\text{m}$ , en fonction de la richesse, suit tout à fait le comportement des flammes monophasiques. L'évaporation rapide des gouttes entraîne une fraction massique de n-décane maximale croissante avec la richesse du mélange. Le taux de consommation du carburant le plus important est celui obtenu à  $\Phi_0 = 0,97$ . En combustion pauvre, le peu de carburant liquide entraîne un taux de réaction plus faible comme dans le cas gazeux. En combustion riche à  $\Phi_0 = 1,47$ , le fort taux d'évaporation des gouttes donne trop de carburant à la flamme : le taux de réaction maximal diminue. Dans ce cas où le mélange est riche, pour les petites gouttes, la fraction massique de carburant dans les gaz brûlés est quasiment nulle. Tout le n-décane a été consommé et, par conséquence, il manquait du dioxygène pour la réaction d'oxydation du  $CO$  en  $CO_2$ .

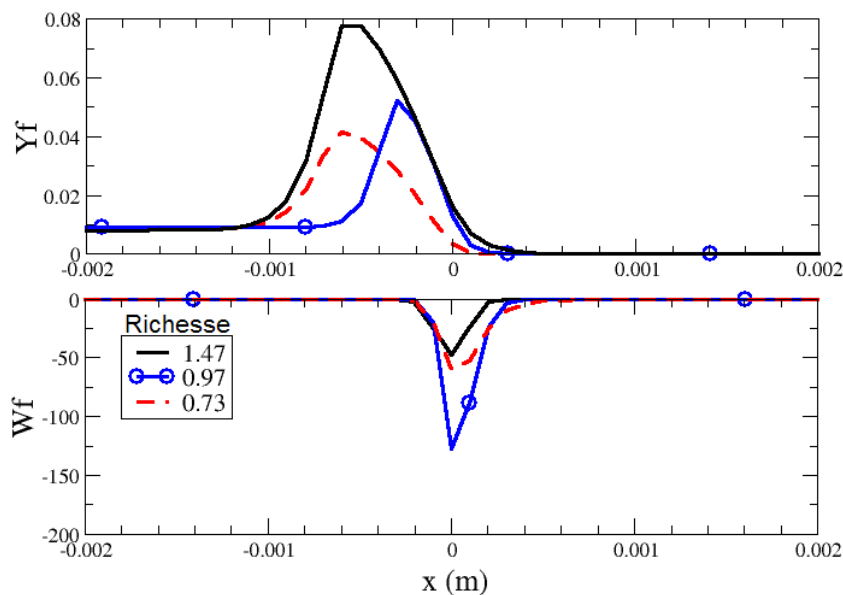


FIGURE 3.7 – Profils de taux de réaction et de fraction massique du n-décane pour plusieurs richesses totales, à  $d = 5 \mu\text{m}$

**Gouttes de diamètre plus important ( $d = 50 \mu\text{m}$ ).** Pour les gouttes de taille  $d = 50 \mu\text{m}$ , le taux de consommation maximal du carburant augmente avec la richesse globale : le taux d'évaporation des gouttes étant plus faible à  $d = 50 \mu\text{m}$ , le taux de dégagement de chaleur maximal augmente avec la richesse totale. Le profil de fraction massique change et n'augmente quasiment pas avant le front de flamme, contrairement au cas précédent.

Cela signifie que le carburant évaporé des gouttes est consommé aussitôt qu'il est sous forme gazeuse. En combustion riche, la fraction massique de carburant dans les gaz brûlés est non-nulle, contrairement au cas  $d = 5 \mu\text{m}$  : la combustion, limitée par le processus d'évaporation, consomme le dioxygène de façon suffisamment lente pour que l'oxydation du  $\text{CO}$  se réalise. Enfin, on remarque par rapport aux profils obtenus pour les petites gouttes que la zone de réaction s'épaissit.

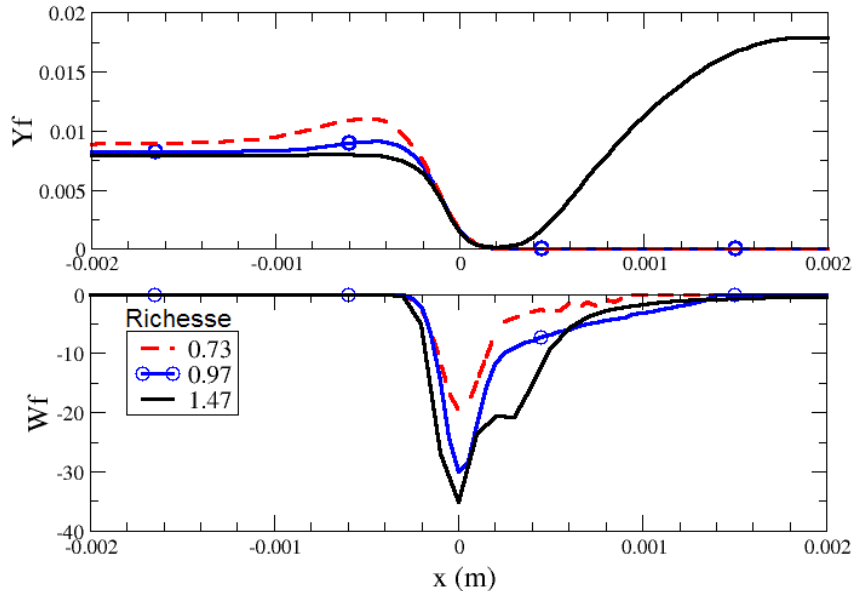


FIGURE 3.8 – Profils de taux de réaction et de fraction massique du n-décane pour plusieurs richesses totales, à  $d = 50 \mu\text{m}$

### 3.3.2 Évolution de la vitesse de flamme

#### 3.3.2.1 Effets de la richesse totale et du diamètre des gouttes.

**Comparaison à des simulations numériques.** Les paramètres examinés précédemment (richesse, taille de gouttes) influencent non-seulement la structure de la flamme, mais également son comportement général en terme de grandeurs intégrales comme la vitesse de propagation de la flamme.

Pour chaque cas de flamme diphasique simulée, la vitesse de flamme est calculée par l'équation 3.13, qui est la valeur exacte pour une flamme plane laminaire monodimensionnelle.

La figure 3.9 présente l'évolution de la vitesse de flamme en fonction de la richesse globale du mélange, pour différents diamètres de gouttes initiaux. Les valeurs sont comparées aux résultats de Neophytou.

La courbe pour les gouttes de diamètre  $d = 5 \mu\text{m}$  n'est pas tracée pour des raisons de clarté : elle suit la courbe de vitesse de flamme dans le cas monophasique. Pour les plus grosses gouttes (à partir de  $d = 25 \mu\text{m}$ ), à diamètre fixé la vitesse de flamme croît avec la richesse globale jusqu'à dépasser les limites de inflammabilité : il y a combustion pour des richesses totales allant jusqu'à  $\Phi_0 = 4$ . Pour des gouttes de diamètre  $d = 25 \mu\text{m}$  par exemple, on peut penser qu'en augmentant en continu la richesse totale du mélange, la



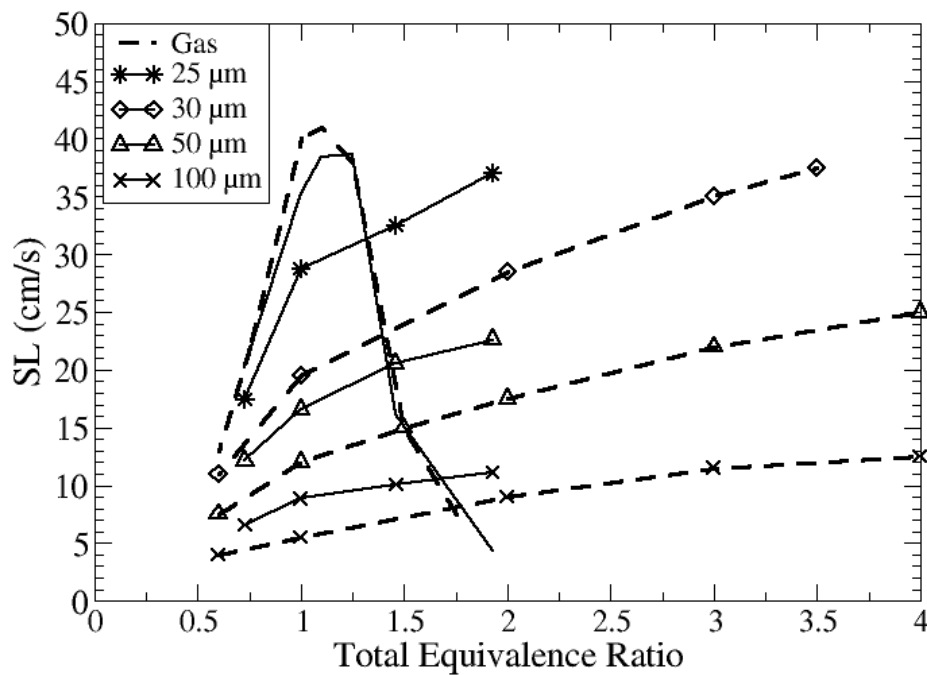


FIGURE 3.9 – Évolution de la vitesse de flamme en fonction de la richesse totale, pour différents diamètres de gouttes initiaux. Traits pleins : notre étude, Traits pointillés : Neophytou.

vitesse de flamme augmentera jusqu'à la vitesse de flamme maximale. Ensuite la richesse effective vue par la flamme sera supérieure à la stœchiométrie et la vitesse de flamme diminuera.

À richesse globale fixée, et supérieure à la stœchiométrique ( $\Phi_0 > 1$ ), les résultats montrent que la vitesse de flamme est maximale pour un diamètre non-nul. Par exemple, à  $\Phi_0 = 1,5$ , la vitesse maximale est atteinte pour des gouttes de diamètre  $d = 25 \mu\text{m}$ , tandis que le cas monophasique (qui représente les gouttes de très faible diamètre) présente une faible vitesse de flamme. Ainsi le diamètre pour avoir une vitesse de flamme maximale n'est pas forcément le plus petit possible. Cela rejoint les observations expérimentales de Hayashi [57].

Bien que les tendances observées soient identiques à celles de Neophytou [88], les valeurs de vitesse de flamme sont supérieures aux résultats numériques qu'il a calculé. Cette surestimation peut être due au cumul de plusieurs facteurs :

1. **Effet de la longueur d'évaporation primaire** : Neophytou a conduit ses expérimentations numériques en étudiant l'effet de la longueur primaire d'évaporation  $l$  sur la vitesse de flamme. Cette longueur a un effet moindre sur les flammes de n-décane : à un diamètre donné, à la stœchiométrie, la différence de vitesse de flamme entre les cas  $l = 2 \text{ mm}$  et  $l = 25 \text{ mm}$  est au maximum de  $\Delta s_L = 2,5 \text{ cm/s}$ . Les résultats de Neophytou servant de comparaison sur la figure 3.9 sont obtenus pour une longueur d'évaporation primaire  $l = 5 \text{ mm}$ , c'est-à-dire une valeur relativement faible pour le gaz qui n'est donc pas saturé en carburant au niveau de la flamme. Les résultats de notre étude étant obtenus pour des gaz frais initialement saturés, il aurait été préférable de disposer des résultats de Neophytou pour une longueur primaire d'éva-

poration  $l = 25$  mm. Cette approche explique en partie la surestimation de la vitesse de flamme diphasique en comparaison de la littérature.

2. **Modèle de cinétique chimique** : Neophytou [88] utilise un mécanisme détaillé prenant en compte les phénomènes de pyrolyse. Il précise cependant que ces effets de pyrolyse ne se manifestent cependant que lorsque le mélange diphasique est riche, et pour des gouttes de grand diamètre.
3. **Modèle de conduction dans la goutte** : un modèle de conduction infinie est utilisée dans notre étude, tandis que Neophytou [88] opte pour un modèle à conduction limitée. Les impacts des modèles sur le délai d'évaporation des gouttes sont présentés dans la partie 2.4.1.

Quelques simulations de propagation de flamme diphasique ont été réalisées avec le logiciel CEDRE en utilisant le modèle de conduction effective, pour des richesses  $\Phi_0 = 0,97$  et  $\Phi_0 = 1,93$  et des diamètres  $d = 30 \mu\text{m}$  et  $d = 50 \mu\text{m}$ . La comparaison des résultats obtenus par rapport aux simulations utilisant un modèle de conduction infinie montre que l'impact sur la vitesse de flamme est au maximum de l'ordre 3% suivant la richesse totale et le diamètre des gouttes. Le modèle de conduction effective fournit, d'après la littérature, des temps d'évaporation intermédiaires entre les modèles à conduction infinie et à conduction limitée. En extrapolant les résultats obtenus, l'ordre de grandeur du différentiel de vitesse de flamme selon le modèle choisi pourrait être d'environ 5%.

**Comparaison à la formule semi-empirique.** L'évolution de la vitesse de flamme en fonction du diamètre initial des gouttes, pour une richesse globale fixée à  $\Phi_0 = 0,97$ , est présentée sur la figure 3.10. Les valeurs obtenues par simulation sont comparées à la formule semi-empirique de Ballal et Lefebvre, validée en combustion pauvre par des résultats expérimentaux. Neophytou [88] s'est également comparé à cette formule. La bonne adéquation des résultats de notre étude présentés ici montre que les modèles adoptés pour notre étude, notamment la cinétique chimique simplifiée et l'hypothèse de diffusion infinie des gouttes, sont pertinents et donnent des résultats satisfaisants.

### 3.3.2.2 Effets de la richesse effective.

La figure 3.9 montre que la richesse globale du mélange ne permet pas de présumer la vitesse de flamme, car celle-ci dépend également de la taille des gouttes. On s'intéresse alors à l'influence de la richesse effective, qui dépend autant de la richesse globale du mélange que de la taille des gouttes. La figure 3.11 présente la vitesse de flamme diphasique en fonction de la richesse effective pour différentes richesses globales. La richesse affichée est la richesse effective dans le front de flamme, calculée a posteriori grâce aux simulations numériques, là où le taux de dégagement de chaleur est maximal. Le diamètre initial des gouttes peut se déduire facilement par recoupement avec la figure 3.9, ou bien en considérant qu'à richesse globale fixée, la richesse effective diminue lorsque le diamètre des gouttes augmente. Par exemple : à  $\Phi_0 = 1,93$ , le point appartient aux résultats ayant une richesse totale  $\Phi_0 = 1,93$  et, parmi ces résultats, correspond à la richesse effective maximale. Le diamètre des gouttes vaut donc  $d = 5 \mu\text{m}$ .

Le fait que, dans cette étude, la vitesse de flamme soit reliée à la richesse effective dans le front de flamme est un résultat clé. Neophytou ne retrouve pas de corrélation claire, ce qui s'explique notamment par modélisation des phénomènes de pyrolyse qui vont augmenter la vitesse de flamme pour une richesse effective.

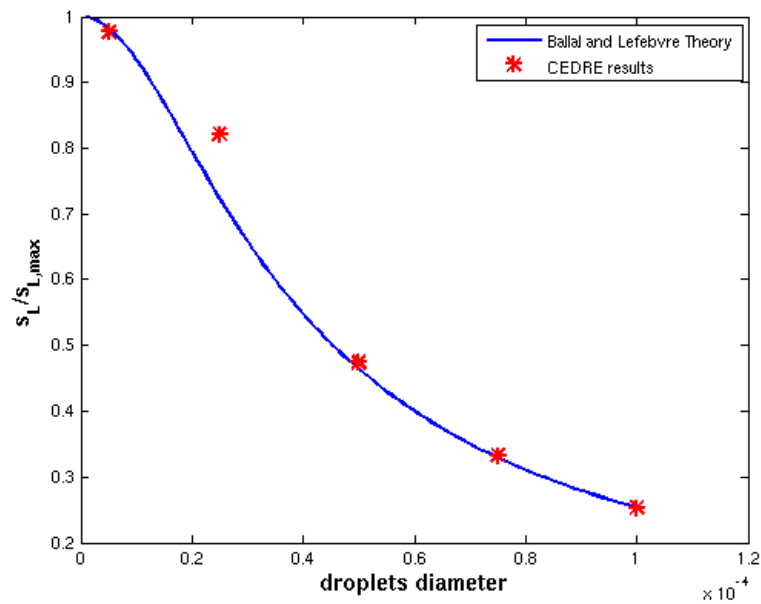


FIGURE 3.10 – Évolution de la vitesse de flamme adimensionnée en fonction du diamètre des gouttes, pour une richesse totale  $\Phi_0 = 0,97$

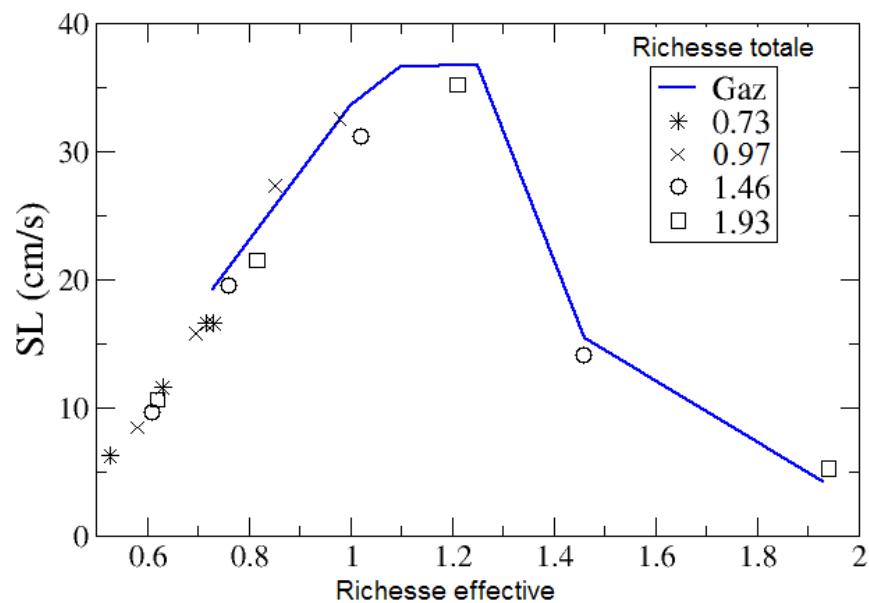


FIGURE 3.11 – Évolution de la vitesse de flamme en fonction de la richesse effective, pour différentes richesses totales.

Grâce à notre résultat, connaître *a priori* la richesse effective dans le front de flamme permettrait de connaître la vitesse de flamme diphasique. Cela est néanmoins difficile : si l'on peut déterminer le temps caractéristique d'évaporation (voir partie 2.2.1) pour des gouttes s'évaporant à température constante, dans le cas de la combustion les gouttes s'évaporent au travers du front de flamme, ce qui a pour effet d'accélérer le processus d'évaporation. Cela produit, comme on le voit sur la figure 3.3, un profil de taux de

consommation du carburant dont le maximum n'est pas à une position fixe par rapport à l'épaisseur de la flamme. Le nombre important de paramètres à prendre en compte rend difficile le calcul de la richesse effective dans le front de flamme.

### 3.3.3 Évolution de la richesse effective

La figure 3.12 présente les valeurs de la richesse effective vue par le front de flamme, pour différentes richesses totales et diamètres de gouttes initiaux. L'évolution de la richesse effective en fonction du diamètre initial des gouttes peut être comparée aux résultats obtenus par Neophytou [88], présentés sur la figure 2.5, afin de comprendre pourquoi l'approche développée dans notre étude mène à de plus grandes vitesses de flamme. La figure 3.12 montre qu'à richesse  $\Phi_0 = 0,97$ , la richesse effective évolue constamment en fonction du diamètre des gouttes. La même courbe, présentée par Neophytou [88], montre que la richesse effective dans le front de flamme diminue rapidement de  $\Phi_{eff} = 1$  à  $\Phi_{eff} \approx 0,4$  à diamètre  $d \approx 30 \mu\text{m}$ , et n'évolue presque plus au delà de ce diamètre. Des richesses effectives différentes au front de flamme amènent des vitesses de flamme différentes. Ce résultat traduit que la dynamique d'évaporation des gouttes est plus rapide dans le cadre de notre étude, d'où une vitesse de flamme surestimée.

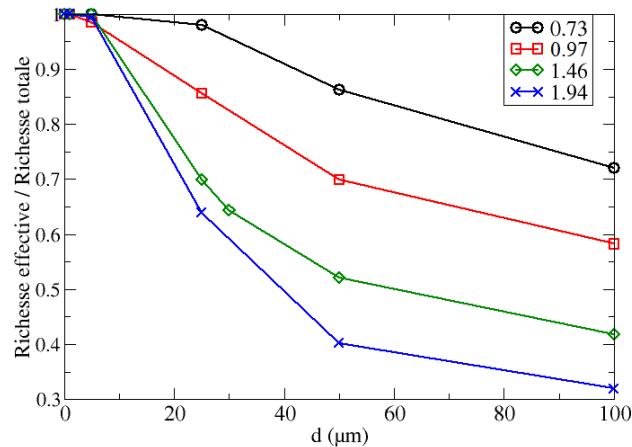


FIGURE 3.12 – Évolution de la richesse effective relative, vue au point où le dégagement de chaleur est maximal, en fonction de la richesse totale du mélange.

## 3.4 Conclusion

Ce chapitre a présenté de simulations de flammes planes laminaires diphasiques pour des gouttes monocomposant. Cette configuration simple représente une première étape pour la compréhension de l'effet de l'évaporation dans la combustion d'un foyer aéronautique. Grâce à des comparaisons avec les résultats expérimentaux et numériques de la littérature, cette étude permet de valider l'approche adoptée. La conduction de chaleur dans les gouttes est traitée selon un modèle de conduction infinie. La combustion de la vapeur produite est modélisée grâce à une cinétique chimique à deux étapes pour l'espèce moyenne  $C_{10}H_{20}$ . Des simulations ont été faites pour plusieurs diamètres et richesses totales. L'aspect diphasique modifie la propagation de la flamme : les transferts de masse et d'énergie réduisent la quantité de carburant sous forme vapeur disponible pour alimenter

la flamme. En combustion pauvre, cela a pour effet de réduire de la vitesse de propagation de la flamme et d'épaissir le front de flamme par rapport au cas monophasique à même richesse totale. En combustion riche, les vitesses de flammes diphasiques peuvent alors être supérieures à la vitesse de flamme du cas monophasique équivalent à même richesse totale. Les résultats de l'étude paramétrique sont globalement conformes aux comportements observés expérimentalement et numériquement. La formule semi-empirique de Ballal et Lefebvre [11] est vérifiée. L'évolution de la richesse de flamme correspond aux résultats de Neophytou [88] pour une cinétique chimique détaillée. La vitesse de propagation est surestimée par rapport aux résultats de Neophytou [88] et les raisons de cette différence sont étudiées. Le modèle de conduction dans la goutte et la cinétique chimique réduite semblent expliquer ce résultat. Enfin, la structure de flamme diphasique est retrouvée.



## Chapitre 4

# Flammes diphasiques laminaires multicomposant

### Sommaire

---

<b>4.1 Définitions</b> . . . . .	<b>79</b>
4.1.1 Richesses du mélange . . . . .	80
4.1.2 Vitesse de flamme . . . . .	80
<b>4.2 Cinétique chimique réduite multicomposant</b> . . . . .	<b>81</b>
4.2.1 Remarque sur l'utilisation d'une cinétique simplifiée . . . . .	82
4.2.2 Cinétique multicomposant d'Aggarwal . . . . .	82
4.2.3 Cinétique multicomposant à réactions découplées . . . . .	84
4.2.4 Apports et limites des cinétiques chimiques simplifiées multicomposant . . . . .	87
<b>4.3 Mise en place du calcul</b> . . . . .	<b>87</b>
4.3.1 Choix des composants . . . . .	88
4.3.2 Conditions initiales . . . . .	89
<b>4.4 Comparaison des cinétiques chimiques multicomposant</b> . . . . .	<b>90</b>
<b>4.5 Caractérisation des effets de l'évaporation multicomposant des gouttes sur la propagation des flammes</b> . . . . .	<b>91</b>
4.5.1 Profils de la flamme en fonction de la composition . . . . .	91
4.5.2 Évolution de la vitesse de flamme . . . . .	94
4.5.3 Epaisseurs caractéristiques . . . . .	96
4.5.4 Composition des gaz chauds en régime riche . . . . .	97
<b>4.6 Conclusion, discussion et perspectives</b> . . . . .	<b>100</b>

---

Le chapitre précédent a permis d'établir une base de résultats pour la propagation d'une flamme plane à travers des gouttes monocomposant. La prise en compte de l'aspect multicomposant du kérosène peut modifier la structure de la flamme ainsi que les grandeurs observées en modifiant la dynamique d'évaporation. L'objectif de ce chapitre est de comprendre l'effet de l'évaporation séquentielle sur la propagation de la flamme. Pour cela, on étudie le cas de gouttes bicomposant composées de deux constituants donc les volatilités sont assez différentes.

### 4.1 Définitions

Les définitions de la partie 3.1.1 sont toujours valables, mais certaines grandeurs sont reprécisées dans le cas où le carburant est multicomposant.

### 4.1.1 Richesses du mélange

Tout d'abord, la richesse globale du mélange sera définie comme la richesse des composants du carburant, pour leur forme liquide et gazeuse. On a donc :

$$\Phi_0 = \Phi_g + \Phi_{liq} = \sum_i^{Ncomp} \Phi_{g,i} + \sum_i^{Ncomp} \Phi_{liq,i} \quad (4.1)$$

La richesse effective étant calculée à partir des fractions massiques d'éléments, sa définition reste inchangée.

### 4.1.2 Vitesse de flamme

La formule de la vitesse de flamme est démontrée ici pour un carburant à deux composants. Dans le cas d'une flamme plane laminaire, la vitesse de flamme  $s_L$  est égale à la vitesse de consommation  $s_C$ , elle-même définie par l'intégrale du taux de réaction à travers le front de flamme, noté  $\dot{\Omega}_F = \int_{-\infty}^{+\infty} \dot{\omega}_F dx$ .

En se référant à la méthode de Kaufmann [63], on intègre les équations bilan entre l'état infini amont et l'état infini aval. L'état amont et aval sont respectivement repérés par les indices  $u$  et  $b$  en référence aux gaz frais ou brûlés (*unburnt*, *burnt*), tandis que les deux composants du carburant sont notés par les indices  $F_1$  et  $F_2$ , soit :

$$\int_{-\infty}^{+\infty} d(\rho u) = \int_{-\infty}^{+\infty} \dot{m} dx \quad (4.2)$$

$$\int_{-\infty}^{+\infty} d(\rho Y_{F_1} u) = \dot{\Omega}_{F_1} + \int_{-\infty}^{+\infty} \dot{m}_{F_1} dx \quad (4.3)$$

$$\int_{-\infty}^{+\infty} d(\rho Y_{F_2} u) = \dot{\Omega}_{F_2} + \int_{-\infty}^{+\infty} \dot{m}_{F_2} dx \quad (4.4)$$

$$\int_{-\infty}^{+\infty} d(\rho_l \alpha_l u_l) = - \int_{-\infty}^{+\infty} \dot{m} dx \quad (4.5)$$

où le taux d'évaporation  $\dot{m}$  est la somme du taux d'évaporation des deux composants des gouttes  $\dot{m} = \dot{m}_{F_1} + \dot{m}_{F_2}$ , et l'indice  $l$  désigne la phase dispersée.

Les hypothèses suivantes sont faites :

**Hypothèse 4.1.1** *La flamme est stationnaire, c'est à dire que la vitesse d'entrée des gaz frais est égale à l'opposé de la vitesse de flamme :  $u_u = -s_L$ .*

**Hypothèse 4.1.2** *La phase liquide est complètement évaporée à l'infini aval, dans les gaz brûlés.*

**Hypothèse 4.1.3** *La vitesse des gouttes est égale à la vitesse du gaz à l'infini amont, et à l'infini aval.*

On remarquera que ces hypothèses sont tout à fait raisonnables, notamment l'hypothèse 4.1.2 qui concerne l'évaporation de la phase dispersée dans les gaz brûlés où la température est de l'ordre de 2000 K. L'hypothèse 4.1.1 est faite dans un souci de simplification de la démonstration. Avoir une vitesse  $u_u \neq -s_L$  est tout à fait possible, et il



faudrait alors considérer la vitesse relative de la flamme par rapport à la vitesse des gaz frais pour mener la démonstration.

En introduisant l'équation 4.5 dans l'équation de conservation de la masse et d'après les hypothèses faites ci-dessus, on obtient :

$$\rho_b u_b = (\rho_{l,u} \alpha_{l,u} + \rho_u) u_u \quad (4.6)$$

Par ailleurs, en considérant la fraction molaire  $X_{F_i}$  du composant  $i$  dans le carburant liquide, les équations 4.3 et 4.4 deviennent :

$$\rho_b u_b Y_{F1,b} - \rho_u u_u Y_{F1,u} = \dot{\Omega}_{F1} + X_{F1} \rho_{l,u} \alpha_{l,u} u_u \quad (4.7)$$

$$\rho_b u_b Y_{F2,b} - \rho_u u_u Y_{F2,u} = \dot{\Omega}_{F2} + X_{F2} \rho_{l,u} \alpha_{l,u} u_u \quad (4.8)$$

où  $X_1 + X_2 = 1$ .

Le taux de réaction global du carburant est défini comme :

$$\dot{\Omega}_F = \dot{\Omega}_{F1} + \dot{\Omega}_{F2} \quad (4.9)$$

En simplifiant les écritures grâce à la fraction massique totale de carburant  $Y_F = Y_{F1} + Y_{F2}$  (ainsi  $Y_{F,u}$  est la fraction massique totale de carburant dans les gaz frais), et en insérant les équations 4.7 et 4.8, puis l'équation 4.6 dans la définition 4.9, on obtient alors :

$$\dot{\Omega}_F = \rho_b u_b Y_{F,b} - \rho_u u_u Y_{F,u} - \rho_{l,u} \alpha_{l,u} u_u \quad (4.10)$$

$$= (\rho_{l,u} \alpha_{l,u} + \rho_u) u_u Y_{F,b} - \rho_u u_u Y_{F,u} - \rho_{l,u} \alpha_{l,u} u_u \quad (4.11)$$

$$= u_u [\rho_u (Y_{F,b} - Y_{F,u}) + \rho_{l,u} \alpha_{l,u} (Y_{F,b} - 1)] \quad (4.12)$$

En rappelant que l'on considère  $u_u = -s_L$ , et en réintroduisant les fractions massiques des composants, on a alors la définition de la vitesse de flamme diphasique dans le cas multicomposant :

$$s_L = - \frac{\dot{\Omega}_{F1} + \dot{\Omega}_{F2}}{\rho_u [(Y_{F1,b} + Y_{F2,b}) - (Y_{F1,u} + Y_{F2,u})] + \rho_{l,u} \alpha_{l,u} (Y_{F1,b} + Y_{F2,b} - 1)} \quad (4.13)$$

On remarque que si l'un des composants a une fraction massique nulle, on retrouve l'expression de la vitesse de flamme diphasique monocomposant définie par l'Eq. 3.13.

## 4.2 Cinétique chimique réduite multicomposant

Le coût des calculs numériques croissant avec le nombre d'espèces chimiques à transporter, des simplifications sont réalisées pour les simulations de la combustion dans des configurations complexes. La combustion d'un carburant multicomposant nécessite donc une cinétique chimique appropriée, qui doit conduire à des temps de calcul raisonnables. L'emploi d'une cinétique détaillée, fait dans le cas monophasique par Byun [23], est donc écarté. Deux schémas cinétiques réduits sont retenus et détaillés dans cette partie.

### 4.2.1 Remarque sur l'utilisation d'une cinétique simplifiée

Lorsque le carburant est décrit par plusieurs composants, on pourrait être tenté d'utiliser une cinétique chimique réduite par composant : par exemple, la cinétique PEA décrite dans la partie 1.3.2. Cela n'est possible que sous certaines conditions. Ce paragraphe a pour but d'expliquer les problèmes rencontrés pour la description de la combustion multicomposant.

Considérons une cinétique chimique simplifiée :



où  $F$  est le carburant,  $Ox$  l'oxydant,  $P$  les produits de la réaction et  $\nu_i$  le coefficient stœchiométrique de l'espèce  $i$ . Le taux de réaction est défini par :

$$\dot{\omega}_r = A[F]^{a_F}[Ox]^{a_O} e^{-\frac{T_a}{T}} \quad (4.15)$$

Considérons une phase gazeuse dans laquelle une seule espèce de carburant est présente, de concentration  $[F]$ . Si l'on sépare la concentration massique en deux parts égales  $\frac{[F]}{2}$ , alors le taux de réaction de chaque part de vapeur vaut :

$$\dot{\omega}_r = A \left( \frac{[F]}{2} \right)^{a_F} [Ox]^{a_O} e^{-\frac{T_a}{T}} \quad (4.16)$$

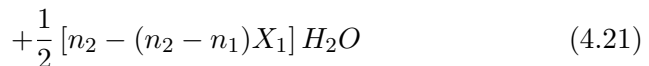
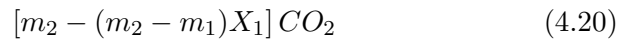
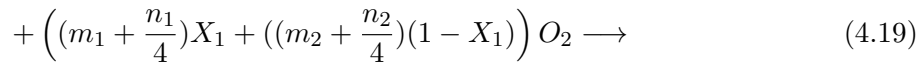
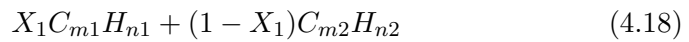
Le taux de réaction total pour les deux parts vaut donc :

$$\dot{\omega}_{r,tot} = 2A \left( \frac{[F]}{2} \right)^{a_F} [Ox]^{a_O} e^{-\frac{T_a}{T}} = 2^{1-a_F} A[F]^{a_F}[Ox]^{a_O} e^{-\frac{T_a}{T}} \quad (4.17)$$

Les équations 4.15 et 4.17 ne sont équivalentes que si  $a_F = 1$ , c'est à dire si le taux de réaction est linéaire par rapport à la concentration de carburant. En combustion multicomposant, l'utilisation d'une cinétique simplifiée par composant n'est possible que si  $a_F = 1$  (approche à réactions découplées), ou si la définition du taux de réaction est modifiée (approche Aggarwal). La suite de cette partie décrit des cinétiques chimiques réduites pour la combustion multicomposant, développées à partir de ces constatations.

### 4.2.2 Cinétique multicomposant d'Aggarwal

La première cinétique chimique réduite multicomposant a été développée par Aggarwal [3]. Celui-ci a utilisé une cinétique globale de Westbrook et Dryer [123], pour laquelle le carburant correspond à un pseudocomposant. L'équation globale de réaction dans le cas bicomposant est la suivante :



où  $X_1$  est la fraction molaire de l'espèce 1 dans le carburant. Pour une espèce  $i$ ,  $X_i$  vaut :

$$X_i = \frac{x_i}{\sum_{k=1}^{N_c} x_k} \quad (4.22)$$

où  $N_c$  est le nombre de composants du carburant et  $x_i$  est la fraction molaire du composant  $i$  dans le gaz.

Par la suite, afin de simplifier l'écriture, on nommera  $F_1 = C_{m1}H_{n1}$  le premier composant du carburant et  $F_2 = C_{m2}H_{n2}$  le second composant. Le taux de réaction global est alors exprimé par :

$$\dot{\omega}_r = A[F_1 + F_2]^{a_F} [Ox]^{a_O} e^{-\frac{T_a}{T}} \quad (4.23)$$

Le taux de consommation de l'espèce  $i$  du carburant est égal à :

$$\dot{\omega}_i = X_i \dot{\omega}_{r,i} \quad (4.24)$$

Doué [40] a étudié le cas où la constante pré-exponentielle  $A_i$ , relative à la réaction du composant  $i$  seul avec l'oxydant, serait différente pour les deux composants. Il propose alors de pondérer  $A$  :

$$A = \sum_i^{N_c} X_k A_k \quad (4.25)$$

Par souci de simplicité (voir partie 4.3.1), cette modification n'est pas prise en compte dans cette étude.

#### 4.2.2.1 Calcul des jacobiens de termes sources

**Définition des jacobiens** L'intégration de cette cinétique chimique dans le solveur CEDRE dans le cas d'une résolution temporelle implicite, pose quelques problèmes. L'implicitation du calcul nécessite de calculer les jacobiens de termes sources par rapport aux variables dont ils dépendent, la concentration et la température  $T$ . Ces jacobiens sont calculés sur l'ensemble des réactions  $r$  pour différentes espèces  $i$  et  $j$ , et leurs composantes selon les concentrations sont de la forme :

$$\frac{\partial \dot{\omega}_i}{\partial C_j} = \sum_r \nu_{i,r} \frac{\partial \dot{\omega}_r}{\partial C_j} \quad (4.26)$$

où le taux de réaction  $\dot{\omega}_r$  est le taux de réaction  $r$  global prenant en compte la réaction directe ainsi que la réaction indirecte et  $\nu_{i,r}$  est le coefficient stœchiométrique de l'espèce  $i$  dans la réaction  $r$ .

**Adaptation dans CEDRE** Ce paragraphe présente concrètement les hypothèses faites pour l'approximation des jacobiens dans le cas multicomposant. L'hypothèse suivante est faite :

**Hypothèse 4.2.1** *Le taux d'avancement de l'espèce  $i$  dans le carburant ne dépend que d'elle-même et de l'oxydant :*  $\left(\frac{\partial \dot{\omega}_i}{\partial C_j}\right)_{i \neq j}^F = 0$

Les calculs, non-détaillés ici, sont simplifiés car dans le cas de la cinétique d'Aggarwal le coefficient stœchiométrique s'écrit  $\nu_{F1} = X_1 = \frac{[F_1]}{[F_1 + F_2]}$ . Finalement, pour une réaction directe, la matrice des jacobiens  $\frac{\partial \dot{\omega}_i}{\partial C_j}$  pour les réactifs est approximée :

$$\frac{\partial \dot{\omega}}{\partial C} \approx \begin{pmatrix} F_1 & F_2 & Ox \\ \frac{a_F}{[F_1+F_2]} \dot{\omega}_r & 0 & a_O \frac{X_1 \dot{\omega}_r}{[Ox]} \\ 0 & \frac{a_F}{[F_1+F_2]} \dot{\omega}_r & \frac{a_O(1-X_1)}{[Ox]} \dot{\omega}_r \\ \frac{a_F \nu_{Ox} + (B-C)(1-X_1)}{[F_1+F_2]} \dot{\omega}_r & \frac{a_F \nu_{Ox} + (B-C)(1-X_1)}{[F_1+F_2]} \dot{\omega}_r & \frac{a_O \nu_{Ox}}{[Ox]} \dot{\omega}_r \end{pmatrix} \begin{matrix} F_1 \\ F_2 \\ Ox \end{matrix}$$

où  $B = m_1 + \frac{n_1}{4}$ ,  $C = m_2 + \frac{n_2}{4}$  et  $\nu_{Ox} = BX_1 + C(1 - X_1)$ .

**Validation de l'approche** Afin de valider l'approche, le cas test présenté dans la partie 4.2.1 est réalisé : une flamme 1D monophasique prémélangée est simulée. Le carburant  $F$  est représenté par deux espèces  $F_1$  et  $F_2$  pour différentes valeurs  $X_i$  telles que  $\sum_i X_i = 1$ . La cinétique chimique PEA est utilisée, avec l'approche multicomposant d'Aggarwal présentée ici. On vérifie ensuite que la vitesse de flamme reste constante quelles que soient les valeurs de  $X_1$ .

On remarque que pour cette approche,  $B = C$  donc la matrice des jacobiens pour les réactifs est simplifiée :

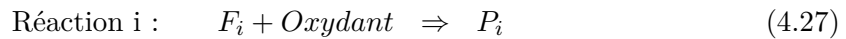
$$\frac{\partial \dot{\omega}}{\partial C} \approx \begin{pmatrix} F_1 & F_2 & Ox \\ \frac{a_F}{[F_1+F_2]} \dot{\omega}_r & 0 & \frac{a_O X_1}{[Ox]} \dot{\omega}_r \\ 0 & \frac{a_F}{[F_1+F_2]} \dot{\omega}_r & \frac{a_O(1-X_1)}{[Ox]} \dot{\omega}_r \\ \frac{a_F \nu_{Ox}}{[F_1+F_2]} \dot{\omega}_r & \frac{a_F \nu_{Ox}}{[F_1+F_2]} \dot{\omega}_r & \frac{a_O \nu_{Ox}}{[Ox]} \dot{\omega}_r \end{pmatrix} \begin{matrix} F_1 \\ F_2 \\ Ox \end{matrix}$$

#### 4.2.2.2 Limites de l'approche

Cette représentation multicomposant pour la cinétique chimique a l'avantage de pouvoir être appliquée au cas de la combustion riche avec la cinétique PEA. Elle nécessite cependant que l'énergie d'activation  $Ea$  de la réaction du carburant  $F_1$  avec l'oxydant soit égale à l'énergie d'activation de la réaction du carburant  $F_2$  avec l'oxydant. Cela est valable lorsque les composants du carburant sont de la même famille, mais les valeurs données par Westbrook et Dryer [123] montrent que, pour des espèces de familles différentes, les énergies d'activation ne sont pas toujours comparables (exemple : n-alcanes et cyclo-alcanes).

#### 4.2.3 Cinétique multicomposant à réactions découplées

Une nouvelle cinétique chimique multicomposant est proposée. Celle-ci a été développée afin que soit associée une réaction chimique spécifique à chaque composant du carburant, selon :



où  $P_i$  représente les produits de la réaction de l'oxydant avec le composant  $F_i$  du carburant. Les taux de réaction associés à chacune des réactions du système décrites par l'équation 4.27 sont :

$$\dot{\omega}_{r,F_i} = A_i e^{(-Ea_i/RT)} [F_i]^{a_{F_i}} [O_2]^{a_{O_2,i}} \quad (4.29)$$

$$\dot{\omega}_{r,2} = A_2 e^{(-Ea_2/RT)} [CO]^{a_{CO}} [O_2]^{a_{O_2,Ox}} \quad (4.30)$$

Ainsi le taux de réaction total pour tous les composants du carburant est :

$$\dot{\omega}_{r,F} = \sum_i^{N_c} \dot{\omega}_{r,F_i} \quad (4.31)$$

D'après la remarque faite dans la partie 4.2.1, le taux de réaction est choisi linéaire avec la fraction massique de carburant :

$$a_{F_i} = 1 \quad (4.32)$$

De ce fait, les cinétiques proposées par Westbrook et Dryer [123] et plus récemment Franzelli [46] ne sont pas applicables.

#### 4.2.3.1 Choix des paramètres de la cinétique multicomposant

Cette approche de cinétique multicomposant nécessitant  $a_{F_i} = 1$ , les coefficients suivants doivent être modifiés :

- énergie d'activation  $Ea$ ,
- exposant de concentration de l'oxydant  $a_{O_2,i}$ ,
- constante pré-exponentielle  $A_i$ .

Cette partie expose la démarche mise en place pour déterminer ces coefficients. Les résultats sont ensuite validés sur un cas gazeux.

**Energie d'activation** Dans sa cinétique PEA pour la pseudo-espèce  $C_{10}H_{20}$ , Franzelli adopte une énergie d'activation  $Ea = 4,15 \cdot 10^4$  cal/mol. Cette valeur est proche de l'énergie d'activation obtenue expérimentalement par Freeman et Lefebvre [47] :  $Ea_{exp} = 4,09 \cdot 10^4$  cal/mol. Par ailleurs que le délai d'auto-allumage dépend directement de l'énergie d'activation :

$$\tau \propto \exp\left(\frac{Ea}{RT}\right) \quad (4.33)$$

Afin de respecter l'estimation du délai d'auto-allumage, la valeur de l'énergie d'activation choisie est celle de Franzelli.

**Exposant de concentration de l'oxydant** On cherche à déterminer la valeur de  $a_{O_2,i}$  l'exposant de concentration de l'oxydant dans l'équation 4.29. Pour cela, il faut savoir que la vitesse de flamme dépend de la pression et de la température. Des résultats expérimentaux de Gu [54] et Metghalchi [85] ont montré que l'évolution de la vitesse de flamme  $s_L$  peut être approchée par :

$$s_L(P, T) = s_L(P_0, T_0) \left(\frac{P}{P_0}\right)^{\alpha_P} \left(\frac{T}{T_0}\right)^{\alpha_T} \quad (4.34)$$

où  $P_0$  et  $T_0$  sont respectivement une pression et une température de référence.

	Reaction 1	Reaction 2
<b>Ea</b> (cal/mol)	$4,15 \cdot 10^4$	$2,0 \cdot 10^4$
<b>A</b> (SI)	6 384 839 600	45 000 000
<b>Coefficients de réaction</b>	$a_{F_i} = 1$ $a_{O_2,i} = 0,45$	$a_{CO} = 1$ $a_{O_2,2} = 0,5$

TABLE 4.1 – Coefficients de la cinétique chimique multicomposant

Les coefficients de pression  $\alpha_P$  et de température  $\alpha_T$  sont obtenus par des simulations faites par Franzelli [46] avec CANTERA à partir du mécanisme détaillé de Luche [81]. Les coefficients varient peu en fonction de la richesse, et  $\alpha_T$  est pris égal à une valeur moyenne  $\alpha_T = 1,9$ , tandis que le coefficient de pression est tel que  $\alpha_P = -0,275$ . Ce dernier est directement lié aux coefficients de concentration  $a_{Fuel_i}$  et  $a_{O_2,i}$  d'après Poinot [95] :

$$\alpha_P = \frac{a_{Fuel_i} + a_{O_2,1} - 2}{2} \quad (4.35)$$

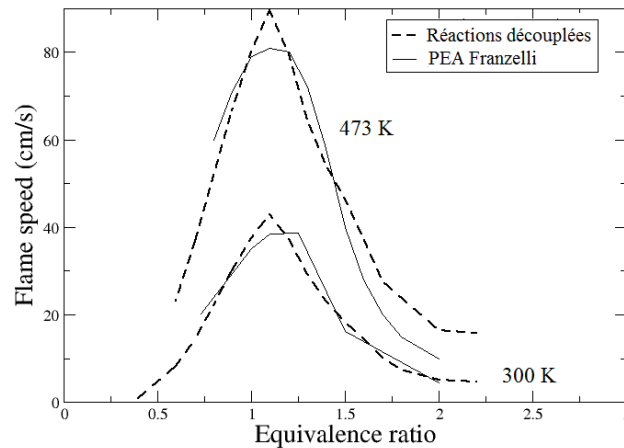
Le fait de fixer l'exposant du composant du carburant  $a_{Fuel_i} = 1$  donne alors :

$$a_{O_2,i} = 0,45$$

**Constante pré-exponentielle** La constante pré-exponentielle  $A_i$  dans l'équation 4.29 est choisie de façon à respecter au mieux la vitesse de flamme ainsi que la température adiabatique de combustion sur le cas simple d'une flamme 1D laminaire monophasique. La valeur  $A_i = 6\,384\,839\,600$  cal/mol est un bon choix.

La réaction de l'oxydation du  $CO$  n'a pas été modifiée par rapport à la cinétique de Franzelli [46]. Les coefficients de la cinétique chimique proposée sont résumés dans le tableau 4.1.

#### 4.2.3.2 Validation de la cinétique chimique

FIGURE 4.1 – Vitesse de flamme laminaire pour  $T_0 = 300$  K et  $T_0 = 473$  K

Dans le cas monophasique pour une espèce de carburant, la vitesse de flamme laminaire a été calculée à pression atmosphérique sur une configuration de flamme plane 1D utilisant

	Combustion pauvre	Combustion riche	Constantes pré- exponentielles différentes	Energies d'activation différentes
Approche d'Aggarwal	✓	✓	✓	Non
Réactions découplées	✓	Non	✓	✓

TABLE 4.2 – Propriétés des cinétiques multicomposant

le même maillage et les mêmes paramètres que ceux présentés dans la partie 3.2.4. Deux températures initiales des gaz frais sont étudiées ( $T_0 = 300$  K et  $T_0 = 473$  K). Dans le cas de la combustion riche les fonctions de correction de Franzelli ont été utilisées. L'évolution de la vitesse de flamme en fonction de la richesse du mélange monophasique est présentée sur la figure 4.1. La vitesse de flamme est globalement bien retrouvée, excepté aux alentours de la stoechiométrie où elle est surestimée.

Afin d'éviter que cette erreur induise un biais dans les simulations de combustion de gouttes multicomposant, les expériences numériques seront menées à une richesse globale égale à  $\Phi_0 = 0,82$ . A cette richesse les grandeurs caractéristiques de la flamme, c'est à dire la vitesse de flamme et la température adiabatique de flamme, sont retrouvées.

#### 4.2.3.3 Discussion sur le domaine de validité de la cinétique chimique

Dans le schéma cinétique présenté ici, le taux de réaction a été rendu linéaire par rapport à la concentration en carburant, afin de pouvoir considérer un carburant multicomposant. L'exposant portant de la concentration du carburant a été fixé égal à  $a_F = 1$ . En monophasique, pour un carburant monocomposant, les grandeurs caractéristiques de la flamme (vitesse, température de combustion) sont retrouvées en régime pauvre et en régime riche. Dans ce cas, la fonction de correction introduite par Franzelli [46] joue son rôle. Or cette fonction  $f(\Phi)$  ne dépend pas linéairement de la richesse. Le cas test de validation exposé dans la partie 4.2.2.1 ne fonctionnera donc pas en combustion riche.

#### 4.2.4 Apports et limites des cinétiques chimiques simplifiées multicomposant

Le tableau 4.2 synthétise les apports et les limites de chacune des deux cinétiques multicomposant. L'approche d'Aggarwal permet de simuler des mélanges globalement riches, tant que les composants du carburant sont proches. A contrario, utiliser une approche à réactions découplées rend possible la combustion de composants très différents mais la combustion en mélange globalement riche donnerait des vitesses de flammes mal évaluées.

### 4.3 Mise en place du calcul

L'état de l'art montre qu'en fonction du diamètre des gouttes et des composants du carburant deux effets, parfois antagonistes, peuvent piloter l'auto-allumage et la propagation d'une flamme : la cinétique chimique et l'évaporation.

L'étude qui suit a vocation à différencier ces deux effets. La prise en compte dans la cinétique chimique du caractère multicomposant du carburant a été fait pour un écoulement monophasique par Byun [23]. Nous nous intéressons donc ici aux modifications sur la flamme apportées par la prise en compte de l'évaporation multicomposant. La structure de la flamme et ses grandeurs intégrales sont étudiées. La figure 4.2 schématise les propriétés des composants du carburant, telles qu'énoncées par l'hypothèse suivante :

**Hypothèse 4.3.1** *Les propriétés des composants sous forme liquide sont différentes, alors que les propriétés thermophysiques et cinétiques des deux composants sous forme vapeur sont identiques.*

A cause des propriétés physiques différentes des composants sous forme liquide, l'évaporation sera séquentielle. Dans le gaz, bien que les propriétés thermophysiques et chimiques des composants soient similaires et correspondent à la pseudo-espèce KERO de Franzelli [46], la modélisation est multi-espèce : une équation de transport existe pour chaque espèce.

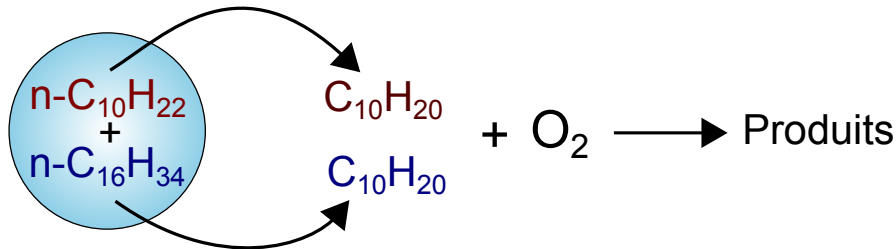


FIGURE 4.2 – Schéma modélisant les propriétés des composants au sein de la goutte, et dans le gaz

### 4.3.1 Choix des composants

Le premier composant des gouttes est le n-décane, un composant classique du kérosène, et avec lequel ont été menées les études sur la flamme laminaire diphasique monocomposant. Sa température normale d'ébullition est  $T_{nb} = 447$  K.

Le second composant est choisi parmi les autres composants du kérosène. Afin que l'hypothèse 4.3.1 soit la plus vraisemblable possible, on choisit une espèce chimique ayant des propriétés chimiques proches du n-décane. Ce composant est donc choisi parmi la famille des n-alcanes. En effet, les vitesses de flamme des n-alcanes ayant plus de six atomes de carbone sont proches. Kumar [67] a étudié expérimentalement la combustion laminaire du n-décane et du n-dodécane et a montré que, pour les mêmes conditions de température, pression et richesse, la vitesse de flamme des deux espèces est proche. La propagation d'une flamme monophasique à travers du n-décane est plus rapide d'environ 3 cm/s par rapport à une flamme de n-dodécane, ce qui représente moins de 10 % de différence. Une flamme laminaire monophasique à travers le n-heptane montre également des vitesses de flamme proches du cas du n-décane, comme le montre l'étude numérique de Neophytou [88].

Enfin, afin que les effets que l'on souhaite observer soient les plus significatifs possibles, on s'intéresse plus particulièrement à deux n-alcanes *extrêmes* présents dans le kérosène :



Composant	Température normale d'ébullition $T_{nb}$
$C_6H_{14}$	342 K
$C_{10}H_{22}$	447 K
$C_{16}H_{34}$	560 K

TABLE 4.3 – Températures normales d'ébullition de composants du kérosène

Paramètres	Valeurs
Diamètre des gouttes ( $\mu\text{m}$ )	25, 50, 100
Fraction massique liquide de n-hexadécane	0%, 25%, 50%, 75%, 100%
Richesse totale $\Phi_0$	0,82 ; 1,47 ; 1,93

TABLE 4.4 – Paramètres de la phase liquide

le n-hexane et le n-hexadécane. Le terme *extrême* souligne que ces deux composants ont des températures normales d'ébullition très éloignées et encadrent celle du n-décane (voir tableau 4.3). Le n-hexane est le composant liquide le plus volatil. Dans les conditions atmosphériques, l'évaporation de ce composant est très importante. A saturation du gaz, la quantité de carburant disponible sous forme vapeur est grande. La part de carburant gazeux par rapport à la part de carburant liquide est donc plus importante pour un mélange contenant du n-hexane, que pour des gouttes composées de n-décane pur. Le processus d'évaporation sera donc facilité, et la propagation de la flamme dépendra essentiellement des propriétés de cinétique chimique.

Le n-hexadécane est le composant liquide le moins volatil. La saturation de l'air en n-hexadécane est donc faible. L'évaporation de ce composant est plus longue que celle du n-décane, et la dynamique de la flamme a plus de chances d'être limitée par le processus d'évaporation. Le choix du n-hexadécane comme second composant permettra l'étude de l'effet de l'évaporation séquentielle sur la dynamique de flamme.

Les deux composants des gouttes sont donc le n-décane et le n-hexadécane. Ces deux composants s'évaporent en deux espèces vapeur distinctes ayant néanmoins les propriétés de l'espèce moyenne  $C_{10}H_{20}$ , dont les propriétés ont été données par Bertier et Dorey [13]. Afin de faciliter la compréhension, on nommera abusivement *n-décane* ou *n-hexadécane* ces pseudo-espèces vapeur.

### 4.3.2 Conditions initiales

La température initiale des gaz frais est  $T = 298$  K, la pression est égale à la pression atmosphérique.

Afin de s'affranchir de la longueur de la zone d'évaporation primaire décrite par Neophytou [88], l'air est initialement mis à saturation. Pour déterminer l'état de l'air à saturation, les lois de Raoult et de Clausius-Clapeyron (voir Eq. 3.18) sont utilisées.

La phase liquide est décrite dans le tableau 4.4. Le cas de la richesse totale égale à  $\Phi_0 = 0,82$  est étudié avec les deux cinétiques chimiques présentées dans la partie 4.2. Les cas de combustion riche ne sont étudiés qu'avec la cinétique d'Aggarwal.

Enfin, rappelons que les diamètres des gouttes sont donnés avant le calcul de l'état de saturation de l'air.

## 4.4 Comparaison des cinétiques chimiques multicomposant

Le but de cette partie est de comparer les comportements des deux cinétiques chimiques multicomposant exposées précédemment. L'étude comparative est faite en régime de combustion pauvre, pour des gouttes composées de 25 à 75% de n-hexadécane, avec un diamètre compris entre  $d = 25 \mu\text{m}$  et  $d = 100 \mu\text{m}$ .

**Profils de taux de dégagement de chaleur.** La figure 4.3 :a) présente le profil de taux de dégagement de chaleur pour des gouttes de diamètre  $d = 100 \mu\text{m}$ , qui mettent le plus en avant les différences de structure de flamme. Le maximum de taux de dégagement de chaleur est plus faible dans le cas de l'approche cinétique développée par Aggarwal. Dans les deux cas, un second pic local apparaît. La figure 4.3 :b), présentant les taux de consommation adimensionnés des deux composants pour la cinétique à réactions dé-couplées, montre que le premier pic est attribuable à la combustion du n-décane tandis que le second maximum local traduit la combustion du n-hexadécane. Dans le cas où les deux espèces réagissent indépendamment avec l'oxydant, le pic dû à la combustion du n-hexadécane est plus éloigné du premier pic. Enfin, l'intégrale du profil est proche pour les deux cinétiques dans les deux cas, ce qui se traduit par une vitesse de flamme similaire.

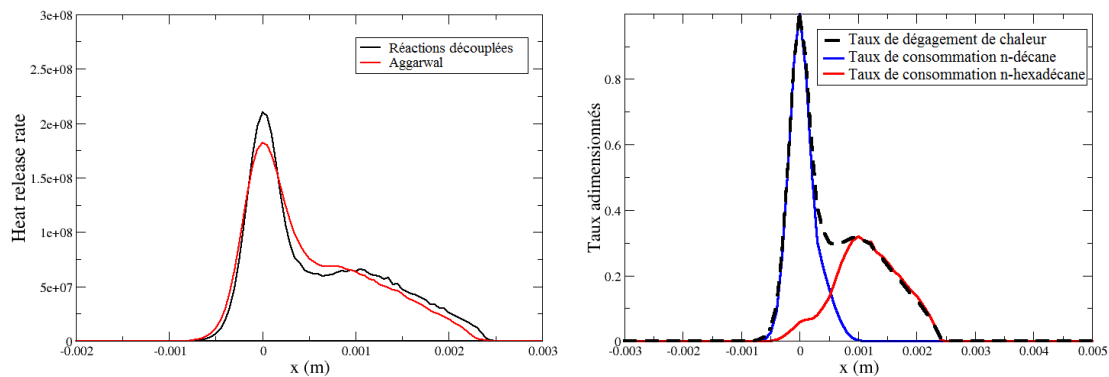


FIGURE 4.3 – Profil du taux de dégagement de chaleur : a) comparaison entre les deux cinétiques globales multicomposant, pour des gouttes de taille  $d = 100 \mu\text{m}$ , composition : 50% n-décane, 50% n-hexadécane, noir : réactions découplées, rouge : modèle d'Aggarwal ; b) comparaison aux taux de consommation adimensionnés des deux composants du carburant, pointillés noirs : profil de taux de dégagement de chaleur, trait bleu : n-décane, trait rouge : n-hexadécane.

**Vitesse de flamme.** La figure 4.4 compare les vitesses de flamme diphasique, à richesse totale  $\Phi_0 = 0,82$ , par les deux cinétiques lorsque la fraction massique initiale de n-hexadécane varie dans les gouttes. Les valeurs observées restent proches et l'écart est de 1% en moyenne.

Dans notre cas bien spécifique où seules les propriétés d'évaporation des composants sont différentes, le choix du schéma cinétique simplifié adopté a peu d'influence sur la dynamique de flamme. En combustion pauvre, les deux cinétiques seront indistinctement utilisées, tandis que l'approche d'Aggarwal permettra la simulation en combustion riche.

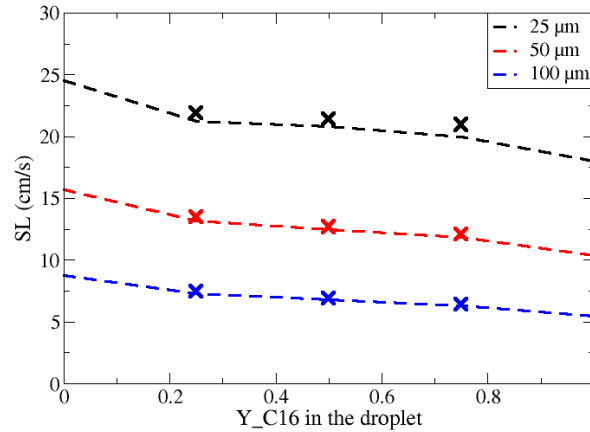


FIGURE 4.4 – Vitesse de flamme diphasique en fonction de la fraction massique de n-hexadécane dans les gouttes, pour plusieurs diamètres, à richesse totale  $\Phi_0 = 0,82$ . Poin-tillés : réactions découplées, croix : approche Aggarwal.

## 4.5 Caractérisation des effets de l'évaporation multicompo-sant des gouttes sur la propagation des flammes

Le chapitre 3 a décrit les effets de la richesse totale du mélange et du diamètre des gouttes sur le taux d'évaporation, les fractions massiques, etc. Nous nous intéressons ici à l'effet de la composition de la goutte sur ces grandeurs. Sauf contre-indication, les profils de la section 4.5.1 sont montrés pour des gouttes de taille  $d = 100 \mu\text{m}$  à richesse totale  $\Phi_0 = 0,82$ . Le diamètre  $d = 100 \mu\text{m}$  est choisi afin de mettre en évidence les effets du caractère multicomposant. A nouveau, les profils sont présentés dans le repère de la flamme, c'est à dire que le taux de dégagement de chaleur est maximal pour l'abscisse  $z = 0$ . Les résultats pour tous les diamètres et toutes les richesses sont ensuite résumés dans la partie 4.5.2.

### 4.5.1 Profils de la flamme en fonction de la composition

**Température des gouttes** La présence de gouttes multicomposant modifie les profils de la flamme. Ainsi la température des gouttes, dont le profil est tracé sur la figure 4.5, traduit clairement la présence des deux composants. L'aspect séquentiel du processus d'éva-poration se traduit par la présence d'un palier de température pour les gouttes contenant 75% de n-décane : la différence de volatilité des deux composants est ainsi mise en évidence.

**Diamètre des gouttes** L'aspect multicomposant se remarque également sur les profils de diamètre de gouttes présentés par la figure 4.6 : les gouttes contenant 75% de n-décane présentent à nouveau un point d'inflexion dû à l'évaporation séquentielle. En raison de la présence de ce point d'inflexion, la définition pour le calcul de l'épaisseur d'évaporation (voir Eq. (3.17)) n'est plus adaptée : le gradient maximal ne permet plus d'approcher cette épaisseur.

Le diamètre maximal est obtenu pour des gouttes composées de n-hexadécane pur.

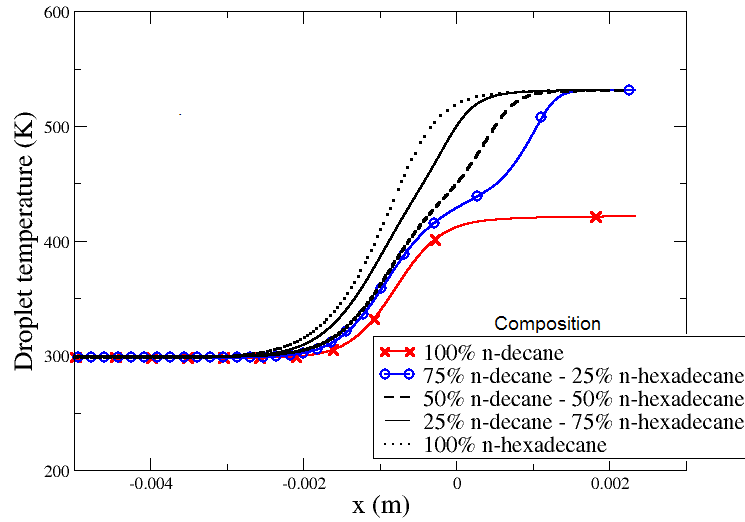


FIGURE 4.5 – Profils de température des gouttes, à  $\Phi_0 = 0,82$  et  $d = 100 \mu\text{m}$ .

A cause de sa température normale d'ébullition plus élevée, le préchauffage dure plus longtemps et les gouttes se dilatent d'autant plus. L'ajout d'un peu de n-décane déclenche plus tôt le processus d'évaporation, c'est à dire que le taux d'évaporation des gouttes devient significatif lorsque la température d'ébullition du n-décane est atteinte. Enfin, l'abscisse marquant l'évaporation complète des gouttes est d'autant plus faible que la goutte contient du n-hexadécane. En effet, l'accélération du gaz et des gouttes au passage du front de flamme est moindre en présence de n-hexadécane. Les gouttes restent plus longtemps à proximité du front la flamme. En d'autres termes, les gouttes de n-décane s'évaporent plus rapidement que les gouttes contenant du n-hexadécane, mais leur vitesse plus importante les emmènent plus loin dans la flamme.

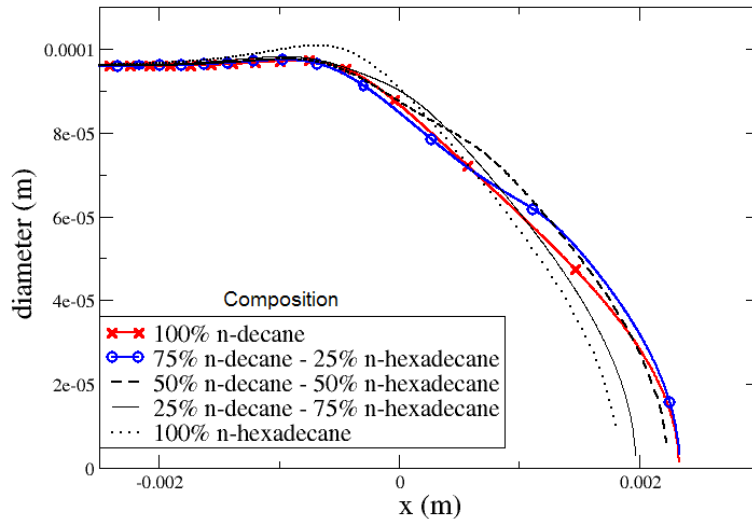


FIGURE 4.6 – Profils de diamètre de gouttes, à  $\Phi_0 = 0,82$  et  $d = 100 \mu\text{m}$ .

A partir du profil de diamètre des gouttes et du profil de vitesse des gouttes, on peut déterminer le temps écoulé depuis l'injection d'une goutte à l'abscisse  $X$  (voir Eq. 4.36)

Composition	Temps d'évaporation (s)
100% n-decane	0.0245
75% n-decane + 25% n-hexadecane	0.0277
50% n-decane + 50% n-hexadecane	0.0319
25% n-decane + 75% n-hexadecane	0.0322
100% n-hexadecane	0.0357

TABLE 4.5 – Délais d'évaporation en fonction de la composition de la goutte, de taille  $d = 50 \mu\text{m}$

et ainsi retracer l'évolution temporelle de la goutte :

$$\tau_{ev}(X) = \int_0^X \frac{1}{v_g(x)} dx \quad (4.36)$$

Le tableau 4.5 présente les temps d'évaporation calculés pour les gouttes de diamètre initial  $d = 50 \mu\text{m}$ . Cela montre que, conformément, plus les gouttes ont une part importante de composant volatil, plus elles s'évaporent vite.

**Taux de dégagement de chaleur** L'analyse des profils de taux de dégagement de chaleur (voir Fig. 4.7) montre que la valeur maximale augmente avec la proportion de n-décane. Ces profils sont normalisés par le taux de dégagement de chaleur maximal obtenu pour des gouttes de n-décane pur. L'importance relative des maxima suivant la composition s'explique par la quantité moindre de carburant disponible sous forme vapeur lorsque l'on augmente la part de l'espèce la moins volatile. Par ailleurs, la figure montre que la présence du n-hexadécane dans la composition des gouttes provoque l'apparition d'un second maximum local. Lorsque la part de n-hexadécane augmente, la position de ce maximum local se rapproche de la position du taux de dégagement de chaleur maximum et son intensité croît. L'augmentation de la part de  $n - C_{16}H_{34}$  réduit le taux de dégagement de chaleur maximal et provoque la réduction de l'accélération des gouttes au passage du front de flamme, ce qui rapproche les taux de consommation maximum des deux carburants.

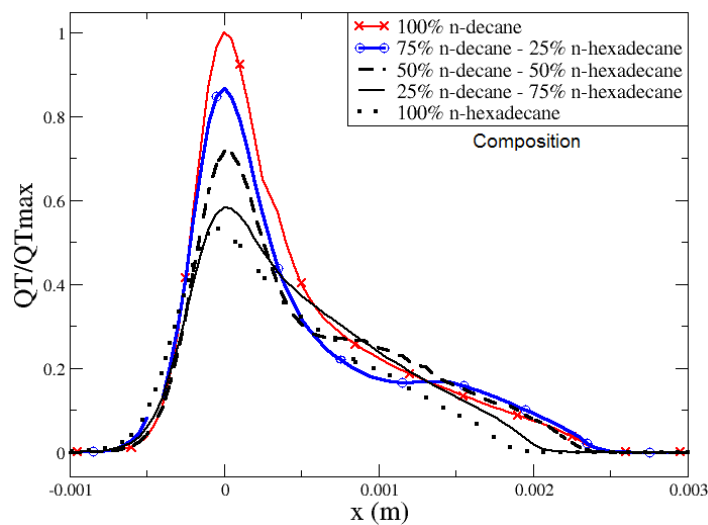


FIGURE 4.7 – Profils de taux de dégagement de chaleur, à  $\Phi_0 = 0,82$  et  $d = 100 \mu\text{m}$ .

**Vitesse des gouttes.** Les écarts de vitesse entre la phase gazeuse et la phase dispersée, adimensionnée par la vitesse du gaz à l’infini aval de la flamme, sont présentés sur la figure 4.8 pour les gouttes de taille initiale  $d = 50 \mu\text{m}$ . Les résultats sont semblables pour des gouttes de taille  $d = 100 \mu\text{m}$ . La différence maximale de vitesse est atteinte pour les gouttes contenant majoritairement du n-décane. Cela s’explique grâce à la figure 4.7 : à richesse totale  $\Phi_0 = 0,82$ , le dégagement de chaleur est maximal pour le n-décane pur. Il faut donc évacuer plus rapidement les gaz brûlés, donc la vitesse des gaz est plus importante. Les gouttes de n-décane pur doivent donc s’adapter à une nouvelle vitesse de l’écoulement porteur supérieure atteintes pour d’autres compositions de gouttes. L’effet de la composition reste néanmoins relativement faible.

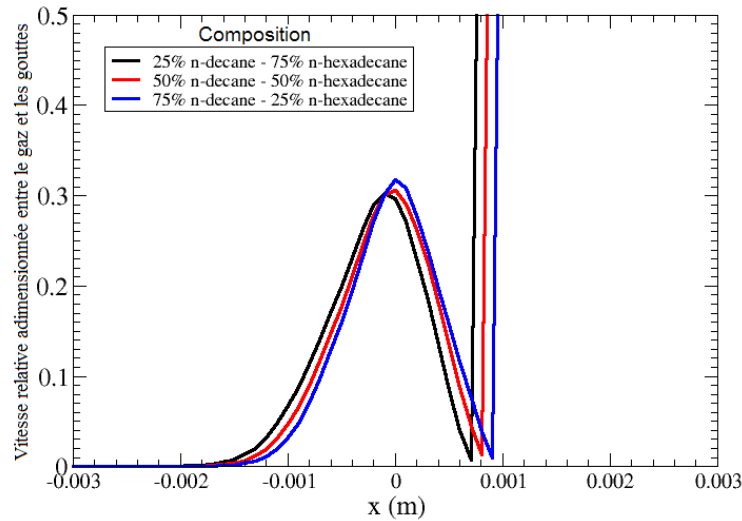


FIGURE 4.8 – Profils de vitesse relative entre le gaz et les gouttes, adimensionnée par la vitesse des gaz brûlés à l’infini aval, à  $\Phi_0 = 0,82$  et  $d = 50 \mu\text{m}$ . Le palier est dû à l’évaporation totale des gouttes, auxquelles une vitesse nulle est alors affectée.

#### 4.5.2 Évolution de la vitesse de flamme

La figure 4.4 présente la vitesse de flamme diphasique en fonction de la fraction massique de n-hexadécane dans la goutte, pour une richesse globale  $\Phi_0 = 0,82$ . Pour améliorer la lisibilité les résultats, la figure 4.9 présente les résultats pour  $\Phi_0 = 1,47$  et  $\Phi_0 = 1,93$ . Conformément aux observations faites pour le taux de dégagement de chaleur, l’ajout du composant le moins volatil entraîne une diminution de la vitesse de flamme. Pour les gouttes de diamètre  $d = 100 \mu$ , la vitesse de flamme peut diminuer de plus de 20%. Pour les gouttes de plus faible diamètre, la composition a relativement moins d’effet sur la vitesse de flamme (10% pour des gouttes de diamètre  $d = 25 \mu\text{m}$ ).

L’étude de la combustion des gouttes monocomposant a révélé qu’avec la cinétique chimique réduite qui est utilisée, la vitesse de flamme dépend directement de la richesse effective. Dans le cas multicomposant, l’évaporation séquentielle peut provoquer l’apparition d’un second maximum local sur le profil de taux de dégagement de chaleur. On s’intéresse à nouveau aux valeurs de la richesse effective au niveau du front de flamme.

La figure 4.10 :a) présente les résultats obtenus lorsque la richesse effective rapportée est celle où le taux de dégagement de chaleur est maximal. On remarque tout d’abord

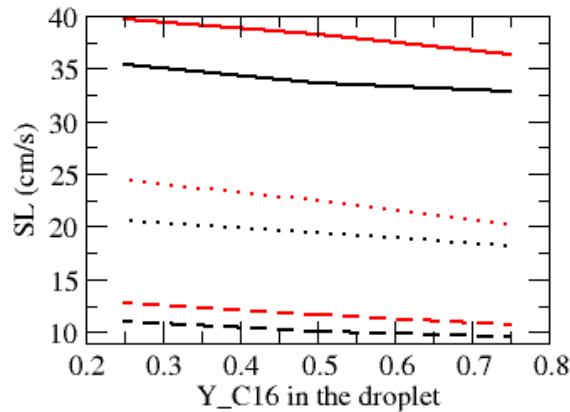


FIGURE 4.9 – Vitesse de flamme en fonction de la fraction massique liquide de n-hexadécane, pour plusieurs diamètres (traits pleins :  $d = 25 \mu\text{m}$ , pointillés :  $d = 50 \mu\text{m}$ , tirets :  $d = 100 \mu\text{m}$ , et richesses globales (noir :  $\Phi_0 = 1,47$ , rouge :  $\Phi_0 = 1,93$ )

qu'un certain nombre de points ne sont pas situés à proximité de la courbe de vitesse d'une flamme monophasique. Ces points correspondent à des cas où le n-décane n'est pas majoritaire dans la goutte et où les gouttes ont un diamètre suffisamment grand. Dans ces cas, la figure 4.11 montre que le profil de taux de dégagement de chaleur atteint son maximum grâce à la combustion du n-hexadécane. Généralement, la richesse rapportée correspond au cas où le taux de consommation du n-décane est maximal. Pour les points se situant loin de la courbe de vitesse du gaz, la richesse effective rapportée prise là où le taux de consommation du n-hexadécane est maximal. La richesse effective, dépendant de l'évaporation des gouttes, est donc plus élevée. Sur le cas exposé par la figure 4.11, le taux de consommation du composant le moins volatil est supérieur à celui du n-décane. Cela s'explique de plusieurs façons :

- il y a peu de n-décane dans les gouttes, il y aura donc peu n-décane sous forme vapeur disponible pour la combustion ;
- la taille des gouttes est suffisamment importante pour qu'apparaissent deux pics locaux de taux de dégagement de chaleur bien distincts ;
- pour les plus petites gouttes ces pics se confondent. Considérer le taux de consommation du n-décane ou du n-hexadécane aura donc peu d'influence sur la valeur de la richesse effective rapportée ;
- la température des gaz est plus élevée là où le n-hexadécane est consommé. La combustion du composant le plus volatil permet donc d'accélérer la consommation du composant le moins volatil, par rapport à un cas où le composant le moins volatil réagirait seul.

Si la richesse effective est prise à l'endroit où le taux de consommation de n-décane est maximum, les points reportés sur la figure 4.10 :b) se rapprochent de la courbe de vitesse de la flamme monophasique. Il apparaît donc que c'est la richesse effective au premier maximum local du taux de dégagement de chaleur, qui est la plus représentative de la vitesse de flamme.

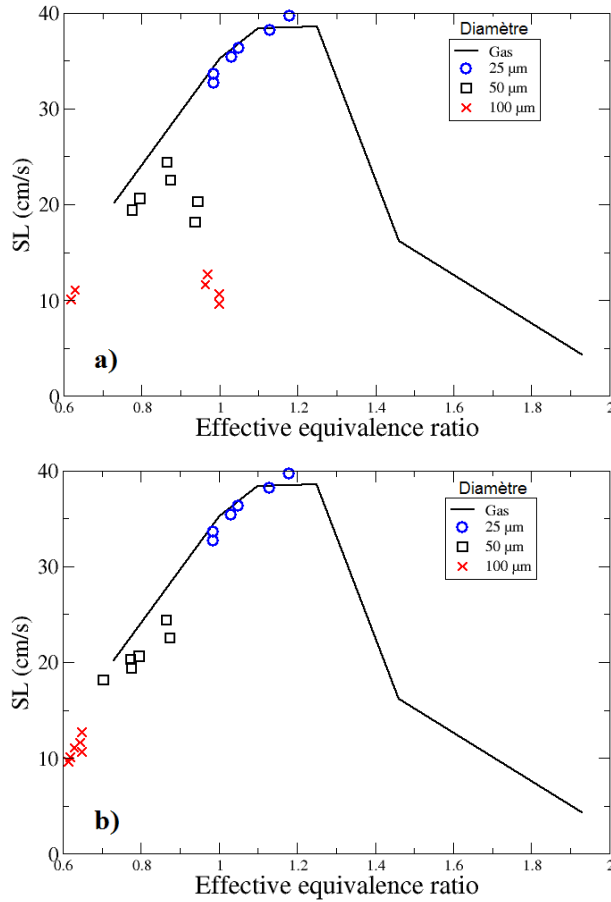


FIGURE 4.10 – Vitesse de flamme en fonction de la richesse effective dans le front de flamme, pour plusieurs diamètres, richesses et compositions.  $\Phi_{eff}$  est pris au point où : a) le taux de dégagement de chaleur est maximal, b) le taux de consommation du n-décane est maximal.

### 4.5.3 Epaisseurs caractéristiques

Les différentes échelles caractéristiques de la flamme sont comparées. On s'intéresse plus particulièrement à l'épaisseur d'évaporation totale et à l'épaisseur de flamme, dont les définitions sont données dans la partie 3.1.3. Le rapport de ces valeurs définit le nombre de Damköhler de l'évaporation, d'après Boileau [16] :

$$Da_e = \frac{\delta_e}{\delta_c} \quad (4.37)$$

Pour une valeur faible de  $Da_e$ , l'évaporation est un processus rapide dont la dynamique a peu d'influence sur la dynamique de la flamme. Au contraire, lorsque  $Da_e > 1$ , l'évaporation a un impact sur la combustion et ralentit la propagation de la flamme.

L'influence de la composition initiale de la goutte est présentée sur la figure 4.12. A diamètre fixé, lorsque la fraction massique liquide de n-hexadécane augmente, le Damköhler d'évaporation diminue. Ce résultat traduit que, lorsqu'on ajoute du n-hexadécane, l'épaisseur d'évaporation croît moins vite que l'épaisseur de flamme.



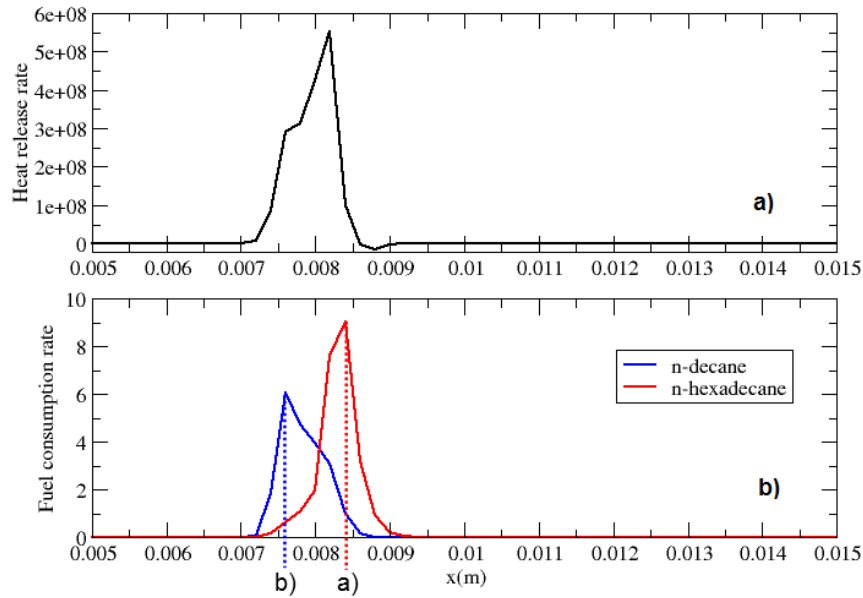


FIGURE 4.11 – Profils de taux de dégagement de chaleur (a) et de taux de consommation du n-décane et du n-hexadécane (b), pour une richesse totale  $\Phi_0 = 1,93$ , des gouttes de diamètre initial  $d = 100 \mu\text{m}$  composées à 25 % de n-décane et à 75% de n-hexadécane. Les pointillés marquent l'abscisse où la richesse effective locale est prise pour la figure 4.10 a) et b).

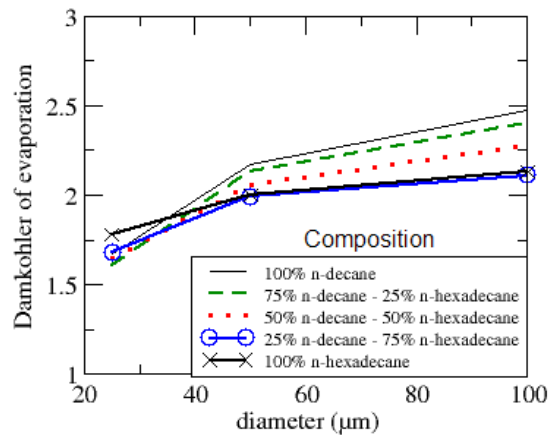


FIGURE 4.12 – Évolution du Damköhler d'évaporation en fonction du diamètre initial des gouttes et de leur composition, à  $\Phi_0 = 0,82$ .

#### 4.5.4 Composition des gaz chauds en régime riche

On s'intéresse aux profils de fraction massique des carburants sous forme vapeur présentés sur la figure 4.13, dans le cas où la composition initiale des gouttes est 75% n-décane + 25% n-hexadécane. La fraction massique de dioxygène  $Y_{O_2}$  n'est pas tracée pour améliorer la lisibilité des résultats.

Dans les deux cas de combustion en régime riche, la fraction massique de n-hexadécane augmente après le front de flamme situé en  $x = 0 \text{ m}$ . La valeur de fraction massique gazeuse

de n-hexadécane relative à la fraction massique gazeuse de n-décane devient alors, dans les gaz brûlés, bien supérieure à la valeur de la fraction massique liquide initiale. Le n-décane évaporé consomme l'oxydant en premier. Lorsque le composant le moins volatil s'évapore enfin, il n'y a plus d'oxydant pour effectuer la combustion.

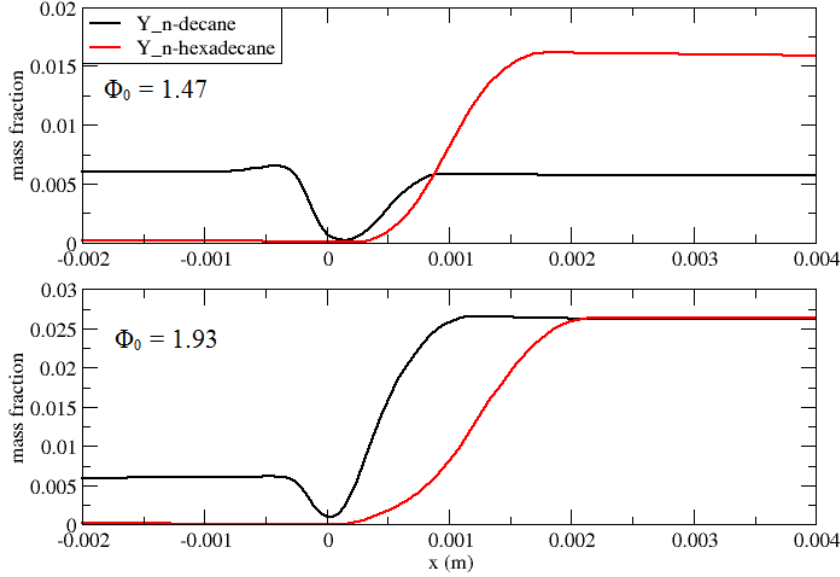


FIGURE 4.13 – Profils de fraction massique de carburant pour une composition initiale 75% n-décane + 25% n-hexadécane, à richesses totales  $\Phi_0 = 1,47$  et  $\Phi_0 = 1,93$ , pour un diamètre  $d = 50 \mu\text{m}$

Lorsque la composition de la goutte est modifiée, la fraction massique des composants du carburant dans les gaz brûlés évolue. La figure 4.14 présente  $Y_{C_{16}}^{b,F}$  la part de n-hexadécane dans le carburant restant (exposant  $F$ ) dans les gaz chauds à l'infini aval (exposant  $b$ ), en fonction de la fraction massique liquide initiale de n-hexadécane, où  $Y_{C_{16}}^{b,F}$  vaut :

$$Y_{C_{16}}^{b,F} = \frac{Y_{C_{16}}^b}{Y_{C_{10}}^b + Y_{C_{16}}^b} \quad (4.38)$$

En combustion riche, quels que soient la richesse totale et le diamètre des gouttes, si le hexadécane est majoritaire dans la composition initiale des gouttes, alors le n-décane est quasiment entièrement consommé. On peut alors définir  $Y_{C_{16},max}^{b,F}$  la fraction massique maximum de n-hexadécane qu'il restera dans les gaz chauds, parmi les composants du carburant.

On fait l'hypothèse suivante :

**Hypothèse 4.5.1** *On suppose que l'évaporation est suffisamment lente pour limiter la combustion. Ainsi le dioxygène n'est pas consommé trop vite par le carburant et l'équilibre CO-CO<sub>2</sub> est réalisé.*

L'hypothèse 4.5.1 est valable pour des gouttes de grand diamètre (voir partie 3.3.1.2). Pour un mélange riche, la fraction massique totale (gazeuse et liquide) de carburant brûlé

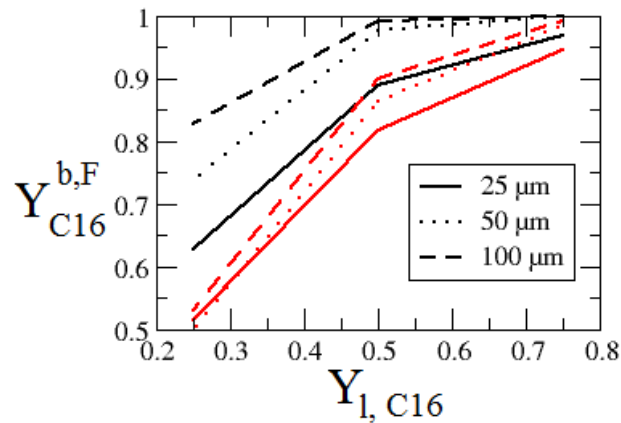


FIGURE 4.14 – Pourcentage de n-hexadécane parmi les espèces de carburant des gaz chauds à l’infini aval, en fonction de la fraction massique initiale de n-hexadécane dans les gouttes, pour deux richesses totales (noir :  $\Phi_0 = 1,47$ , rouge :  $\Phi_0 = 1,93$ )

vaut :

$$Y_F^b = \frac{\Phi_0'}{s} Y_O \quad (4.39)$$

avec  $\Phi_0' = 1$  d’après l’hypothèse 4.5.1.

La part de fraction massique de carburant consommé est donc égale à :

$$Y_F^{conso} = \frac{Y_F^b}{Y_F^{tot}} = \frac{\frac{1}{s} Y_O}{\frac{\Phi_0}{s} Y_O} = \frac{1}{\Phi_0} \quad (4.40)$$

Deux cas peuvent donc être rencontrés :

1. Si le n-décane a une fraction massique totale suffisamment faible dans la goutte  $Y_{C_{10}} < \frac{1}{\Phi_0}$  alors il est possible que le n-décane s'évapore et soit entièrement consommé. Une partie du n-hexadécane réagit ensuite avec l'oxydant. Le schéma 4.15 représente ce cas de figure :

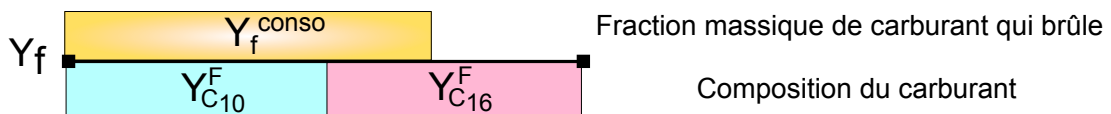


FIGURE 4.15 – Composition du carburant dans un cas où tout le n-décane brûle.

Dans ce cas, le carburant restant dans les gaz chauds (exposant  $b$ ) est réparti de la façon suivante :

$$Y_{C_{10}}^{b,F} = 0 \quad (4.41)$$

$$Y_{C_{16}}^{b,F} = 1 \quad (4.42)$$

2. S’il y a suffisamment de n-décane pour consommer tout le dioxygène, les fractions

massiques liquides dans la gouttes vérifient les inégalités :

$$Y_{C_{10}}^F > \frac{1}{\Phi_0} \quad (4.43)$$

$$\text{soit } Y_{C_{16}}^F < \frac{\Phi_0 - 1}{\Phi_0} \quad (4.44)$$

A ce moment là, il est possible que le dioxygène soit entièrement consommé par le n-décane. Le n-décane restant se retrouve dans les gaz chauds, avec le n-hexadécane évaporé. La figure 4.16 représente ce cas de figure :

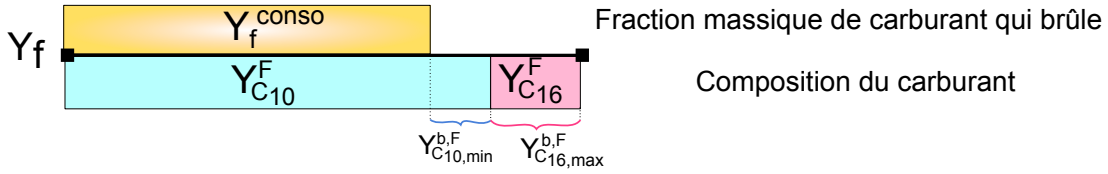


FIGURE 4.16 – Composition du carburant dans un cas où il reste du n-décane dans les gaz chauds.

Dans les gaz chauds, le carburant restant peut être réparti à la limite de la façon suivante :

$$Y_{C_{10},min}^{b,F} = Y_{C_{10}}^F - \frac{1}{\Phi_0} \quad (4.45)$$

$$Y_{C_{16},max}^{b,F} = \frac{Y_{C_{16}}^F}{Y_{C_{16}}^F + Y_{C_{10}}^F - Y_F^{conso}} \quad (4.46)$$

$$= \frac{\Phi_0 Y_{C_{16}}^F}{\Phi_0 - 1} \quad (4.47)$$

Sur la figure 4.13, on remarque qu'il est possible d'être en dessous de la limite  $Y_{C_{16},max}^{b,F}$  pour le n-hexadécane. Cela se produit notamment lorsque le diamètre des gouttes diminue : le délai d'évaporation diminue, l'apport en carburant vapeur est suffisamment rapide pour qu'une très grande partie du dioxygène réagisse avec. Plus de dioxygène réagit alors avec le n-décane et le n-hexadécane, et il en reste peu pour l'oxydation du monoxyde de carbone.

## 4.6 Conclusion, discussion et perspectives

Ce chapitre a étudié l'effet de l'évaporation multicomposant sur la propagation des flammes laminares diphasiques. Une cinétique chimique simplifiée a été créée et comparée à une autre cinétique simplifiée, elle-même introduite dans CEDRE. Afin de séparer les effets dus aux propriétés d'évaporation des effets dus à la réactivité des composants, une hypothèse simplificatrice a été faite : les deux espèces du carburant, une fois sous forme vapeur, avaient les mêmes propriétés. Le premier composant des gouttes est le n-décane. Le second composant, choisi pour sa température normale d'ébullition élevée et ses propriétés cinétiques relativement proches de celle du n-décane, est le n-hexadécane. Pour un régime de combustion pauvre, à diamètre et composition des gouttes variant, les deux cinétiques étudiées ont donné des résultats similaires en terme de structure de flamme et de grandeurs intégrales. Des simulations ont également été faites pour un régime de

combustion riche. Dans tous les cas, lorsque la part de l'espèce la moins volatile augmente dans la composition initiale des gouttes, la vitesse de flamme diminue. Enfin dans le cas des régimes de combustion riche on remarque que le composant le plus volatil, qui est donc le premier évaporé, consomme en majorité l'oxydant. Suivant la composition initiale des gouttes, et la richesse totale du mélange, il est alors possible de n'avoir plus que du n-hexadécane dans les gaz brûlés. Ce résultat est intéressant afin de prédire les émissions polluantes, mais également afin de déterminer les conditions de réallumage du mélange.

La question se pose de savoir quel est l'effet de l'hypothèse concernant les propriétés cinétiques des deux composants. Ainsi, si l'on prend la cinétique chimique réelle du n-hexadécane, on s'attend tout d'abord à ce que la vitesse de propagation de la flamme pour une composition donnée diminue. D'après les observations faites au cours de l'étude et d'après les différentes vitesses de flamme des n-alcanes dans le cas d'une flamme laminaire 1D monophasique, le changement de vitesse de flamme devrait être assez semblable dans les deux cas, pour des conditions atmosphériques. Enfin on a vu que dans les gaz brûlés la part de n-hexadécane, par rapport à celle de n-décane, était importante et dépendait en partie du diamètre initial des gouttes. La prise en compte de la cinétique réelle devrait augmenter le déséquilibre : le n-hexadécane sous forme de vapeur réagira encore moins vite avec l'oxydant disponible, si bien que le n-décane aura encore plus de temps pour réagir avec l'oxydant. Ainsi dans le cas de n-alcanes, ce sont les espèces avec le plus d'atomes carbone qui se retrouveront majoritairement dans les gaz brûlés en régime riche.

La prochaine étape de ce travail consiste donc à prendre en compte les coefficients cinétiques propres aux deux composants choisis, afin de quantifier les effets de la cinétique. Pour valider et déterminer les limites des deux cinétiques chimiques réduites utilisées, il serait appréciable de disposer d'une banque de données et d'observations expérimentales pour la combustion d'un train de gouttes multicomposant. Un calcul avec une cinétique chimique détaillée serait également nécessaire. Par ailleurs, ce travail a été réalisé avec des espèces chimiques de la même famille d'espèces. Un travail similaire pourrait être mené pour d'autres composants provenant d'autres familles (ex : des aromatiques, des esters...) afin de déterminer quelles espèces ou quelles familles d'espèces sont les plus importantes à considérer pour une reproduction fidèle du processus d'allumage et de propagation de flamme du kérosène. En fonction des résultats obtenus concernant tant la qualité de la cinétique simplifiée que la détermination des espèces les plus importantes, un modèle de combustion à thermodynamique continue pourrait être proposé dans la continuité du travail effectué pour l'évaporation par Hallett [56] et Laurent [71] [21]. La composition serait alors représentée par des composants moyens, appelés pseudocomposants.

Les normes imposées pour réduire la pollution demandent que la combustion dans les moteurs s'effectuent en régime pauvre. Cependant, connaître la composition des gaz brûlés en régime riche permet de caractériser les émissions polluantes lors des premiers instants de l'allumage. Par ailleurs il est possible à l'allumage que les vapeurs produites par l'évaporation des gouttes, mais non consommées au début du processus car en régime localement riche, se mélangent ensuite à l'oxydant avant d'être consommée lors de l'établissement de la flamme. Il serait intéressant de connaître l'impact réel que peut avoir le caractère multicomposant des gouttes sur l'allumage complet d'une chambre de combustion.



## Troisième partie

# Simulation numérique instationnaire de l'allumage d'une chambre de combustion.





# Introduction

Afin de prédire l'allumage et d'améliorer les performances des chambres de combustion industrielles, une méthodologie de simulation de l'allumage a été mise en place à l'ONERA. L'allumage et la combustion diphasique qui feront chacun l'objet d'un chapitre dans cette partie (Chap. 5 et 6). L'approche de l'ONERA consiste à utiliser un modèle d'allumage local, couplé au code multiphysique CEDRE. L'étude de l'allumage local et de sa propagation est effectuée sur une chambre monosecteur caractérisée au banc MERCATO. Le MERCATO dispose d'une banque de données très fournie, présentée dans le chapitre 7, qui en fait un sujet d'étude idéal pour le développement et la validation de modèles. Jusqu'à présent, à l'ONERA, l'écoulement était simulé par une approche RANS. Etant donné que l'allumage présente un caractère stochastique, il est intéressant d'utiliser une approche LES pour la simulation instationnaire de l'écoulement (Chap. 8). A partir des champs instantanés obtenus, le modèle d'allumage permet de construire une carte de probabilité d'allumage désignant les positions de bougie les plus favorables. Enfin, un calcul d'allumage instationnaire et de propagation de la flamme est mis en place afin de comprendre le déroulement de l'allumage dans la chambre de combustion (Chap. 9).



# Chapitre 5

## Etat de l'art : allumage et combustion diphasique

### Sommaire

---

<b>5.1</b>	<b>Allumage par dépôt d'énergie</b>	<b>107</b>
5.1.1	Allumage par bougie électrique	108
5.1.2	Sensibilité à l'énergie minimum d'allumage	110
5.1.3	Contribution de l'aspect diphasique	113
<b>5.2</b>	<b>Modélisation du noyau d'allumage</b>	<b>114</b>
5.2.1	Laminar Ignition-Coherent Flamelet Model (LI-CFM)	115
5.2.2	Couplage des équations de Navier-Stokes aux équations de Maxwell	116
5.2.3	Discrete Particle Ignition Model (DPIK)	116
5.2.4	Arc and Kernel Tracking Ignition Model (AKTIM), AKTIMeuler, ISSIM-LES	117
5.2.5	Modèle SparkCIMM	118
<b>5.3</b>	<b>Travaux ONERA : Modèle de noyau d'allumage</b>	<b>119</b>
5.3.1	Hypothèses pour la phase gazeuse	120
5.3.2	Hypothèses pour la phase liquide	121
5.3.3	Mise en équation	122
5.3.4	Domaine de calcul, conditions initiales et aux limites	122
5.3.5	Détermination de l'état initial du noyau	123
5.3.6	Validation	125
<b>5.4</b>	<b>Modélisation de la probabilité d'allumage et de la propagation de la flamme</b>	<b>125</b>
5.4.1	Caractère probabiliste de l'allumage	125
5.4.2	Prédiction d'allumage à partir d'un champ moyen	126
5.4.3	Prédiction de l'allumage à partir de champs instantanés	129
5.4.4	Cartographie de l'allumage : modèle ONERA	130
<b>5.5</b>	<b>Conclusion</b>	<b>133</b>

---

### 5.1 Allumage par dépôt d'énergie

Avant de décrire les paramètres sensibles de l'allumage, on présente ici les différents moyens expérimentaux permettant l'allumage d'une chambre de combustion. L'allumage d'un mélange gazeux, ou diphasique, peut se faire de plusieurs façons dont quelques unes sont rappelées ici :

- par dépôt d'énergie. L'allumage est réalisé soit par la décharge d'une bougie électrique (voir figure 5.1), soit par focalisation de deux faisceaux lasers ;
- par contact avec une surface chaude ;
- par auto-allumage : lorsque certaines conditions de température, de pression et de richesse sont réunies.

L'allumage par focalisation laser fait l'objet de recherches actives puisque cela permettrait de déposer l'énergie dans des zones difficiles d'accès où la propagation du noyau pourrait être favorable. Ce procédé n'est cependant pas encore prêt à être intégré dans des configurations industrielles. Aussi rencontre-t-on surtout des bougies à arc électrique qui offrent fiabilité et possibilité de contrôler le volume et l'énergie déposés. Habituellement les motoristes implantent une bougie à arc en paroi près de l'impact du jet diphasique. On s'intéresse donc par la suite à l'allumage par bougie électrique.

### 5.1.1 Allumage par bougie électrique

**Décharge électrique** Une bougie électrique est composée de deux électrodes composant l'entrefer. Une étincelle se produit en son sein lorsqu'une tension électrique suffisamment importante est appliquée.

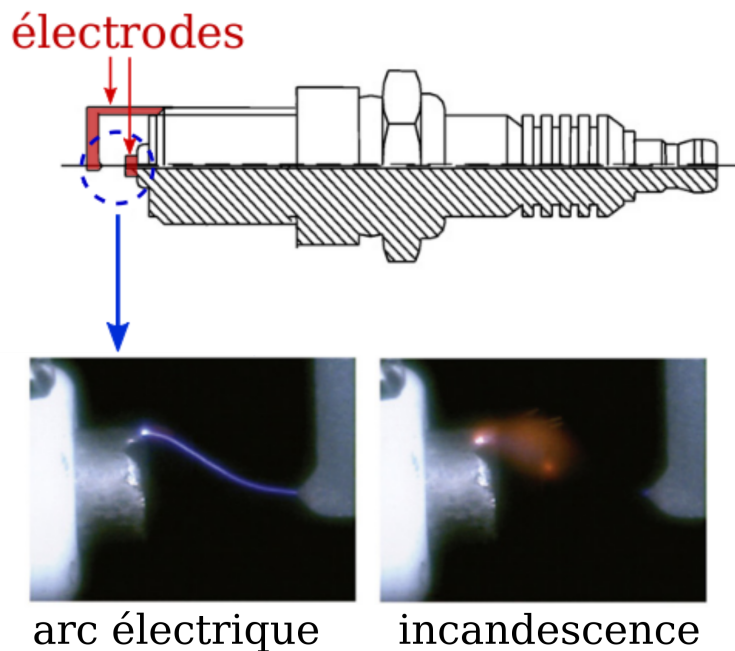


FIGURE 5.1 – Bougie à arc schématisée, visualisation des phases de l'allumage d'après Kawahara et al. [64]

La création de cet arc électrique peut se décomposer en trois phases d'après Maly et Voguel [82] :

1. **Le claquage** (*breakdown*) est la première phase, très courte (quelques nanosecondes), du processus. La tension monte rapidement aux bornes des électrodes. La température des gaz présents dans l'entrefer peut atteindre 60 000 K d'après Sher [108], provoquant la dissociation des espèces présentes ;

2. **La phase d'arc**, qui dure quelques microsecondes : le courant passe alors à travers le plasma formé ;
3. **L'incandescence** (*glow*) : le courant dans le plasma décroît alors exponentiellement.

Les pertes énergétiques au cours du processus d'allumage sont importantes du fait de la chute de tension aux électrodes, mais également à cause des pertes occasionnées par le plasma (conduction thermique vers les électrodes et transferts radiatifs). Ainsi seule une partie de l'énergie électrique fournie aux électrodes est transformée en chaleur pour le noyau. L'estimation de ces pertes, point clé pour la modélisation de l'allumage, reste un point difficile à évaluer.

D'après les bilans d'énergie et les mesures de courant et de tension aux bornes des électrodes faites par Maly et al [82], chacune des phases de l'allumage engendre des pertes variant de 6 % pendant la phase de claquage à 70 % pendant l'incandescence. La phase d'arc perdrait quant à elle 50 % de l'énergie dont elle dispose au début de la phase. Enfin, des visualisations par technique Schlieren de l'inflammation d'un mélange air/méthane ont permis de vérifier que la propagation du front de flamme sphérique est d'autant plus rapide que le transfert d'énergie par le mode de décharge est favorisé.

Eisazadeh-Far et al [43] ont réalisé des visualisations par caméra rapide d'un dépôt d'énergie au sein d'un mélange air/méthane. Ces visualisations, couplées aux mesures de courant et de tension et à un bilan d'énergie ont permis d'évaluer l'évolution du rayon et de la température du noyau. L'énergie déposée varierait entre 10 et 25 % de l'énergie électrique fournie initialement, selon les auteurs. Les pertes totales sont du même ordre que celles trouvées par Maly [82], mais les pertes radiatives prennent une part plus importante (jusqu'à 50 %).

Les banques de données obtenues au cours des travaux expérimentaux ont permis le développement de modèles de noyaux par dépôt d'énergie.

Des approches 0D ont d'abord été élaborées notamment par Pischinger et Heywood [94]. Le modèle de croissance d'un noyau d'allumage au sein d'un écoulement laminaire découle d'un bilan de masse et d'énergie dans un volume de gaz chauds. En s'appuyant sur une visualisation par technique Schlieren, l'hypothèse est faite que le noyau réactif a une forme ellipsoïdale, dont le demi grand axe est orienté selon la vitesse locale de l'écoulement. La surface de contact des électrodes avec le noyau permet le calcul des pertes d'énergie par conduction thermique. Ce modèle nécessite non seulement la connaissance de la vitesse de l'écoulement, mais également la quantité d'énergie déposée.

Une approche 2D cylindrique résolvant les équations de Navier-Stokes, couplées aux équations de Maxwell (équations de l'électro-magnétisme) a été développée par Thiele et al [118] afin de simuler l'allumage d'un mélange air/méthane. Après le claquage, le plasma est modélisé par un cylindre de gaz chauds au sein duquel circule le courant électrique, dont l'intensité permet le calcul d'un terme source pour l'énergie transférée vers le gaz. D'après les auteurs, l'expansion du noyau dans les premiers instants après la décharge ( $t \leq 5 \mu s$ ) est pilotée par l'onde de choc produite par le claquage. Les réactions chimiques, modélisées par une cinétique détaillée, participeraient alors de façon négligeable à l'expansion. Les mécanismes de diffusion sont ensuite prédominants. Le modèle permet également de reproduire les pertes par dissipation thermique au contact des électrodes. Cela serait à l'origine, d'après Thiele et al [118] d'une différence d'expansion du noyau suivant les directions normale ou parallèle aux électrodes, menant à la formation d'un noyau de forme torique. Sans ce transfert de chaleur, on peut alors penser que le noyau aurait une forme sphérique.

Un noyau de forme sphérique est d'ailleurs supposé par Akindele *et al.* [8], qui étudient le dépôt d'énergie par une étincelle dans un écoulement turbulent non-réactif. La décharge de la bougie est modélisée par une température initiale  $T_1 = 10^4 K$  déposée dans un rayon  $r_0$ . L'énergie déposée est alors égale à :

$$E_{spk} = \frac{4}{3}\pi r_0^3 \rho_g \int_{T_0}^{T_1} c_V(T) dT \quad (5.1)$$

D'après les auteurs, l'augmentation de la température et des coefficients de transport laminaires est telle que l'effet de la turbulence sur la propagation du noyau initial est négligeable dans les instants suivant le claquage ( $t \leq 200 \mu s$ ).

### 5.1.2 Sensibilité à l'énergie minimum d'allumage

La réussite locale de l'allumage ainsi que la propagation du noyau créé nécessite de réunir plusieurs conditions. Les paramètres auxquels l'allumage est sensible sont en particulier la quantité d'énergie déposée, la taille de ce dépôt, mais aussi les caractéristiques locales de l'écoulement (composition, vitesse de l'écoulement, etc).

On s'intéresse d'abord à l'énergie minimum d'allumage (ou **MIE : Minimum Ignition Energy**). En effet, pour la réussite de l'allumage il faut que l'écoulement reçoive une énergie suffisante au sein d'un petit volume de gaz réactifs. Si l'on considère que le noyau déposé est de forme sphérique, on peut traduire les conditions à remplir en terme de temps caractéristiques.

Ballal et Lefebvre [10] ont ainsi développé une approche théorique à partir des temps caractéristiques intervenant dans le processus d'allumage, afin d'estimer le succès d'un allumage local. Pour cela, ils font les hypothèses suivantes :

- les réactions chimiques et les temps de mélange sont infiniment rapides ( $\tau_\chi \rightarrow 0$ ) ,
- l'allumage effectif dépend uniquement de la génération d'une quantité de carburant suffisante (c'est-à-dire dans les limites d'inflammabilité) près de la bougie. Cela dépend donc du temps d'évaporation et de la richesse locale.

L'analyse est la suivante : afin de réussir l'allumage, la combustion doit s'amorcer dans le noyau avant que les pertes de chaleur ne diminuent la température des gaz en dessous d'un seuil critique. Ces pertes sont principalement dues à la diffusion de chaleur à la surface du noyau. Pour un écoulement diphasique, il faut également prendre en compte le temps  $\tau_V$  nécessaire à l'évaporation préalable d'une partie du carburant liquide. Il faut donc :

$$\tau_V + \tau_\chi \leq \tau_{diff} \quad (5.2)$$

Le temps caractéristique de la diffusion de chaleur  $\tau_{diff}$  dépend de l'énergie déposée par la bougie, notamment de la température et de la taille du noyau. Les auteurs définissent alors le diamètre de coincement (ou de *quenching*) du noyau  $d_q$  pour lequel le dégagement de chaleur est égal aux pertes par diffusion, ainsi qu'une énergie minimum d'allumage  $E_{min}$  qui correspond à la quantité d'énergie nécessaire à l'échauffement des gaz (dans le volume défini par  $d_q$ ) jusqu'à la température adiabatique  $T_{ad}$  de flamme d'un mélange stœchiométrique :

$$E_{min} = C_{p,air} \rho_{air} (T_{ad} - T_0) \frac{\pi d_q^3}{6} \quad (5.3)$$

où  $T_0$  correspond à la température des gaz frais.

Un bilan d'énergie appliqué à une multitude de configurations de l'écoulement diphasique (brouillard monodisperse ou polydisperse, carburant prévaporisé ou non, écoulement

turbulent ou non ...) permet d'obtenir des corrélations pour le diamètre  $d_q$ . Un ensemble d'essais pour les nombreuses conditions présentées a été mené par Ballal et Lefebvre [10] avec une bougie électrique dont la taille de l'entrefer est variable. Dans un premier temps, le combustible était gazeux et seuls le taux de turbulence de l'écoulement et la richesse du mélange variaient. Des expériences ont ensuite été menées sur des brouillards de gouttes, en changeant le carburant liquide. La figure 5.2 présente les énergies minimum d'allumage obtenues pour différentes richesses liquides, diamètres et carburants. Les résultats expérimentaux vérifient les relations semi-empiriques pour des richesses inférieures à 1. Les résultats de Ballal et Lefebvre [10] montrent ici que, pour des richesses inférieures à la stœchiométrie, l'énergie minimum à déposer dans l'écoulement pour réussir l'allumage est d'autant plus faible que le diamètre des gouttes est faible, que la richesse est proche de la stœchiométrie et que le carburant liquide a un fort nombre de Spalding massique, traduisant sa capacité à s'évaporer.

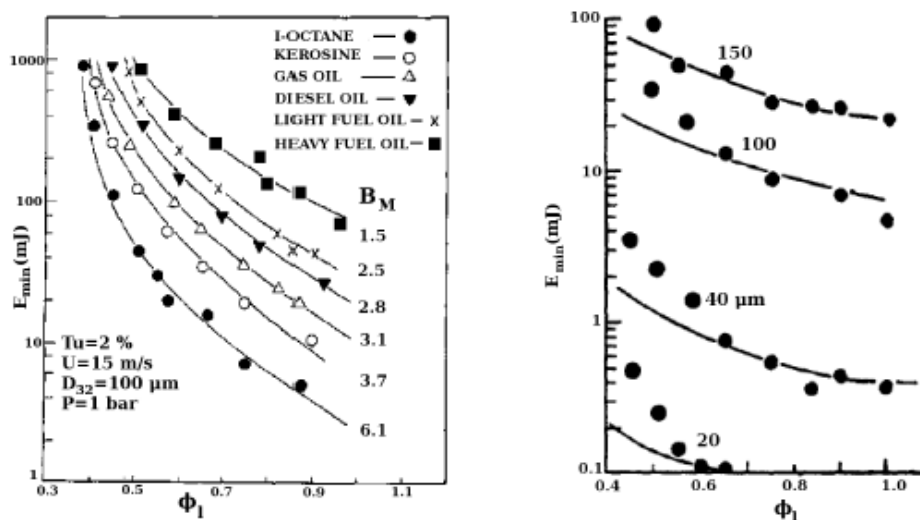


FIGURE 5.2 – Influence de la composition et du diamètre des gouttes sur l'énergie minimum d'allumage (MIE) : comparaison des études expérimentales et des corrélations de Ballal et Lefebvre [11]

La limitation en richesse au cours de l'étude expérimentale de Ballal et Lefebvre [10] ne permet pas, d'après Aggarwal [5], de mettre en évidence la relation non-monotone entre l'énergie d'allumage et la richesse, à diamètre de gouttes fixé, et entre l'énergie et le diamètre lorsque la richesse est fixée.

D'autres études ont été menées sur des cas monophasiques faisant intervenir des mélanges air/méthane (Champion et al. [26]) ou air/propane (Ko et al. [66]). Les investigations expérimentales montrent que la vitesse du front de flamme sphérique augmente lorsque le diamètre du noyau d'allumage dépasse le diamètre critique  $d_q$ .

On s'intéressera plus précisément à l'allumage des écoulements turbulents prémélangés, étudiés par Shy et al. [109]. Dans ce cas, le phénomène d'allumage devient probabiliste. La définition de l'énergie minimum d'allumage est modifiée : il s'agit ici de l'énergie nécessaire à obtenir une probabilité d'allumage de l'écoulement supérieure à 50%. La modification du taux de turbulence peut conduire à deux régimes distincts :

- régime de flammelette : le front de flamme se plisse, mais le noyau reste globalement de la même forme,

- régime de combustion distribuée : la turbulence disperse le noyau en une multitude de flammèches.

Le nombre de Karlovitz, rapport entre le taux de dissipation turbulente et le taux de réaction chimique est introduit :

$$Ka = \left( \frac{u'}{s_L} \right)^2 (Re_T \cdot Pr^2)^{-0.5} \quad (5.4)$$

avec  $u'$  les fluctuations de vitesse et  $Re_T$  le nombre de Reynolds turbulent. Pour une richesse donnée et en faisant varier l'intensité turbulente, les auteurs observent une hausse brutale de l'énergie minimum d'allumage se produit à un certain nombre de Karlovitz. Ce changement définit le nombre de Karlovitz critique  $Ka_c$ , qui dépend de la richesse du mélange gazeux (voir Fig. 5.3).

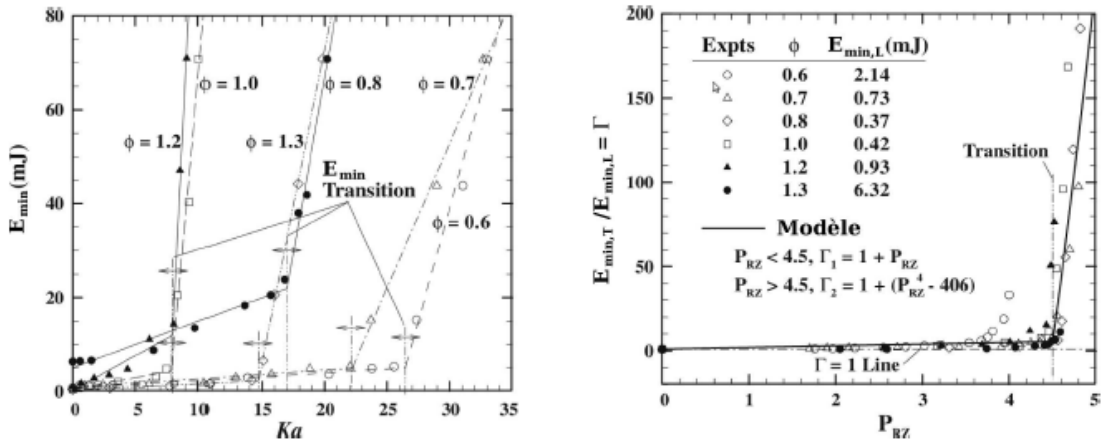


FIGURE 5.3 – Influence des nombres de Karlovitz  $Ka$  et de Péclet sur l'énergie minimum d'allumage pour un écoulement turbulent air/méthane, d'après Shy et al. [109]. A gauche : MIE entraînant 50% de réussite, à droite : MIE normalisé.

L'énergie minimum d'allumage d'un écoulement turbulent  $E_{min,T}$  peut également s'exprimer à l'aide de corrélations faisant intervenir l'énergie minimum d'allumage dans le cas laminaire  $E_{min,L}$  et un nombre de Peclet  $Pe_Z$  défini par le rapport de la diffusivité turbulente sur la diffusivité moléculaire. Ce nombre dépend de la vitesse turbulente  $u$ , de l'échelle de Kolmogorov  $\eta_K$ , et de la taille  $\delta_Z$  du noyau sphérique :

$$Pe_Z = \frac{u\eta_K}{s_L\delta_Z} \quad (5.5)$$

Les corrélations obtenues sont présentées sur la figure 5.3 b), et permettent de lier le rapport des énergies minimum d'allumage turbulent et laminaire au nombre de Peclet :

$$\frac{E_{min,T}}{E_{min,L}} = 1 + Pe_Z \quad \text{si } Pe_Z < 4.5 \quad (5.6)$$

$$= 1 + (Pe_Z^4 - 406) \quad \text{si } Pe_Z > 4.5 \quad (5.7)$$

$$(5.8)$$

Par ailleurs, si l'échelle de Kolmogorov devient plus petite que la taille du noyau,



alors la surface d'échange avec les gaz frais augmente. Cela entraîne une augmentation des pertes par diffusion thermique puis la dispersion complète du noyau par l'écoulement.

### 5.1.3 Contribution de l'aspect diphasique

Le fait que le mélange ne soit plus monophasique ajoute une dimension supplémentaire au problème de l'allumage par dépôt d'énergie. La propagation du front de flamme au sein d'un écoulement diphasique peut être grandement modifiée par la présence de gouttes, comme on l'a présenté au chapitre 2.

Ainsi, Aggarwal [4] a étudié numériquement l'influence du diamètre et de la composition des gouttes, ainsi que l'influence de la richesse globale sur le délai d'allumage d'un brouillard. Dans ce cas l'inflammation est générée par une plaque plane chauffée. La figure 5.4 présente pour le n-décane l'évolution de l'énergie minimum d'allumage en fonction du diamètre des gouttes et de la richesse liquide. A richesse fixée, l'énergie minimum d'allumage correspond à un diamètre de gouttes non-nul. A diamètre de gouttes fixé, l'énergie minimum d'allumage peut être atteinte pour une richesse liquide supérieure à la stoechiométrie.

Sirignano [111] retrouve également que pour une richesse donnée, le diamètre optimal pour l'allumage est une valeur non-nulle. Cela signifie que le délai d'allumage d'un prémélange monophasique n'est pas toujours plus petit que celui d'un mélange diphasique. Cela est dû principalement au caractère non-linéaire du taux de réaction mais aussi, d'après l'auteur, aux inhomogénéités locales de fraction massique et de température du gaz à une échelle inférieure à la distance entre les gouttes.

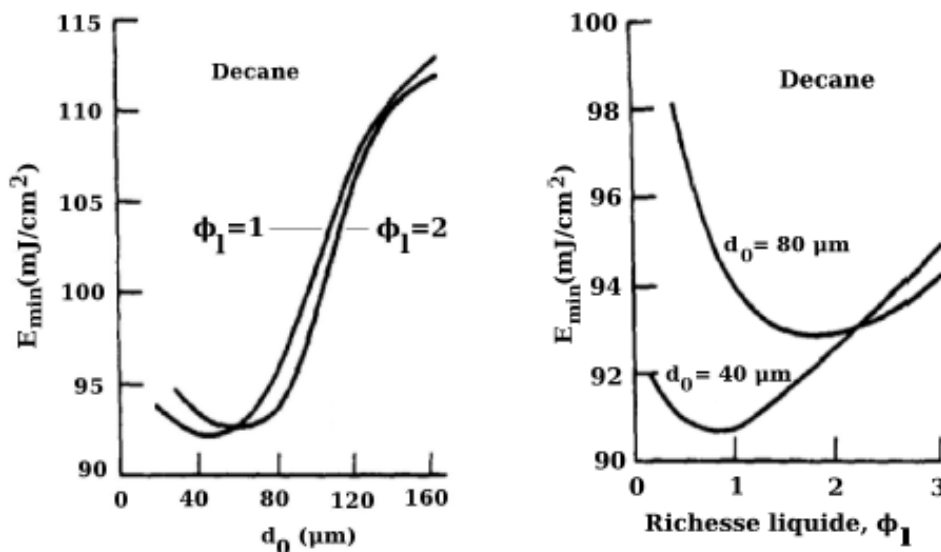


FIGURE 5.4 – Influence du diamètre des gouttes et de la richesse liquide sur l'énergie minimum d'allumage pour un brouillard de gouttelettes de n-décane, d'après Aggarwal [5]

L'influence du taux d'évaporation et de la traînée des gouttes sur la propagation d'un front de flamme sphérique, ou l'extinction du noyau, est soulignée par l'étude numérique de Greenberg [53]. L'auteur précise qu'une augmentation de la traînée induit un temps de séjour des gouttes plus élevé, ce qui augmente les pertes thermiques du noyau dues à l'évaporation des gouttes au passage du front de flamme. Le noyau, pour grossir, doit

donc dépenser beaucoup d'énergie afin d'évaporer les gouttes. S'il en dépense trop, il peut alors s'éteindre. Des simulations numériques directes ont été faites par Wandel et al [121] afin d'étudier l'allumage d'un brouillard monodisperse de gouttes dans un écoulement turbulent. Le dépôt d'énergie est modélisé par un terme source distribué sur une durée  $t_{sp}$ , et les réactions chimiques sont modélisées par une cinétique globale à un étape. Le diamètre des gouttes, la richesse liquide et le taux de turbulence varient. Les résultats trouvés rejoignent ceux d'autres travaux numériques puisqu'un grand diamètre, induisant un temps d'évaporation long, ainsi qu'une richesse trop faible sont peu favorables à l'allumage en ceci que la quantité de carburant sous forme de vapeur est faible. Parmi ces travaux figurent ceux de Neophytou et al. [89], qui étudie l'allumage lorsque le dépôt d'énergie est en périphérie d'un lit fluidisé de gouttes de carburant. La figure 5.5 présente l'évolution temporelle de la flamme, matérialisée par une isosurface de température, dans un lit fluidisé ou en dehors du brouillard. Dans ce dernier cas, la diffusion de la chaleur et la faible présence de gouttes peut entraîner l'extinction du noyau. Dans l'étude de Neophytou [89], il est possible que le noyau d'allumage crée une flamme dont la structure est triple : on retrouve les caractéristiques d'une flamme de diffusion et d'une flamme prémélangée (localement riche ou pauvre).

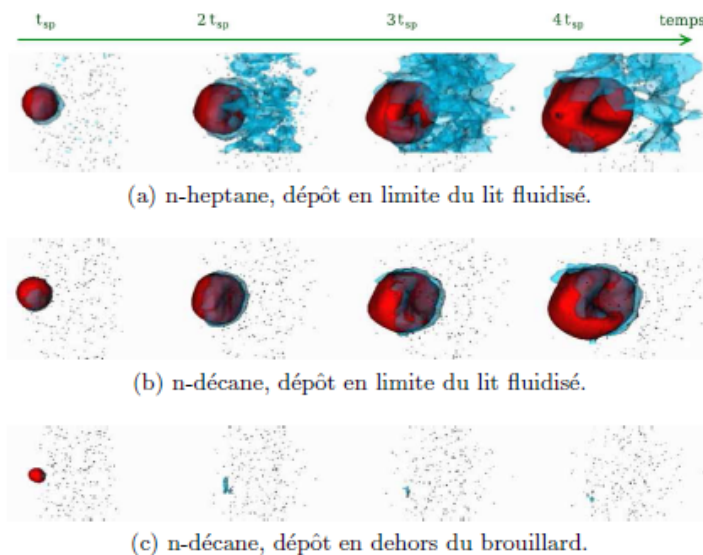


FIGURE 5.5 – Simulations DNS de l'allumage d'un lit fluidisé, évolution temporelle de l'isosurface de température  $T = \frac{T_{ad}}{2}$  (rouge) et de l'isosurface de richesse gazeuse  $\phi_g = 1$  (bleue) ( $t = t_{sp}, 2t_{sp}, 3t_{sp}, 4t_{sp}$ , où  $t_{sp}$  est la durée du dépôt d'énergie), d'après Neophytou et al. [89]

L'influence de la composition et de l'aspect multicomposant des gouttes sur la propagation des flammes diphasiques, et sur les délais d'allumage sont traités dans la partie 2.

## 5.2 Modélisation du noyau d'allumage

L'ordre de grandeur des échelles caractéristiques spatiales et temporelles du noyau d'allumage est petit par rapport aux grandeurs résolues par LES, ou simulées par RANS. Afin de limiter les temps de calcul qu'engendrerait un raffinement local du maillage, d'autres

approches ont été développées. Les modèles sont généralement des modules extérieurs, couplés aux solveurs traitant des phases liquides et gazeuses. La plupart des modèles décrits ici, de complexité variable, sont dédiés à des applications pour les moteurs à piston. Ces modèles correspondent à :

- Laminar Ignition-Coherent Flamelet Model (LI-CFM) [20],
- Couplage des équations de Navier-Stokes aux équations de Maxwell [126],
- Discrete Particle Ignition Kernel (DPIK) [116],
- Arc and Kernel Tracking Ignition Model (AKTIM) [41],
- Spark Channel Ignition Monitoring Model [36].

### 5.2.1 Laminar Ignition-Coherent Flamelet Model (LI-CFM)

Le modèle développé par Boudier et al [20] est composé de plusieurs étapes décrivant chacune une phase de l'allumage. Les premiers instants sont décrits par le modèle *0D* appelée LI (pour *Laminar Ignition*), puis le calcul de la propagation de la flamme est réalisé avec un modèle de combustion nommé ECFM (*Extended Coherent-Flame Model*). L'allumage est considéré comme la succession de trois phases pour lesquelles l'évolution temporelle du rayon du noyau est représentée figure 5.6 :

1. Expansion laminaire du noyau : durant la première phase, l'action de la turbulence est inhibée par la forte quantité d'énergie déposée par la bougie. Cette phase est alors supposée laminaire jusqu'à un temps  $t_1 = t_0 + 0.1 \text{ ms}$ , et résolue par le modèle *0D Laminar Ignition* (LI). Le rayon du noyau à la fin de cette phase est calculé grâce aux paramètres physiques de l'écoulement et à la vitesse de flamme laminaire, le taux de réaction est calculé via une loi d'Arrhenius. La pression est supposée uniforme et constante, et le noyau est supposé à symétrie sphérique.
2. Expansion pseudolaminaire : en régime mixte laminaire-turbulent, l'approche *0D* calcule la propagation de la flamme selon deux équations : une sur le rayon, considérant une croissance laminaire à pression variable, tandis que la seconde porte sur la surface de la flamme et prend en compte le plissement par la turbulence.
3. Croissance pleinement turbulente : à partir de l'instant  $t_2$ , cette phase est résolue par un modèle de flammelette CFM (Coherent Flame Model), après que la solution de la seconde phase ait été projetée sur un maillage. La transition entre les deux phases se produit lorsque l'étirement turbulent  $K_t$  du noyau devient supérieur à l'étirement laminaire  $K_L$ , avec :

$$K_t = \frac{1}{\Sigma} \frac{\partial \Sigma}{\partial t} \quad \text{et} \quad K_L = \frac{2}{r} \frac{\partial r}{\partial t} \quad (5.9)$$

où  $\Sigma$  est la densité de surface de flamme, calculée à partir des données obtenues à la fin de la deuxième phase.

Le modèle ECFM suppose que les petites échelles de la turbulence sont plus grandes que la taille caractéristique du front de flamme, ce qui a pour effet de plisser ce dernier. La surface d'échange entre les gaz frais et les gaz brûlés est donc supérieure au cas laminaire, ce qui augmente la vitesse moyenne de propagation de la flamme. Enfin, le taux de réaction moyen est calculé via la densité de surface de flamme  $\Sigma$  par résolution d'une équation de transport FSD (Flame Surface Density). Son expression est la suivante :

$$\bar{\dot{\omega}} = \dot{\omega}_L \Sigma \quad (5.10)$$

où, dans le cas d'un écoulement laminaire,  $\dot{\omega}_L = \rho_u Y_u s_L$ .

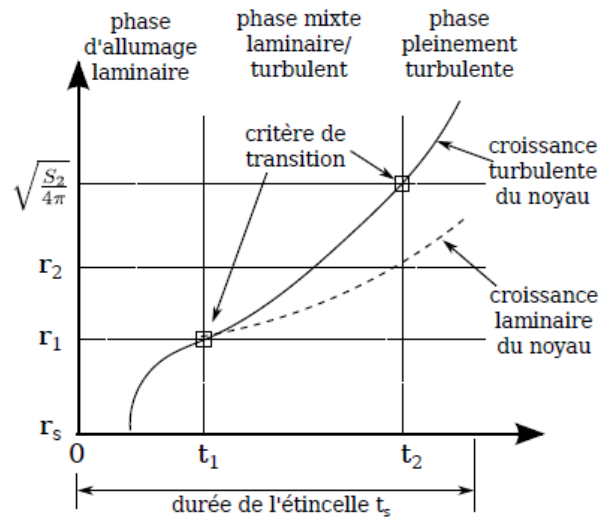


FIGURE 5.6 – Schéma des 3 phases de l'allumage d'après le modèle LI-CFM de Boudier [20]

### 5.2.2 Couplage des équations de Navier-Stokes aux équations de Maxwell

L'approche de Yasar [126] résout les systèmes d'équations de Navier-Stokes et de Maxwell sur un même maillage. Les équations sont couplées via les équations de conservation de la quantité de mouvement et de l'énergie, en prenant en compte respectivement les forces de Laplace et l'effet Joule. Les électrodes n'étant pas maillées, les pertes thermiques à ce niveau ne sont pas prises en compte, contrairement à l'approche de Thiele [118]. Cependant, l'état de plasma et le champ magnétique induit par le passage du courant dans l'arc sont modélisés, et la quantité de mouvement apportée au gaz par le champ magnétique est prise en compte. Dans les deux approches de Thiele [118] et de Yasar [126], les propriétés thermophysiques des espèces sont issues d'interpolations. Dans les premiers instants, à très haute température, ces interpolations ne sont pas forcément précises.

### 5.2.3 Discrete Particle Ignition Model (DPIK)

Dans l'approche de Tan et Reitz [116], le noyau d'allumage est suivi à l'aide de marqueurs lagrangiens représentés figure 5.7. Ces traceurs modélisent le front de flamme et permettent de suivre sa propagation sur une échelle plus petite que la cellule du maillage. Le maillage n'étant pas raffiné autour de la bougie, les coûts de calcul sont diminués.

Les hypothèses faites par les auteurs sont les suivantes :

- le calcul débute après la phase de claquage ;
- la forme initiale du noyau est supposée sphérique, de rayon égal à  $0.5 \text{ mm}$  (d'après des observations expérimentales) ;
- le front de flamme est supposé infiniment fin : sa structure n'est pas résolue. La flamme est modélisée par une discontinuité entre les gaz frais et les gaz brûlés ;
- la limite du noyau est supposée se trouver devant le front de flamme. On suppose qu'il n'y a pas de transfert de chaleur entre le noyau et les gaz frais ;
- la pression et la température sont supposées uniformes à l'intérieur du noyau. A l'extérieur, la pression est uniforme si bien que l'allumage est considéré isobare et la température est égale à la température adiabatique de flamme à la richesse du

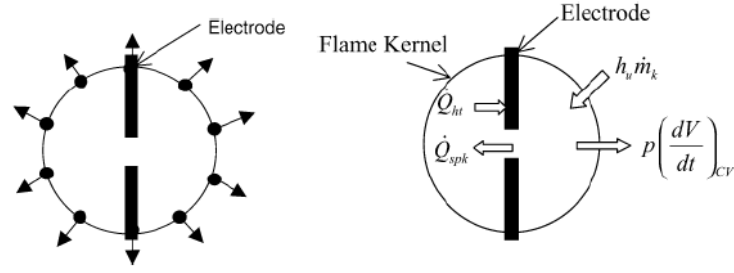


FIGURE 5.7 – Schématisation des traceurs émis et des bilans effectués par le modèle d'allumage DPIK, d'après Tan et Reitz [116]

mélange combustible considéré.

Les traceurs se déplacent selon la direction radiale. L'équation régissant ce transport prend en compte l'aspect turbulent de la combustion, ainsi que la vitesse d'expansion  $s_{plasma}$  liée à l'apport d'énergie par le plasma :

$$\frac{\partial r_k}{\partial t} = \frac{\rho_u}{\rho_b} (s_T + s_{plasma}) \quad (5.11)$$

où  $\rho_u$  et  $\rho_b$  sont la masse volumiques respectivement dans les gaz frais et les gaz brûlés. La vitesse de flamme turbulente  $s_T$  est calculée à l'aide de corrélations, tandis que la vitesse  $s_{plasma}$  est déterminée à l'aide d'un bilan d'énergie interne. Les auteurs observent que la vitesse d'expansion  $s_{plasma}$  devient négligeable devant la vitesse de flamme turbulente lorsque le noyau est déformé par la turbulence.

Lorsque le rayon du noyau devient supérieur à un rayon critique défini en fonction de l'échelle intégrale de la turbulence, la solution du modèle d'allumage sont utilisés pour un calcul en combustion de prémélange. Le front de flamme est alors représenté par une iso-surface, et suivi par une méthode Level-Set.

#### 5.2.4 Arc and Kernel Tracking Ignition Model (AKTIM), AKTImeuler, ISSIM-LES

Cette famille de modèles, développés au sein de l'IFPEN, vise à prendre en compte différents phénomènes spécifiques telle que la modélisation du circuit électrique qui alimente le système. Le modèle AKTIM [41], qui peut-être couplé à un code de calcul RANS, est constitué de quatre modules :

1. Modélisation du circuit électrique, afin de déterminer l'énergie électrique que la bougie fournit à l'écoulement gazeux. La taille de l'entrefer  $d_{ie}$  et la tension de claquage  $V_c$  permettent de calculer l'énergie totale  $E_c$  délivrée pendant les phases de claquage et d'arc électrique, à une constante  $C$  près :

$$E_c = \frac{V_c^2}{C^2 d_{ie}} \quad (5.12)$$

La tension aux bornes des électrodes, différente de  $V_c$ , peut ensuite être modélisée grâce aux caractéristiques du circuit électrique, des chutes de tension aux électrodes, et de la longueur de l'arc électrique.

2. Modélisation de l'arc électrique : l'élongation de l'arc sous l'action de l'écoulement principal est simulée en suivant des traceurs lagrangiens. L'allongement augmente la

tension aux électrodes, ce qui peut provoquer un nouveau claquage. Les phénomènes de claquages multiples sont donc modélisés par ce modèle ;

3. Modélisation d'un grand nombre de noyaux d'allumage possibles (environ 4000, représentés figure 5.8), chacun étant décrit par un traceur contenant comme information une masse de gaz brûlé, initialement nulle, et son excès d'énergie  $E_K$ , initialement égal à 60% de l'énergie de claquage :  $E_K = 0.6E_c$ . L'énergie  $E_K$  évolue grâce à l'apport d'énergie par incandescence, et par les pertes de chaleur au contact des électrodes. Si l'énergie devient supérieure à une énergie critique, la masse de gaz frais contenue dans une sphère de rayon  $r_0$  devient la masse des gaz brûlés ;
4. Modélisation des électrodes via l'immobilisation de marqueurs lagrangiens. La modification locale de la vitesse du gaz par la traînée générée via la présence des électrodes ainsi que les pertes par conduction thermique sont prises en compte.

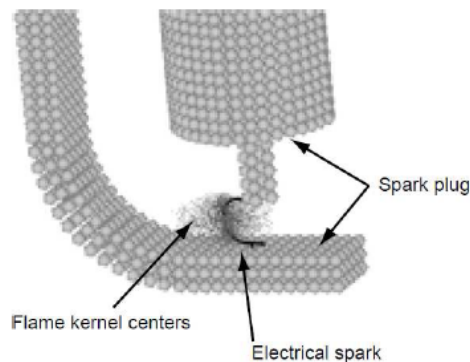


FIGURE 5.8 – Maillage de la configuration étudiée par le modèle AKTIM de Duclos et Colin [41]

Un modèle similaire, appelé AKTImeuler et adapté aux calculs LES, a été développé par Richard et al [100]. La description du circuit électrique est la même que celle du modèle AKTIM. La combustion est modélisée par le modèle CFM-LES, adaptation du modèle ECFM. Deux équations sont couplées : l'une concerne la densité de surface de flamme  $\Sigma$ , tandis que l'autre concerne une variable de progrès qui, par rapport au modèle AKTIM, remplace les marqueurs lagrangiens. Durant les premiers instants de la phase d'allumage, un modèle 0D calcule l'évolution de cette variable de progrès. L'inconvénient est alors que la masse de gaz brûlés ne peut plus représenter qu'un seul noyau. La simulation de claquages multiples n'est alors plus possible.

Colin et Truffin [119] ont proposé une nouvelle version de ce modèle, appelé ISSIM-LES (Imposed Stretch Spark Ignition Model). Cette fois, l'initialisation du calcul est faite par le dépôt d'une sphère de gaz brûlés. De plus, l'évolution du noyau dans les premiers instants après le claquage est modélisée à l'aide d'une équation FSD adaptée prenant en compte les termes sources du noyau d'allumage. Cette modification permet à nouveau la modélisation des claquages multiples pour les simulations LES.

### 5.2.5 Modèle SparkCIMM

Le modèle Spark Channel Ignition Monitoring Model de Dahms et al. [36], développé pour les simulations RANS, est proche du modèle AKTIM. Il se décompose en 3 étapes :

- l'étincelle est modélisée par des traceurs. Une équation de transport basée sur les grandeurs moyennes et fluctuantes de l'écoulement régit leur position. Les points permettant l'allumage de noyaux quasi-laminaires, le long de l'arc, sont localisés par un modèle de flammulette. Si le nombre de Karlovitz est inférieur à un, les noyaux sont convectés. Sinon, l'énergie du noyau est dissipée par diffusion turbulente ;
- des traceurs lagrangiens modélisent ensuite les noyaux laminaires, qui se voient convectés par l'écoulement. Chaque noyau a une masse de gaz brûlés. L'évolution de la masse et de la température des noyaux est calculée à partir de la vitesse de flamme turbulente, et en supposant un front de flamme sphérique ;
- lorsque le noyau a suffisamment grandi, une transition a lieu et le front de flamme est modélisé par une méthode de type Level-Set.

La tabulation des données de la combustion, issue de calculs réalisés avec une cinétique détaillée permet, à chaque étape, de déterminer la vitesse de flamme laminaire et l'épaisseur du front de flamme.

### 5.3 Travaux ONERA : Modèle de noyau d'allumage

Afin d'étudier l'allumage d'une chambre de combustion, la stratégie adoptée par l'ONERA repose sur un module de calcul spécifique à la simulation de la phase d'allumage. Une fois que le critère d'allumage est satisfait, les résultats du module sont pris en compte par le code CFD CEDRE auquel il est couplé. Le modèle 1D développé pour les écoulements diphasiques évite ainsi d'avoir à raffiner localement le maillage de la configuration 3D, ce qui réduit le temps de calcul. Les trois étapes de ce module sont :

1. **Définition des conditions initiales** pour le calcul par le module d'allumage, à partir d'un champ aérodiphasique non-réactif. Pour cela, Linassier [79] a utilisé un champ convergé après des simulations RANS. Un champ instantané d'un écoulement instationnaire peut également être pris en compte.
2. **Calcul du module** : l'évolution du noyau d'allumage, supposé sphérique, détermine si l'allumage local a lieu.
3. **Couplage du module et du code CFD** : le noyau d'allumage obtenu par le calcul est inséré dans le champ aérodiphasique initial. Le code CEDRE simule ensuite la phase de propagation de la flamme au sein de la chambre de combustion.

Le modèle a d'abord été formulé selon une approche 0D par Quintilla [97]. L'évolution de la température et du volume du noyau était calculée en utilisant notamment une cinétique chimique détaillée. Le modèle a été appliqué à une chambre de combustion monosecteur et à un foyer industriel SNECMA. Les simulations bidimensionnelles visaient à déterminer les meilleures positions de bougie.

Le calcul de propagation de la flamme dans le noyau n'a été réalisé que par Ouarti [92] après qu'elle ait couplé le module au solveur de cinétique chimique CHEMKIN. Le modèle a été amélioré par l'ajout de corrélations valables à haute température et par une formulation 1D.

García-Rosa [48] applique une nouvelle formulation 1D, validée partiellement à l'aide de calculs paramétriques sur le délai d'allumage du noyau, et la propagation de flamme laminaire. La cinétique chimique est décrite par une réaction globale.

Par la suite, Linassier [79] a encore amélioré le module en ajoutant une cinétique chimique globale ajustée en fonction de la richesse, proposée par Franzelli [46], afin de

respecter les vitesses de propagation de la flamme en combustion riche. Un calcul RANS de propagation a été réalisé sur la configuration du MERCATO en première approche. Linassier a par ailleurs développé un modèle de probabilité d'allumage utilisant le module d'allumage (voir partie 5.4.4). Ce modèle a été appliqué à la chambre MERCATO sur un champ moyenné afin d'identifier les positions favorables à l'allumage local et à la propagation de la flamme.

Le modèle d'allumage local du noyau, ainsi que le modèle pour la prédiction de la réussite de l'allumage au sein de la chambre de combustion sont présentés dans cette partie. L'approche choisie pour le modèle de noyau d'allumage porte sur le dépôt d'énergie après le claquage de la bougie, et se focalise sur l'établissement et la propagation du front de flamme dans un brouillard de carburant dilué, polydisperse et monocomposant. Les équations de Navier-Stokes sont résolues pour une symétrie 1D-sphérique. Les hypothèses du noyau sont présentées ci-dessous.

### 5.3.1 Hypothèses pour la phase gazeuse

**Hypothèse 5.3.1** *Le noyau est supposé de forme sphérique. Les propriétés du gaz ne dépendent que de la distance au centre du noyau. Le système résolu est donc supposé être à symétrie sphérique 1D.*

Les observations expérimentales effectuées par García-Rosa [48], illustrées figure 5.9, attestent de la pertinence de cette hypothèse. Il faut cependant que le noyau soit de petite taille, d'après Boudier et al. [20] qui précisent que si la croissance initiale du noyau est bien sphérique, la turbulence le déforme ensuite.

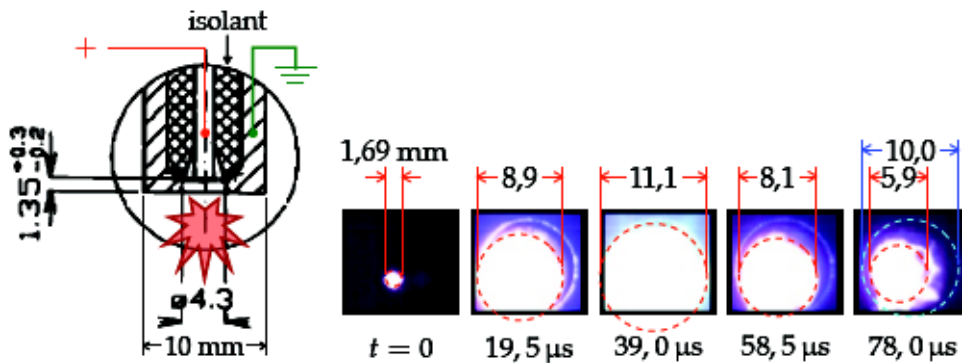


FIGURE 5.9 – Observation de la formation du noyau d'allumage après décharge de la bougie dans la configuration du MERCATO, d'après García-Rosa [48]

**Hypothèse 5.3.2** *Dans les premiers instants après le claquage, le gaz est supposé immobile. Seules la dilatation thermique et l'évaporation des gouttes le mettent en mouvement.*

**Hypothèse 5.3.3** *L'instant initial de la simulation de l'allumage du noyau se situe après la phase de claquage de la bougie et d'arc électrique. On suppose également que l'onde de choc créée par le claquage est évacuée (durée du phénomène : environ 40  $\mu$ s), et que le plasma a disparu. On néglige ainsi la présence d'espèces ionisées, et l'air est supposé avoir sa composition habituelle dans les conditions ambiantes.*



Par conséquence, la température initiale doit être inférieure à 5000 K. Nous nous plaçons ainsi dans le domaine de validité des corrélations permettant le calcul des données thermophysiques  $c_{P,g}$  et  $\mu_g$ .

**Hypothèse 5.3.4** *La décharge de la bougie est représentée comme étant un échauffement adiabatique et instantané d'un petit volume de gaz. Le noyau est donc représenté par une sphère de rayon  $r_1$  dont la température des gaz vaut  $T_1$ .*

**Hypothèse 5.3.5** *L'écoulement à l'intérieur du noyau est supposé laminaire.*

Il en découle que l'influence de la turbulence sur le front de flamme est négligée. L'hypothèse se justifie dans les premiers instants où la température élevée du gaz au sein du noyau fait que les coefficients de transport turbulents sont petits devant les coefficients laminaires.

**Hypothèse 5.3.6** *Les espèces minoritaires de l'air sont négligées. L'air est supposé être constitué seulement de dioxygène et de diazote, et son état est décrit par la loi d'état des gaz parfaits. Les effets de dissociation du dioxygène sont pris en compte par le facteur de compressibilité  $\mathcal{Z}(P, T_g)$ , dont les corrélations nécessaires au calcul sont donnés dans la thèse de Quartì [92] :*

$$\frac{P}{\rho_g} = \mathcal{Z}(P, T_g) \mathcal{R} T_g \quad (5.13)$$

où  $\mathcal{R} = 287,14 \text{ J/K/kg}$  est la constante des gaz parfaits de l'air.

**Hypothèse 5.3.7** *Le carburant est représenté par un corps pur étant soit le n-décane, soit l'espèce de substitution  $C_{10}H_{20}$ . La diffusion massique et la conduction sont décrites par des corrélations issues de la base thermodynamique du code CEDRE, valables jusqu'à 5000 K. Les corrélations préconisées par Franzelli [46], notamment pour le calcul de la viscosité et de la diffusion, sont également utilisées pour le calcul des propriétés thermophysiques de l'espèce  $C_{10}H_{20}$ .*

**Hypothèse 5.3.8** *La combustion du carburant est décrite par une loi d'Arrhenius. Le schéma cinétique adopté est un mécanisme réduit à une ou deux étapes.*

Le mécanisme à une étape qui peut être utilisé est un des mécanismes proposés par Westbrook et Dryer [123]. Les mécanismes à deux étapes sont soit le mécanisme à deux étapes des mêmes Westbrook et Dryer [123], soit le mécanisme à préexponentielle ajustée de Franzelli [46].

### 5.3.2 Hypothèses pour la phase liquide

**Hypothèse 5.3.9** *Les gouttes de carburant sont supposées être au repos dans le noyau durant la simulation effectuée par le modèle d'allumage.*

**Hypothèse 5.3.10** *Les gouttes sont supposées ponctuelles. La répartition des gouttes est considérée uniforme dans le domaine de calcul, c'est à dire le noyau et sa périphérie immédiate. Le brouillard est supposé polydisperse. Chaque particule numérique représente un nombre  $n_k$  de gouttes d'un certain diamètre.*

**Hypothèse 5.3.11** *Le carburant liquide est un corps pur représenté soit par du n-décane, soit par l'espèce de substitution KERO.*

**Hypothèse 5.3.12** *Le chauffage de la goutte est décrit par un modèle de conduction infinie : la température du liquide est supposée uniforme et dépend du temps, et les effets convectifs au sein de la goutte sont négligés.*

**Hypothèse 5.3.13** *Les flux de chaleur et de masse dûs à l'évaporation sont calculés en utilisant les corrélations de Ranz-Marshall [98]. L'écoulement de Stefan, c'est à dire l'épaississement du film de diffusion autour de la goutte, est pris en compte par les corrélations d'Abramzon et Sirignano [2].*

### 5.3.3 Mise en équation

Les équations du modèle d'allumage sont brièvement présentées. Une description plus précise de la formulation 1D et de la résolution numérique est faite par García-Rosa [48] et Linassier [79]. On rappelle que les gouttes sont supposées être monocomposant. Les effets visqueux sont négligés. Les équations de continuité, de conservation des espèces, de quantité de mouvement et d'énergie s'écrivent ainsi :

$$\frac{\partial \rho_g}{\partial t} + \nabla \cdot \rho_g \mathbf{V} = \dot{\rho}_{F,v} \quad (5.14)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} \rho_g Y_i + \nabla \cdot \rho_g Y_i \mathbf{V} = \nabla \cdot (\rho_g \mathcal{D}_{i,g} \nabla Y_i) + \delta_{i,F} \dot{\rho}_{F,v} + \dot{\rho}_{i,\chi} \quad (5.15)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} \rho_g \mathbf{V} + \nabla \cdot (\rho_g \mathbf{V} \otimes \mathbf{V}) = \nabla P \quad (5.16)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} \rho_g h_g + \nabla \cdot \sum_i \rho_i h_i \vec{v}_i = \nabla \cdot (\lambda_g \nabla T) + \dot{\mathcal{H}}_v \quad (5.17)$$

Après développement, le bilan d'énergie 5.17 peut être réécrit de la sorte :

$$\rho_g c_{p,g} \frac{\partial T_g}{\partial t} + \rho_g \vec{v}_g \left( \nabla h_g - \sum_i h_i \nabla Y_i \right) = \dot{\mathcal{H}}_{chi} + \dot{\mathcal{H}}_v - \dot{\rho}_{F,v} h_{F,g} \quad (5.18)$$

$$+ \sum_i \rho_i \mathcal{D}_{i,g} \nabla Y_i \cdot \nabla h_i + \nabla \cdot \lambda_g \nabla T_g \quad (5.19)$$

où

$$\dot{\mathcal{H}}_{chi} = - \sum_i \dot{\rho}_{i,\chi} h_i \quad (5.20)$$

Les termes source de masse et d'énergie  $(\dot{\rho}_{F,v}, \dot{\mathcal{H}}_v)$  et  $(\dot{\rho}_{F,\chi}, \dot{\mathcal{H}}_\chi)$  sont respectivement liés à l'évaporation et à la chimie. Les échanges de quantité de mouvement entre les phases gazeuse et liquide sont négligés, en raison de l'hypothèse sur l'immobilité des gouttes.

### 5.3.4 Domaine de calcul, conditions initiales et aux limites

Les schémas de la figure 5.10 représentent le dépôt de l'énergie dans l'écoulement. L'énergie déposée dans le noyau est modélisée comme un échauffement adiabatique et instantané d'un volume de gaz. Ce volume est considéré sphérique, de rayon  $r_0$ . Le gaz

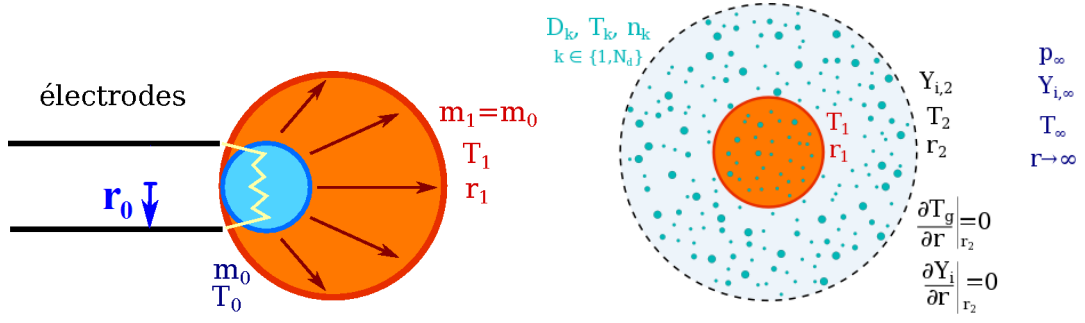


FIGURE 5.10 – Domaines de calcul, conditions initiales et limites pour la simulation du noyau d’allumage, d’après Linassier [79].

dans ce volume s’échauffe alors d’une température  $T_0$  à une température  $T_1$ , et se dilate jusqu’à un volume défini par le rayon  $r_1$ . Le calcul de la croissance du noyau est réalisé dans une sphère de rayon  $r_2$ .

La simulation de l’allumage consiste à simuler la propagation du front de flamme dans le noyau après la dilatation des gaz. Le choix des paramètres  $r_1$  et  $T_1$  est décrit dans le paragraphe 5.3.5. L’écoulement dans lequel est déposée l’énergie de la bougie est à pression et température ambiante.

Le profil de température initiale est donc :

$$T_g(r, t = 0) = \begin{cases} T_1 & \text{si } r \leq r_1 \\ T_\infty & \text{si } r_1 < r \leq r_2 \end{cases} \quad (5.21)$$

Durant la simulation, les gouttes sont supposées immobiles et on suppose que l’expansion du noyau de gaz chaud n’a pas mis en mouvement les gaz :

$$U_r(r, t = 0) = 0 \quad 0 < r \leq r_2 \quad (5.22)$$

On définit à présent les conditions limites. Tout d’abord, les conditions suivantes sont imposées par la symétrie du noyau :

$$U_r(r = 0, t) = 0 \quad \frac{\partial T_g}{\partial r} \Big|_{r=0} = 0 \quad \frac{\partial Y_i}{\partial r} \Big|_{r=0} = 0 \quad (5.23)$$

Par ailleurs le rayon  $r_2$  est choisi suffisamment grand pour que le front de flamme n’atteigne pas la limite du domaine de calcul pendant la durée de la simulation. Les conditions limites du noyau au rayon  $r_2$  sont donc :

$$\frac{\partial U_r}{\partial r} \Big|_{r_2} = 0 \quad \frac{\partial T_g}{\partial r} \Big|_{r_2} = 0 \quad \frac{\partial Y_i}{\partial r} \Big|_{r_2} = 0 \quad (5.24)$$

### 5.3.5 Détermination de l’état initial du noyau

Des visualisations de l’étincelle délivrée par la bougie d’allumage au banc MERCATO permettent de déterminer le rayon du noyau chaud :  $r_1 = 5,1$  mm, d’après Linassier [79]. Le rayon  $r_0$  correspond quant à lui à la moitié de la taille de l’entrefer des électrodes. Il faut alors déterminer la température  $T_1$  du gaz dans le noyau chaud. Pour cela, un bilan de conservation de la masse dans le volume de gaz est effectué avant et après la dilatation :

$$m_0 = \frac{4}{3}\pi r_0^3 \frac{P_\infty}{\mathcal{Z}(T_\infty, P_\infty) \mathcal{R}_S T_\infty} \quad (5.25)$$

$$= \frac{4}{3}\pi r_1^3 \frac{P_\infty}{\mathcal{Z}(T_1, P_\infty) \mathcal{R}_S T_1} \quad (5.26)$$

où la masse  $m_0$  est la masse contenue dans le volume sphérique de rayon  $r_0$ .

En considérant que l'élévation de la température n'est due qu'à l'apport d'énergie  $E_{spk}$  de la bougie, on peut faire le bilan d'enthalpie suivant :

$$m_0 [h_g(T_1) - h_g(T_\infty)] = E_{spk} \quad (5.27)$$

où l'enthalpie du mélange est calculée grâce à la loi de mélange :

$$h_g(T) = \sum_{i \in \mathcal{X}} Y_i h_i(T) \quad (5.28)$$

où l'enthalpie massique  $h_i$  de l'espèce  $i$ , supposée gaz parfait, dépend de la température et s'exprime grâce à l'enthalpie standard de formation et la capacité calorifique à pression constante :

$$h_i(T) = \Delta_f h_i^\circ(T^\circ) + \int_{T^0}^{T_g} c_{p_i}(\theta) d\theta \quad (5.29)$$

où  $T^0$  est une température de référence.

García-Rosa [48] présente la détermination de la température : à partir des équations 5.25 et 5.27, la température  $T_1$  peut être tracée en fonction de l'énergie dans le noyau, et des rayons  $r_0$  et  $r_1$  (voir Fig. 5.11). Garcia Rosa en conclut qu'une énergie de 200 mJ déposée dans l'écoulement est une énergie compatible avec les mesures expérimentales du rayon  $r_0$  de la sphère recevant la décharge et le rayon  $r_1$  du noyau après la décharge de la bougie. Cela correspond à une perte d'énergie égale à 50% lors du claquage de la bougie, valeur constatée dans la littérature. Ainsi, la température  $T_1$  dans le noyau est 3500 K.

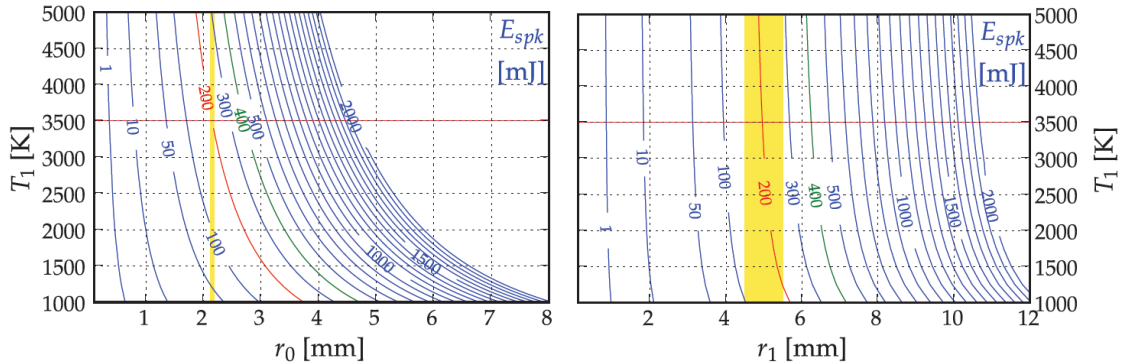


FIGURE 5.11 – Rayon  $r_1$  et température  $T_1$  du noyau après décharge, pour différentes énergies  $E_{spk}$  déposées en conditions ambiantes, d'après García-Rosa.

Le tableau 5.1 résume les conditions initiales de la phase gazeuse et du noyau d'allumage. La distribution des gouttes peut être choisie par l'utilisateur pour une étude paramétrique ou bien déterminée à partir de champs diphasiques calculés par le code CEDRE.

Paramètre	Valeur
Condition de l'air	Ambiante : $p_\infty = 1 \text{ atm}$ , $T_\infty = 300 \text{ K}$
Rayon du noyau de gaz chauds	5,1 mm
Température des gaz chauds	$T_1 = 3500 \text{ K}$

TABLE 5.1 – Conditions initiales du calcul de noyau d'allumage.

### 5.3.6 Validation

García-Rosa [48] et Linassier [79] ont réalisé des études paramétriques afin de valider le bon comportement du modèle de noyau. Linassier [79] a ensuite appliqué ce modèle à la chambre du MERCATO de deux façons. Il a d'abord réalisé une carte des zones favorables à l'allumage d'un foyer. Ensuite, le modèle de noyau d'allumage a été couplé au code de calcul CEDRE afin de réaliser une simulation pseudo-instationnaire de l'allumage d'une chambre de combustion (voir partie 7.3.2.2).

## 5.4 Modélisation de la probabilité d'allumage et de la propagation de la flamme

Afin de réussir l'allumage d'une chambre de combustion le plus souvent et le plus vite possible, déterminer une position de bougie optimale est important. Dans un contexte industriel, une étude expérimentale paramétrique des performances d'allumage du réacteur est donc difficilement réalisable en raison des coûts et des difficultés. La simulation numérique est un outil permettant de réduire les coûts d'étude, mais il est impossible de réaliser de nombreux calculs paramétriques de l'allumage complet de la chambre de combustion. Des modèles ont donc été développés afin de déterminer à moindre coût, à partir de champs non-réactifs, si l'allumage complet est possible à partir d'un point de la chambre. Cela permet de mettre en évidence des positions privilégiées pour la disposition de bougies, ou pour l'allumage par laser. Le développement de ces modèles s'appuie sur le caractère probabiliste de l'allumage, mis en évidence expérimentalement. Les modèles pour l'analyse des champs numériques sont présentés. Ceux-ci peuvent être appliqués à des champs moyens, ou à de multiples champs instantanés. Enfin, les résultats sont comparés aux approches expérimentales.

Les modèles énoncés dans les parties 5.2 et 5.3 permettent de calculer l'allumage local d'un noyau après claquage d'une bougie. La probabilité de réussite de l'allumage local du noyau est dénommée  $P_{ker}$ . Si l'allumage local est réussi, l'allumage de la chambre de combustion nécessite que la flamme puisse grossir et se propager vers le fond amont de la chambre puis se stabiliser près de l'injecteur. La probabilité pour que cet événement arrive est appelée  $P_{ign}$ .

### 5.4.1 Caractère probabiliste de l'allumage

L'expansion d'un noyau d'allumage et sa propagation au sein d'une chambre de combustion sont conditionnées par des événements complexes modifiant à chaque instant les paramètres locaux (diamètre des gouttes, fraction massique de vapeur de carburant, étirement turbulent subi par la flamme ...). L'issue du dépôt d'énergie à une position de bougie donnée peut ainsi varier entre l'allumage et l'extinction selon l'instant où le claquage a lieu.

La partie 5.1.2 a exposé les paramètres auxquels était sensible l'allumage local, notamment l'énergie minimum d'allumage (MIE). Son influence sur la probabilité d'allumer un écoulement prémélangé gazeux dans une chambre a été étudiée expérimentalement par Huang [60]. L'aspect aléatoire dû au caractère turbulent de l'écoulement à l'instant où la bougie dépose son énergie est mis en évidence.

Le caractère probabiliste de l'allumage est précisé par Smith [112] et Ahmed [6], qui étudient l'allumage d'un écoulement air/méthane non-prémélangé. Des études paramétriques portant sur la richesse globale et la vitesse d'injection des gaz sont menées pour 3 configurations différentes : un jet turbulent, un brûleur à contre-courant, et un brûleur de type *bluff-body*. Expérimentalement, la bougie d'allumage a été déplacée de façon à obtenir une carte de probabilité d'allumage, la probabilité étant obtenue pour chaque position après 50 claquages indépendants.

Le succès de l'allumage sur des configurations de jet turbulent et de brûleur *bluff-body* a été corrélé à la richesse locale, calculée à partir d'une fraction de mélange mesurée par technique PLIF-acétone, et au champ de vitesse gazeuse grâce à des mesures LDV des vitesses moyennes et fluctuantes. Pour une configuration bluff-body, proche d'un système d'injection industriel, les résultats montrent que l'allumage est favorisé dans les zones où la richesse du mélange est proche de l'unité. En revanche, dans la zone de recirculation centrale où la richesse est faible, la probabilité d'allumage est quasi-nulle.

Marchione et al [83] ont étudié la même configuration bluff-body dans le cas d'un écoulement diphasique. Les gouttes sont composées de n-heptane. Les zones favorables à l'allumage identifiées, en rouge sur la figure 5.12, sont les mêmes que les zones obtenues dans le cas monophasique. Une séquence continue de claquages de la bougie, pour différents points le long de la paroi par rapport à l'axe de la chambre, a été réalisée. Pour chaque position, les auteurs ont ainsi calculé l'efficacité  $\eta_{ign}$  d'une séquence d'étincelles définie comme le pourcentage d'étincelles qui entraîne l'allumage du foyer, et ce en fonction de la durée de la séquence. Il apparaît alors que l'allumage est favorable au niveau de la section correspondant à la largeur maximale de la zone de recirculation centrale. Cette zone est riche en carburant et la flamme peut se propager à contre-courant.

### 5.4.2 Prédiction d'allumage à partir d'un champ moyen

Afin de prédire la capacité d'allumage d'une chambre à partir d'un champ moyen, des outils qui ont d'abord été développés consistent en l'analyse des champs moyens de l'écoulement obtenus par simulation RANS. Richardson [101] a ainsi développé un modèle utilisant des traceurs lagrangiens représentant chacun un noyau d'allumage possible (comme dans le modèle AKTIM (voir partie 5.2.4)). Ces traceurs sont convectés par l'écoulement selon un modèle de Langevin :

$$dx_i = U_i^* dt - \tilde{s}_L \frac{\overline{U_{g,i}}}{|\overline{U_{g,i}}|} dt \quad (5.30)$$

$$dU_i = - \left( \frac{1}{2} + \frac{3}{4} C_0 \right) \frac{k}{\epsilon} (U_i^* - \overline{U_{g,i}}) dt + (C_0 \epsilon)^{0.5} dW_i \quad (5.31)$$

où  $dW_i$  est une variable aléatoire (processus stochastique de Wiener), et  $C_0$  est une constante supposée égale à  $C_0 = 2$ .  $\tilde{s}_L$  est la vitesse de propagation de la flamme, calculée à partir de la vitesse de flamme (elle-même calculée à partir de la richesse) et de la vitesse locale de l'écoulement porteur.

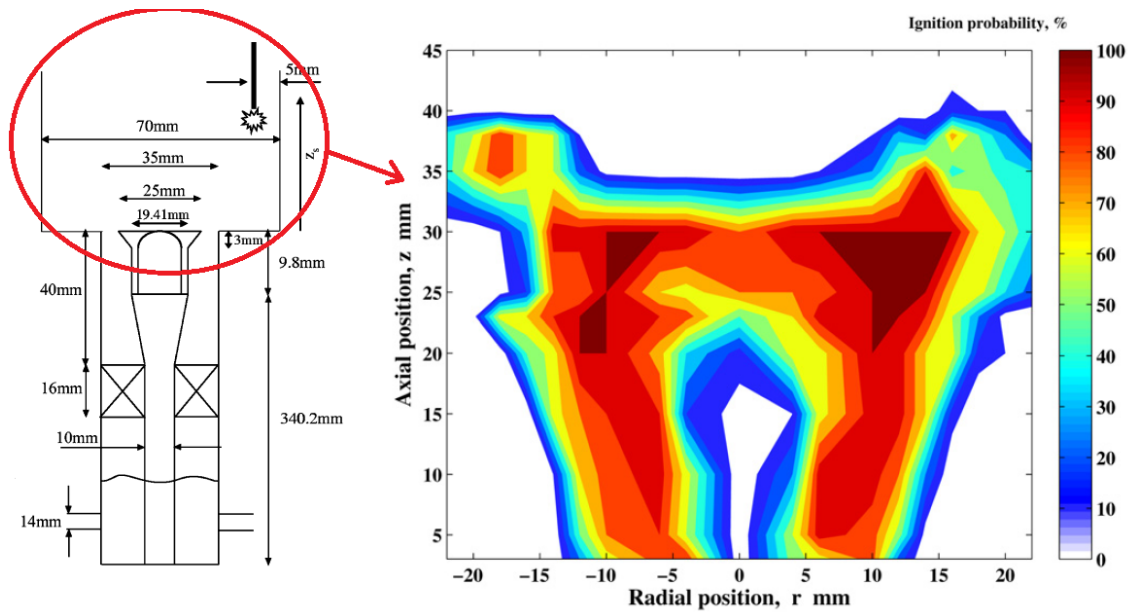


FIGURE 5.12 – Schéma du banc d'essai pour l'étude de la probabilité d'allumage d'un spray de n-heptane par Marchione [83], et carte de probabilité d'allumage obtenue

La température initiale du noyau est supposée égale à la température adiabatique de flamme. L'évolution de la température du noyau suppose ensuite qu'elle puisse rencontrer des zones où les gaz frais présentent localement une richesse permettant l'allumage. Les auteurs supposent que si le noyau se déplace dans une zone où la vitesse de propagation de la flamme  $\tilde{s}_L$  est négative, alors la température  $T_u$  des gaz frais va diminuer à cause des transferts de chaleur par diffusion turbulente :

$$\frac{dT}{dt} = -\frac{k}{\epsilon}(T - T_u) \quad (5.32)$$

Dans ce modèle, l'allumage est supposé réussi lorsque la flamme atteint une zone où  $\tilde{s}_L > U_{g,axi}$  avec une température supérieure à un seuil critique. Pour une position donnée, l'efficacité d'allumage est définie par le pourcentage de noyaux ayant entraîné une inflammation du mélange.

Une approche semblable a été développée par Neophytou [90], et appliquée à la même configuration que celle étudiée par Ahmed [7] et Richardson [101]. Cette fois, les traceurs définissent la flamme. A l'aide d'un modèle de Langevin, les traceurs se déplacent dans un domaine de calcul dont les cellules possèdent un état froid ou brûlé. Lorsqu'il passe dans une cellule, celle-ci passe de l'état froid à l'état brûlé, et un nouveau traceur est émis. La configuration étudiée est présentée par la figure 5.13. Neophytou applique son modèle en s'intéressant plus particulièrement à la zone de recirculation centrale. La figure 5.14 montre le transport des traceurs dans la chambre. A chaque itération et pour chaque traceur, le nombre de Karlovitz  $Ka_p$ , qui compare les échelles de temps chimique et turbulent, est calculé :

$$Ka_p = 0,157 \left( \nu \frac{u_p^{3'}}{L_m} \right)^{0.5} \frac{1}{s_L^2} \quad (5.33)$$

où  $u_p'$  est la vitesse fluctuante de la particule,  $L_m$  est l'échelle de turbulence vue par la particule et enfin la vitesse de propagation de flamme laminaire  $s_L$  est calculée grâce à des corrélations permettant d'approcher les valeurs obtenues pour une flamme diphasique. Le traceur, qui constitue un élément de la flamme, survit si son nombre de Karlovitz est supérieur à un nombre critique  $Ka_{crit}$  (égal à  $Ka_{crit} = 1,5$ ) pour des écoulements prémélangés, d'après Abdel-Gayed et Bradley [1]).

L'efficacité d'allumage calculée est le pourcentage de cellules dans l'état brûlé à la fin de calcul.

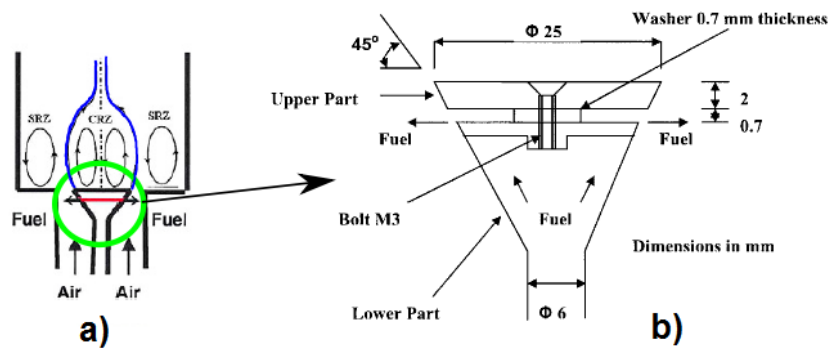


FIGURE 5.13 – a) Schéma de la configuration étudiée par Ahmed [7], Richardson [101] et Neophytou [88]; b) Schéma du système d'injection bluff-body.

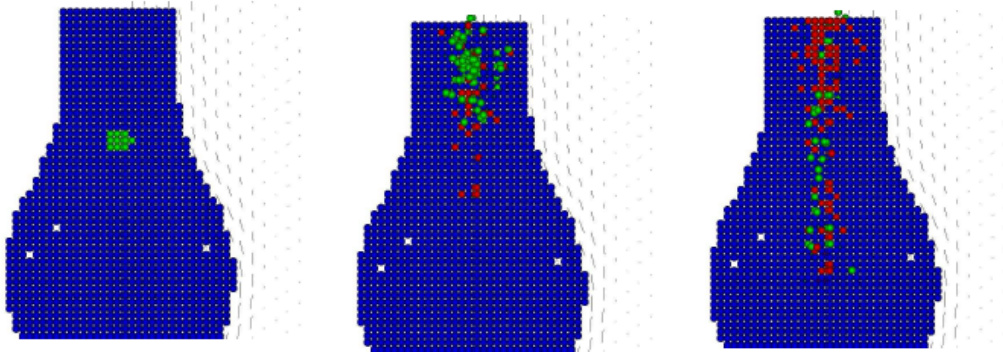


FIGURE 5.14 – Processus de prédiction de l'allumage : évolution des traceurs lagrangiens (bleu : non allumé, vert : traceur en mouvement, rouge :  $Ka > Ka_{crit}$ ) à différents instants (0 ms, 3 ms, 6 ms), d'après Neophytou [90]

Les résultats numériques pour la géométrie bluff-body sont comparés à des résultats expérimentaux sur la figure 5.15. Richardson [101] modélise une partie de la chambre (Fig 5.15 :b), et Neophytou se concentre sur la zone de recirculation centrale (Fig 5.15 :c). Les résultats présentent les champs de probabilité d'allumage, et sont cohérents entre eux bien que Neophytou [88] montre que la zone de probabilité d'allumage maximale est plus étendue.



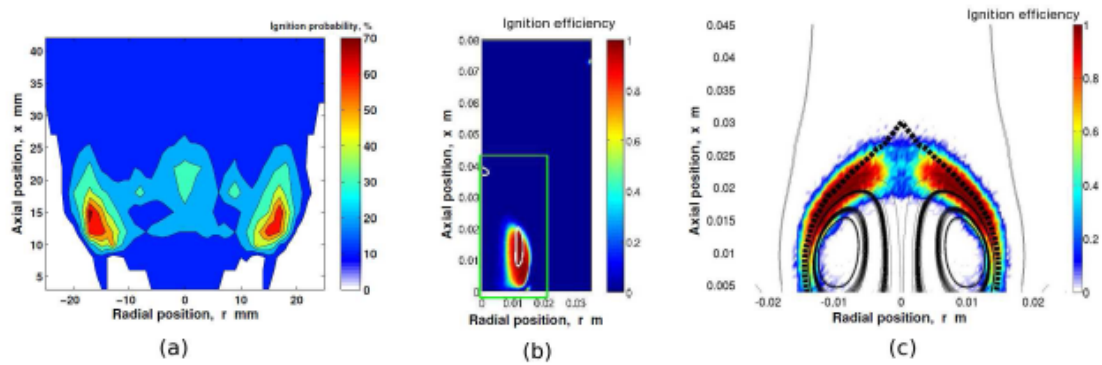


FIGURE 5.15 – Comparaison des résultats de probabilité d’allumage d’un brûleur bluff-body : a) étude expérimentale de Ahmed et al. [7], b) Etude de Richardson [101], sur une moitié du brûleur, c) étude de Neophytou [89], concentrée sur la zone de recirculation centrale.

### 5.4.3 Prédiction de l’allumage à partir de champs instantanés

La prédiction de l’allumage à partir des champs moyennés obtenus par simulation RANS mène à des résultats encourageants, mais ne prend cependant pas en compte le caractère instationnaire de certains phénomènes tels que le Processing Vortex Core (PVC).

L’approche de Richardson [101] a été élargie au cas de simulations instationnaires LES non-réactives par Weckering et al. [122]. Après une expansion pendant 10 ms (donnée obtenue expérimentalement, à adapter en fonction du taux de turbulence et du point de fonctionnement), des traceurs sont libérés depuis la surface du noyau d’allumage et convectés par l’écoulement turbulent. Le pourcentage de noyaux convectés en amont de l’écoulement définit la probabilité d’allumage. Cependant, aucun critère n’est défini pour déterminer l’extinction des noyaux d’allumage.

De son côté, Eyssartier [44] a proposé le modèle I-CRIT-LES s’appliquant à des champs instantanés obtenus par LES. Pour un nombre  $n$  d’instant, le champ est examiné afin de vérifier localement la validation d’un certain nombre de critères :

1. la quantité de carburant doit être telle que l’on est dans les limites d’inflammabilité ;
2. l’énergie déposée par la bougie doit permettre la création d’un noyau de gaz chaud. Pour cela la température du gaz au moment où la phase liquide est préchauffée est calculée. Celle-ci doit être supérieure à une température d’allumage  $T_{ign}$  où les réactions chimiques s’emballent ;
3. le temps caractéristique d’évaporation doit être inférieur au temps de diffusion de la chaleur pour que le noyau grossisse ;
4. la flamme ne doit pas être trop près des parois, et doit respecter la distance de *quenching* (extinction par transferts thermiques entre la flamme et la paroi) ;
5. la flamme doit pouvoir remonter vers l’injecteur : il faut donc que la vitesse de propagation de la flamme soit supérieure à la vitesse locale de l’écoulement. La vitesse de propagation turbulente dépend de la fluctuation de vitesse locale et de la vitesse de flamme laminaire. Cette dernière est estimée grâce à l’approche de la vitesse diphasique de Ballal et Lefebvre [11] valable en cas de combustion pauvre (voir partie 2.2.1).

Si tous les critères sont remplis pour un point de l'écoulement, celui est considéré comme allumé à l'instant choisi. La probabilité d'allumage  $P_{ign}$  en un point, ici exprimé dans le sens où le noyau remontera l'écoulement, correspond au pourcentage d'instant où ce point a satisfait les critères.

La modèle a été appliqué au cas de la chambre MERCATO. Les résultats présentés par la figure 5.16 indiquent que les zones situées dans la zone de recirculation latérale et proches de la paroi, ainsi que les zones situées dans la recirculation centrale, sont favorables à l'allumage. Expérimentalement, La première zone est retrouvée par Lecourt [73], mais pas la zone centrale.

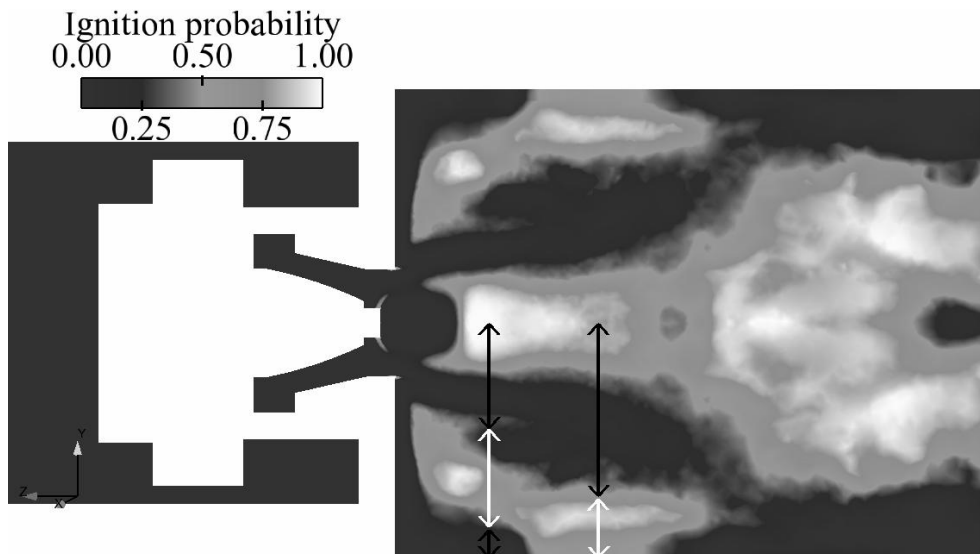


FIGURE 5.16 – Probabilité d'allumage du MERCATO, pour une énergie déposée  $E_{dep} = 100 \text{ mJ}$ , d'après Eyssartier et al. [44]. Les flèches désignent les résultats expérimentaux de Lecourt [73] (flèches blanches : allumage possible, flèches noires : pas d'allumage).

#### 5.4.4 Cartographie de l'allumage : modèle ONERA

Un modèle de prédiction de l'allumage se rapprochant du modèle d'Eyssartier [44] a été développé par Linassier [79] afin de prédire si la propagation du noyau d'allumage dans la chambre de combustion est possible. Dans un premier temps, le modèle de noyau d'allumage décrit dans la partie 5.3 est utilisé pour calculer des grandeurs physiques locales et s'assurer de l'allumage local. Ensuite, on vérifie que le champ aérodiphasique soit favorable afin que la flamme remonte vers l'amont de la chambre pour se fixer aux lèvres de l'injecteur. Ce modèle est donc plus précis que l'application de critères analytiques sur un champ aérodiphasique. Pour s'assurer du caractère favorable de l'allumage complet de la chambre à partir d'un point, un ensemble de critères doit être validé. Ces critères sont détaillés ci-dessous.

##### 5.4.4.1 Inflammation du brouillard

L'énergie déposée par la bougie provoque l'évaporation des gouttelettes de carburant. La richesse gazeuse dans le noyau augmente et la réaction chimique peut s'emballer. Ce critère est satisfait par la présence d'une inflexion sur le profil de la température du gaz,

en rouge sur la figure 5.17. Cette figure présente l'évolution temporelle d'une réussite et d'un échec d'allumage. L'instant où le point d'inflexion est repéré correspond à l'instant d'allumage. On remarquera que ce critère, que l'on applique dans le cas d'un mélange diphasique, se rapproche du critère utilisé pour déterminer l'instant où se produit l'auto-allumage d'un mélange. Dans ce dernier cas, c'est l'inflexion de la température maximale au cours du temps qui détermine le délai d'auto-allumage.

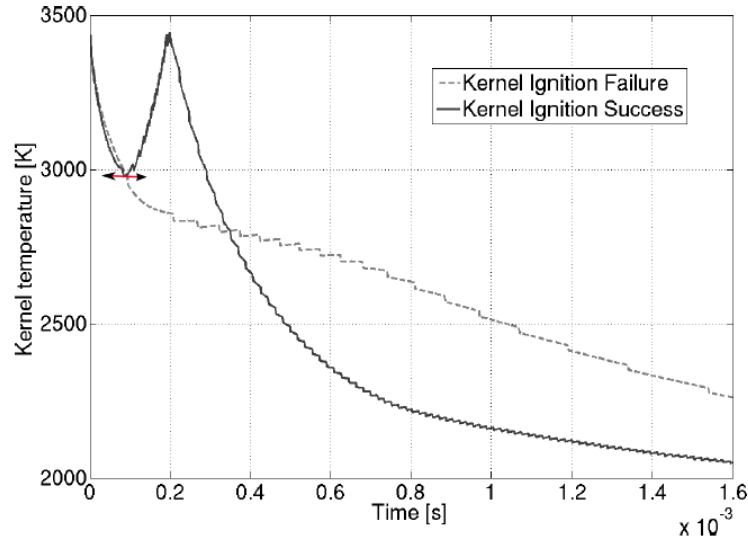


FIGURE 5.17 – Exemple de calcul du critère de la propagation de flamme

#### 5.4.4.2 Croissance du noyau

L'inflammation du brouillard va provoquer la croissance du noyau, dont le développement est calculé via le modèle de noyau laminaire détaillé dans la partie 5.3. Ce critère permet de vérifier que les paramètres nécessaires à la survie du noyau dans l'écoulement sont réunis. La croissance du noyau se manifesterait donc si les conditions de richesse respectent les limites d'inflammabilité et si la granulométrie est favorable. En effet, les gouttes de trop grand diamètre ont un temps d'évaporation très long, qui pourrait freiner l'apport de carburant gazeux à la flamme. Concrètement, cette condition est satisfaite si deux critères sont vérifiés :

- La richesse totale du mélange est supérieure à la limite d'inflammabilité basse :  $\Phi_0 > 0,4$ ,
- Le rayon  $R$  du noyau après la simulation est supérieur au rayon du noyau initial :  $R > r_1$ .

#### 5.4.4.3 Convection du noyau au sein du foyer

Afin que la flamme puisse remonter vers l'injecteur, il faut que la vitesse de propagation de la flamme soit supérieure à la vitesse moyenne de l'écoulement gazeux :

$$s_T > U_{g,axi} \tag{5.34}$$

Linassier [79] a appliqué ce critère sur des champs moyennés obtenus par simulation RANS, aussi a-t-il fallu estimer une vitesse turbulente  $u'$  à partir des variables moyennées.

Pour cela, la turbulence est supposée isotrope et la vitesse de flamme turbulente est approchée par l'hypothèse de Damköhler [38] pour la combustion turbulente prémélangée.

$$s_T = s_L + u' \quad (5.35)$$

La vitesse de propagation laminaire de la flamme est calculée par le module de noyau d'allumage. Cette technique est sans aucun doute plus complexe que l'utilisation de la corrélation de Ballal et Lefebvre (voir Eq. (2.5)), mais elle se révèle également plus juste. En effet, la loi semi-empirique de Ballal et Lefebvre est juste en combustion pauvre mais erronée en combustion riche. Cela est illustré par la figure 2.3, qui montre les résultats obtenus par l'application de l'équation (2.5), et la figure 2.5 qui donne les résultats des simulations numériques. La mauvaise estimation de la vitesse de flamme en régime riche peut conduire à croire que cette vitesse n'est pas assez grande par rapport à la vitesse de l'écoulement, et que le noyau d'allumage n'arrivera pas à se propager en amont. Pour les bougies se trouvant près des parois, la richesse totale est grande et la formule de Ballal et Lefebvre ne peut être appliquée.

Le critère de convection du noyau peut être estimé de deux façons, selon la méthode adoptée :

- pour une approche instationnaire, il est possible de vérifier à chaque instant si l'inégalité (5.34) est satisfaite,
- pour une approche stationnaire, l'application du critère sur un champ moyenné nécessite d'exprimer la probabilité de réalisation dudit critère. Il est donc supposé que la vitesse locale du gaz suit une distribution Gaussienne (voir Fig. 5.18). Linassier démontre alors que la probabilité de propagation de la flamme peut s'exprimer de la sorte :

$$P_{up,axi} = P(s_T > U_{g,axi}) = \frac{1}{2} \left[ \operatorname{erfc} \left( \frac{-s_T + \bar{U}}{u' \sqrt{2}} \right) \right] \quad (5.36)$$

où  $\operatorname{erfc}$  est la fonction erreur complémentaire et  $u'$  est calculé, en RANS, à partir de l'énergie cinétique moyenne.

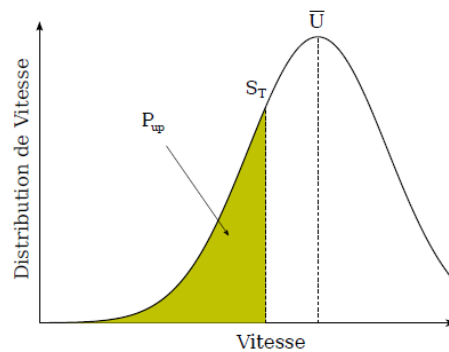


FIGURE 5.18 – Exemple de calcul du critère de la propagation de flamme

Par ailleurs, contrairement aux méthodes de suivi lagrangien de traceurs développées par Richardson [101] et Weckering [122], ce critère est local et, dans le cas de simulations LES, instantané. Le transport et la croissance du noyau sont soumis à de nombreux phénomènes tels que la turbulence, dont les taux d'étirement peuvent varier localement, amenant des poches d'air ou de gouttes qui affecteront l'apport de carburant à la flamme.

Il est donc difficile de déterminer de façon systématique la réussite de l'allumage de la chambre à l'aide d'un critère local.

#### 5.4.4.4 Carte d'allumage

Les résultats de Linassier [79], présentés sur la figure 5.19 montrent que l'allumage est possible près de la paroi. Cette zone est en effet suffisamment riche en carburant, et jusqu'à  $z = 85 \text{ mm}$  environ la zone de recirculation latérale permet de propager la flamme jusqu'à l'injecteur. De plus, Linassier étudie un à un les effets des critères. Il précise ainsi que la zone de recirculation centrale est une région trop pauvre en carburant et qu'à la sortie du diffuseur, où la vitesse du jet est maximale, la probabilité de propagation en amont du noyau est quasi-nulle.

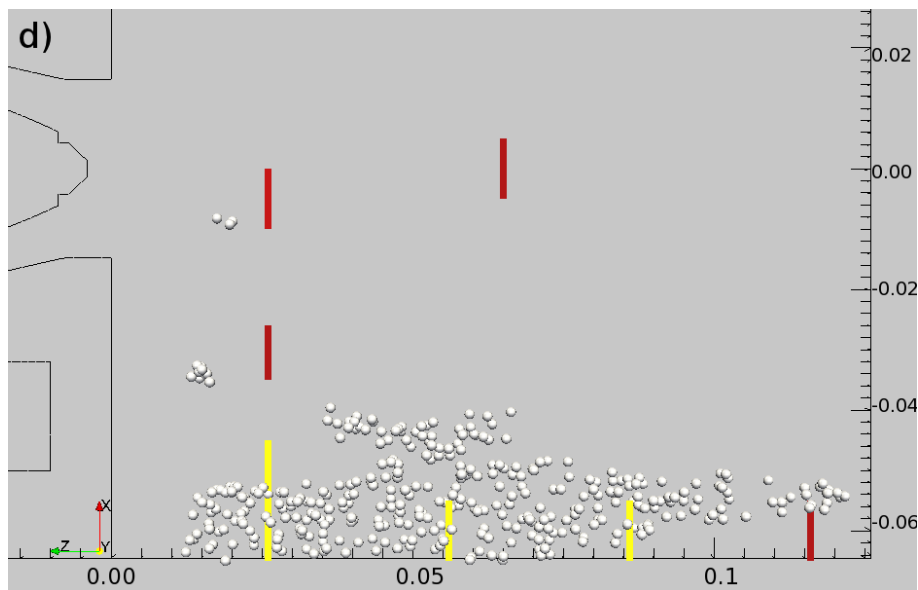


FIGURE 5.19 – Carte d'allumage de la chambre à partir de différentes positions pour le dépôt de l'énergie, à partir d'un calcul RANS. Sphères blanches : l'allumage est possible d'après le modèle numérique, lignes jaunes : allumage favorable d'après les expérimentations, lignes rouges : pas d'allumage constaté expérimentalement, d'après Linassier

## 5.5 Conclusion

Dans la littérature, de nombreuses approches ont été proposées pour l'allumage local de mélanges monophasiques ou diphasiques. L'allumage d'une chambre de combustion est un phénomène probabiliste, et de nombreuses études s'intéressent à présent à déterminer à moindre coût les positions favorables au dépôt d'énergie. L'ONERA a développé un modèle 1D sphérique qui simule l'allumage d'un noyau diphasique. Ce modèle peut être appliqué de deux façons : une multitude d'allumage locaux peut être réalisée afin de déterminer les positions optimales pour la bougie ou l'allumage laser. D'autre part, le modèle peut également être utilisé pour définir les conditions initiales d'un calcul de propagation de flamme au reste de la chambre.



# Chapitre 6

## Etat de l'art : combustion diphasique

### Sommaire

---

<b>6.1</b>	<b>Couplages des phénomènes physiques dans la combustion diphasique turbulente</b>	<b>135</b>
6.1.1	Interaction turbulence-spray	135
6.1.2	Interaction spray-combustion	136
6.1.3	Interaction combustion-turbulence	136
<b>6.2</b>	<b>Structures des flammes diphasiques turbulentes</b>	<b>136</b>
<b>6.3</b>	<b>Diagrammes pour la combustion diphasique</b>	<b>139</b>
6.3.1	Enveloppe des états	139
6.3.2	Diagramme richesse-température	139

---

La combustion diphasique est un phénomène complexe résultant de l'interaction des écoulements diphasiques, de la turbulence et de la combustion. Ce chapitre présente succinctement les phénomènes entrant en jeu dans la modélisation de la combustion diphasique, ainsi que les outils d'analyse.

### 6.1 Couplages des phénomènes physiques dans la combustion diphasique turbulente

#### 6.1.1 Interaction turbulence-spray

L'écoulement diphasique est fortement influencé par la turbulence depuis son injection jusqu'à sa combustion. Lorsque la phase liquide est injectée sous forme de nappe, celle-ci est déstabilisée par l'écoulement gazeux, puis se désagrège en filaments. C'est la zone d'atomisation primaire. Dans la zone d'atomisation secondaire, des petites gouttes sont arrachées, et se stabilisent grâce à la tension superficielle. Au cours de l'atomisation, les processus de collisions, rupture et coalescence sont pilotés en partie par la turbulence. Le niveau d'interaction entre la turbulence et l'écoulement diphasique dépend de la fraction volumique  $\alpha_p$  de la phase dispersée :

- Le spray est très dilué ( $\alpha_p < 1 \cdot 10^{-6}$ ) : la dispersion du spray est influencée par la turbulence, qui n'est pas affectée par les particules (*one-way coupling*);
- Le spray est dilué ( $1 \cdot 10^{-6} < \alpha_p < 1 \cdot 10^{-3}$ ) : la turbulence perturbe le spray, qui lui-même agit sur l'écoulement gaz (*two-way coupling*);

- Le spray est dense ( $1 \cdot 10^{-3} < \alpha_p$ ) : l'écoulement est contrôlé par les collisions entre particules et les taux d'évaporation et de combustion sont fortement modifiés (*four-way coupling*).

### 6.1.2 Interaction spray-combustion

En s'évaporant, les gouttes produisent la vapeur de carburant, qui nourrit la réaction chimique. La combustion dans la phase gazeuse produit de la chaleur, qui aide à l'évaporation des gouttes. Le caractère monophasique ou diphasique de la combustion dépend du rapport des temps d'évaporation et de convection du spray. Ainsi les paramètres du spray et de la réaction chimique modifient la structure de la flamme.

### 6.1.3 Interaction combustion-turbulence

Différents régimes d'interaction entre la combustion et la turbulence, présentés par Damköhler [38], peuvent être distingués en étudiant le rapport des échelles temporelles et spatiales respectives. La présence de la flamme modifie la vitesse et la viscosité des gaz. Cela peut alors générer de la turbulence (flame-generated turbulence, d'après Karlovitz [62]), ou bien l'atténuer. Parallèlement, la structure de la flamme est modifiée par l'agitation turbulente. La turbulence peut accroître la surface de la flamme et donc augmenter la vitesse de réaction, mais elle peut aussi mener à l'extinction de la flamme.

## 6.2 Structures des flammes diphasiques turbulentes

Réveillon et Vervisch [99] ont réalisé un état de l'art de la combustion diphasique, et se sont attachés à décrire plus précisément les structures de flammes rencontrées à partir de calculs DNS. Cet état de l'art s'inspire de leur article.

La première classification de la morphologie des flammes de spray a été proposée par Chiu [114] [30] [31] [32]. Celle-ci, présentée par les figures 6.1 et 6.2, définit plusieurs régimes de combustion dans les brouillards de gouttes. Chiu définit un nombre  $G \approx 5N^{2/3}/S$ , où  $N$  est le nombre de gouttes dans le nuage, et  $S$  est le paramètre de distance.  $S$  est défini comme le rapport entre la distance moyenne entre les gouttes  $\delta_s$  et  $\delta_{r_f}$  le rayon de la flamme de diffusion potentielle autour de chaque goutte (d'après Kerstein [65]) :  $S = \delta_s/\delta_{r_f}$ . Lorsque les gouttes sont très nombreuses ( $G \gg 1$ ), le coeur du brouillard est saturé en carburant et seules les gouttes à la frontière du nuage peuvent s'évaporer. Une flamme de diffusion se forme alors autour de ce brouillard de gouttes (*régime de combustion externe enveloppante*). Au contraire, lorsqu'il y a relativement peu de gouttes dans le brouillard ( $G \ll 1$ ), les gaz chauds peuvent pénétrer dans le nuage. L'évaporation des gouttes est telle que la combustion se fait autour de chaque goutte (*régime de combustion interne*). On s'intéresse alors au paramètre de distance  $S$ . Pour un spray très dilué, on suppose  $\delta_s = n^{-1/3}$ , où  $n$  est la densité volumique des gouttes. Lorsque le paramètre  $S$  est élevé, les gouttes brûlent de manière isolée. Lorsque le paramètre  $S$  diminue, on retrouve une combustion de groupe. Entre ces deux limites apparaissent des régimes de combustion intermédiaires : pour  $G < 1$  les gouttes à la frontière du nuage brûlent indépendamment du coeur du nuage. Enfin pour  $G > 1$ , le coeur du nuage s'évapore mais seules les gouttes en périphérie brûlent.

Chang [27] et Borghi [17] [18] [19] ont eux analysé les rapports des temps caractéristiques d'évaporation  $\tau_v$  et de combustion  $\tau_f$ . Lorsque  $\tau_v \ll \tau_f$ , les gouttes préchauffent



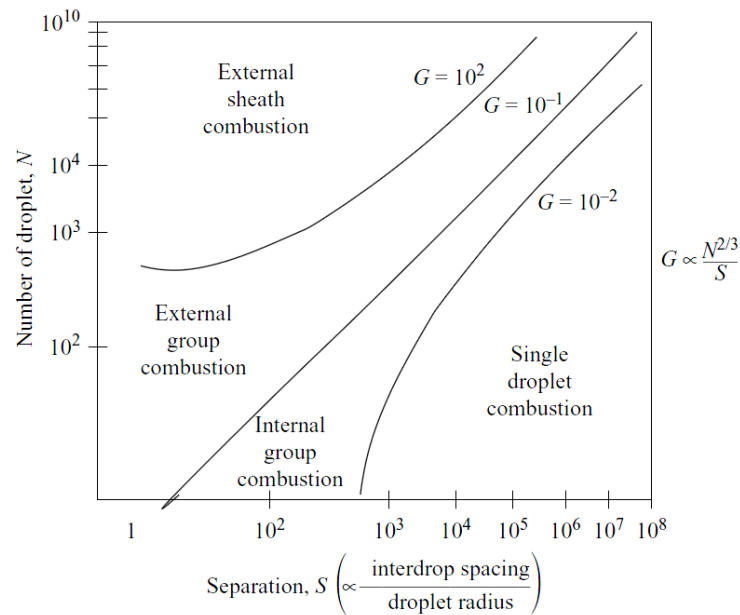


FIGURE 6.1 – Diagramme de groupes de combustion, d'après Chigier [29] et Kuo [68]

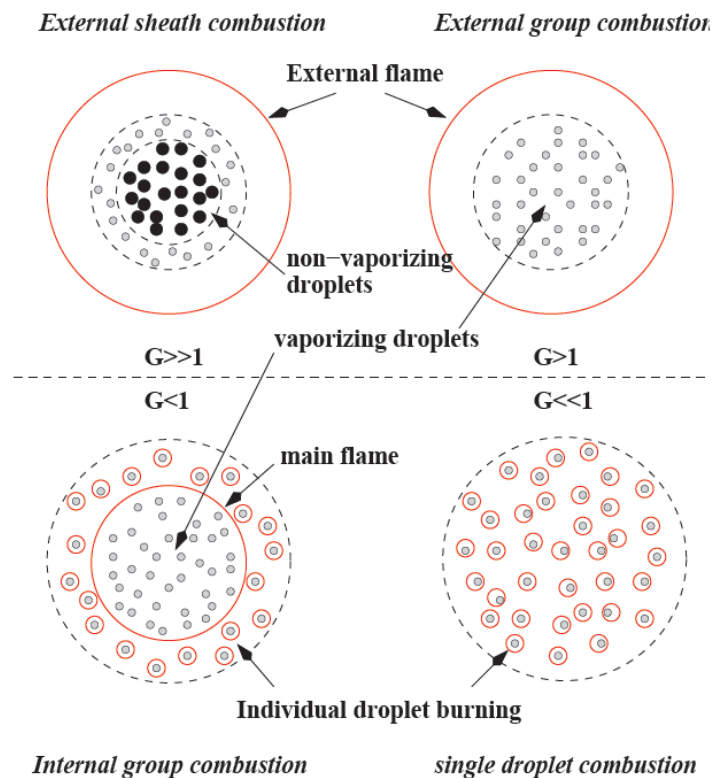


FIGURE 6.2 – Régimes de combustion d'après la classification de Chiu, extrait de Réveillon et Vervisch [99]

et s'évaporent avant d'atteindre le front de flamme. La combustion se réalise alors de façon prémélangée. Lorsque  $\tau_v > \tau_f$ , deux phénomènes peuvent être observés. Si l'épaisseur de flamme est supérieure à la distance moyenne entre les gouttes ( $\delta_f < \delta_s$ , des gouttes s'évaporent dans le front de flamme, ce qui a tendance à l'épaissir. Lorsqu'elles traversent le front de flamme, les gouttes brûlent dans une zone réactive secondaire dont la forme dépend du facteur de séparation  $S$ . Pour de faibles valeurs de  $S$ , les gouttes brûlent individuellement ou en petit groupe. Lorsque  $S$  augmente, un régime de combustion *percolante*, c'est-à-dire de transition entre deux régimes, puis de combustion *en poches* apparaissent.

A ces analyses Réveillon et Vervisch [99] ajoutent la prise en compte des variations de richesse et des effets de la turbulence. Une étude paramétrique est donc réalisée à partir de calculs DNS 2D. Trois régimes de flammes sont mis en évidence :

1. **Régime de combustion externe** : pour des richesses extrêmes,
  - combustion fermée (Fig. 6.3a) : pour de faibles richesses, le front de flamme est principalement prémélangé et consomme l'intégralité du carburant, liquide et gazeux ;
  - combustion ouverte (Fig. 6.3b) : pour une richesse élevée, on rencontre alors une flamme de diffusion ;
2. **Régime de combustion de groupe** (Fig. 6.3c) : des groupes de gouttes brûlent indépendamment. Les flammes de prémélangé riches sont souvent couplées avec des flammes de diffusion ;
3. **Régime de combustion hybride** (Fig. 6.3d) : des flammes de prémélangé brûlent des groupes de gouttes, et le mélange trop riche empêche la percolation des flammes de diffusion entre les groupes de gouttes. Le carburant restant brûle alors en diffusion grâce à l'apport d'oxydant par un écoulement co-courant.

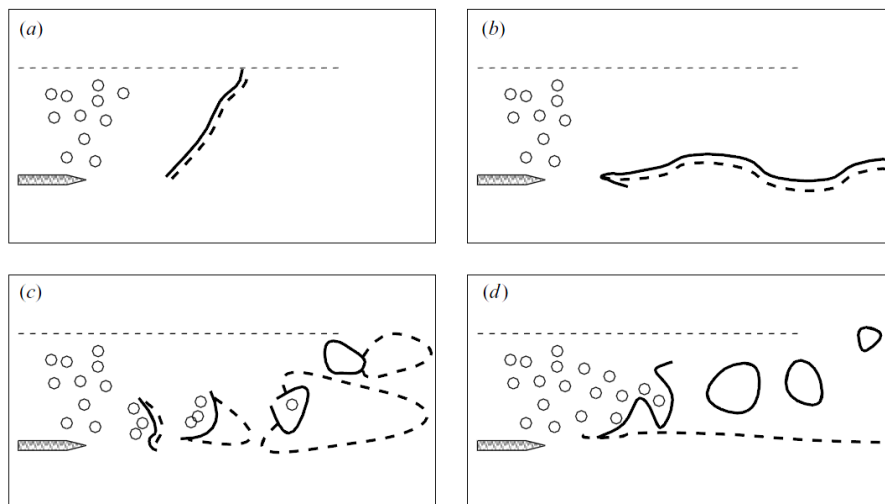


FIGURE 6.3 – Régimes de combustion diphasique, d'après Réveillon et Vervisch [99]. Trait continu : flamme de prémélangé, traits pointillés : flamme de diffusion.

## 6.3 Diagrammes pour la combustion diphasique

L'analyse de la combustion dans un foyer aéronautique s'appuie, entre autres, sur des diagrammes. Ceux-ci décrivent l'état des gaz en fonction de la température, la fraction massique, la richesse du mélange en tout point de l'écoulement. Cette section présente comment sont construits ces diagrammes et les informations qu'ils apportent.

### 6.3.1 Enveloppe des états

Pour une flamme non-prémélangée réactive, il est possible de déterminer l'enveloppe des états des gaz, en particulier pour la température  $T$ . Cela nécessite la résolution de problèmes d'équilibre simplifiés, en supposant que la chimie est infiniment rapide et irréversible.

La résolution de ces problèmes est présentée par Poinso et Veynante [95], qui expriment les enveloppes de température et de fraction massique en fonction d'une fraction de mélange  $Z$ . Dorey [39] a prolongé le raisonnement pour calculer ces enveloppes en fonction de la richesse effective, ici notée  $\Phi$ . Les résultats sont présentés ici :

– Côté combustible  $\Phi > 1$  :

$$Y_{F,b}(\Phi) = Y_F^0 \frac{\Phi - 1}{\Phi + \widehat{\Phi}} \quad (6.1)$$

$$T_b(\Phi) = T_u(\Phi) + \frac{1}{\Phi + \widehat{\Phi}} \frac{q_F Y_F^0}{c_p} \quad (6.2)$$

où  $T_u$  et  $T_b$  sont les températures dans les gaz frais et dans les gaz brûlés.

– Côté oxydant  $\Phi < 1$  :

$$Y_{F,b}(\Phi) = 0 \quad (6.3)$$

$$T_b(\Phi) = T_u(\Phi) + \frac{\Phi}{\Phi + \widehat{\Phi}} \frac{q_F Y_F^0}{c_p} \quad (6.4)$$

Dans ces équations,  $\widehat{\Phi} = sY_F^0/Y_O^0$  avec  $Y_F^0$  et  $Y_O^0$  les fractions massiques des réactifs dans chaque mélange injecté,  $c_p$  est la chaleur massique supposée égale pour toutes les espèces et indépendante de la température et  $q_F$  est la chaleur de réaction par unité de masse de combustible :

$$q_F = -\frac{1}{\nu_F \mathcal{M}_F} \sum_{k=1}^{n_e} h_k^0 \mathcal{M}_k \nu_k \quad (6.5)$$

où  $\nu_k$  est le coefficient stœchiométrique de l'espèce  $k$ . Enfin, la loi de saturation du gaz en fonction de la température, donnée par Clasius-Clapeyron (voir Eq. (3.18)) permet de définir une limite basse.

### 6.3.2 Diagramme richesse-température

L'enveloppe pour la température en fonction de la richesse, définie par les équations 6.2 et 6.4, est présentée figure 6.4.

Le diagramme peut également être tracé en fonction de la fraction de mélange  $Z$ . C'est ce que font Réveillon et Vervisch [99] sur la figure 6.5. Dans le cas diphasique, la courbe d'équilibre en combustion riche ( $Z > Z_{st}$ ) est en dessous de celle du cas monophasique. La forme de l'évolution de la température maximale en fonction de la fraction de mélange dépend alors des propriétés du carburant.

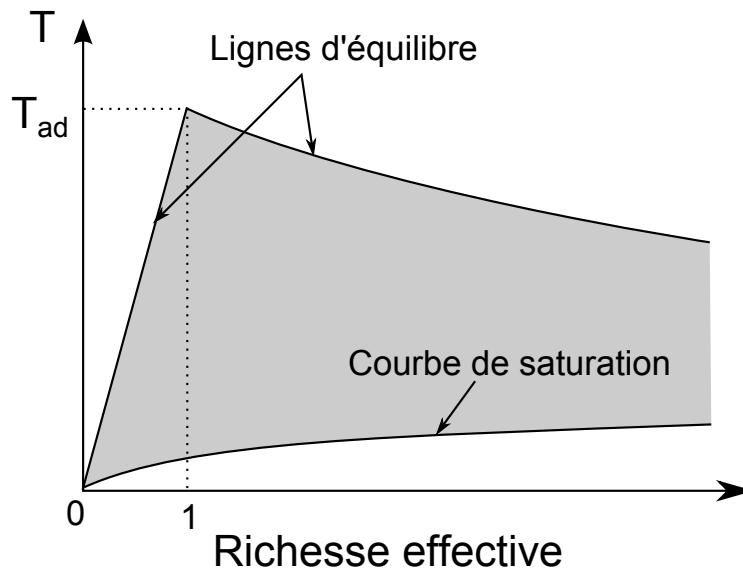


FIGURE 6.4 – Température de flamme diphasique dans l'espace de richesse de mélange  $\Phi$ , pour une chimie infiniment rapide (courbe d'équilibre) et en prenant en compte la courbe de saturation de Clausius-Clapeyron.

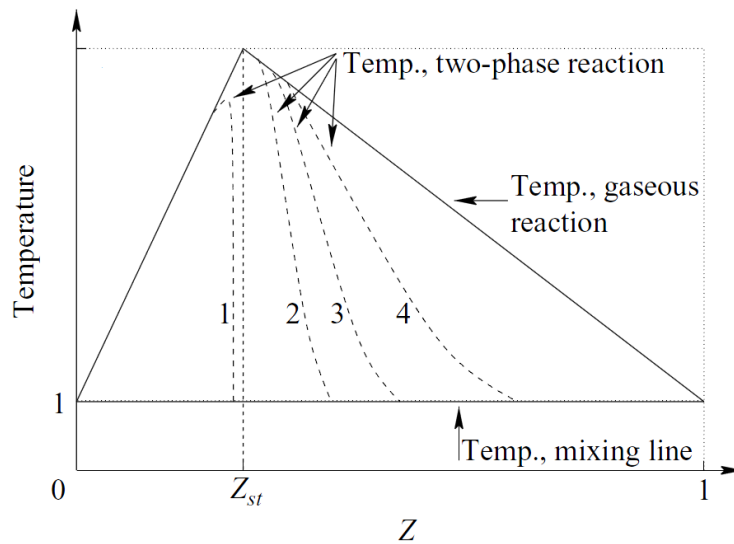


FIGURE 6.5 – Température en fonction de la fraction de mélange, pour un mélange diphasique, d'après Réveillon et Vervisch [99]

# Chapitre 7

## Présentation du banc MERCATO

### Sommaire

---

<b>7.1</b>	<b>Présentation du banc MERCATO</b>	<b>141</b>
7.1.1	Introduction	141
7.1.2	Description du dispositif expérimental	142
<b>7.2</b>	<b>Conditions opératoires et campagnes de mesures</b>	<b>144</b>
7.2.1	Champs de vitesse et granulométrie	145
7.2.2	Visualisation directe de l'écoulement	146
7.2.3	Essais d'allumage	147
<b>7.3</b>	<b>Simulations numériques de l'écoulement dans le MERCATO</b>	<b>149</b>
7.3.1	Simulations de l'écoulement non-réactif : méthodologie pour l'injection du carburant	149
7.3.2	Simulations de l'allumage et de l'écoulement réactif	154
<b>7.4</b>	<b>Conclusion</b>	<b>154</b>

---

### 7.1 Présentation du banc MERCATO

Cette partie a pour but de présenter le banc expérimental MERCATO, les données expérimentales disponibles ainsi que les résultats obtenus lors de précédents travaux.

#### 7.1.1 Introduction

Le banc MERCATO (Moyen Expérimental et de Recherche en Combustion Aérobie par Technique Optique) est un banc d'essai visant à étudier les phénomènes physiques intervenant lors de l'allumage diphasique des chambres de combustion, en particulier dans des conditions critiques de haute altitude (basse pression, basse température).

Le MERCATO correspond, au sens propre, à un banc d'essai instrumenté. Plusieurs maquettes différentes peuvent ainsi être caractérisées : maquette monosecteur, maquette trisecteur, etc. Dans la suite de ce travail, le terme MERCATO désignera le banc d'essai ainsi que la maquette monosecteur.

Les expérimentations menées au MERCATO sont le fruit d'une collaboration entre l'ONERA, Turbomeca et le CERFACS. De nombreuses thèses tant expérimentales que numériques ont été menées afin d'agrandir la base de données et de développer les outils numériques (Quintilla [97], Ouarti [92], García-Rosa [48], Lamarque [69], Sanjosé [104], Senoner [107], Linassier [79], Eyssartier [44]).

### 7.1.2 Description du dispositif expérimental

Le banc d'essai permet l'étude d'une maquette d'une chambre de combustion mono-secteur redressée, de section carrée 130 cm × 130 cm. Afin de reproduire des conditions de dépression, la maquette est équipée d'une trompe de dépression et l'air et le kérosène peuvent être refroidis. Les conditions réalisables sont :

$$250 \text{ K} < T_{kero} < T_{amb}$$

$$240 \text{ K} < T_{air} < 475 \text{ K}$$

$$0,4 \text{ bar} < P_{air} < 3 \text{ bar}$$

Les photographies de la figure 7.1 présentent le banc d'essai, dont une description détaillée est faite par García-Rosa [48]. Des accès optiques permettent l'utilisation de techniques de mesures non intrusives variées en milieu confiné. L'écoulement peut être caractérisé aussi bien en non-réactif qu'en réactif.

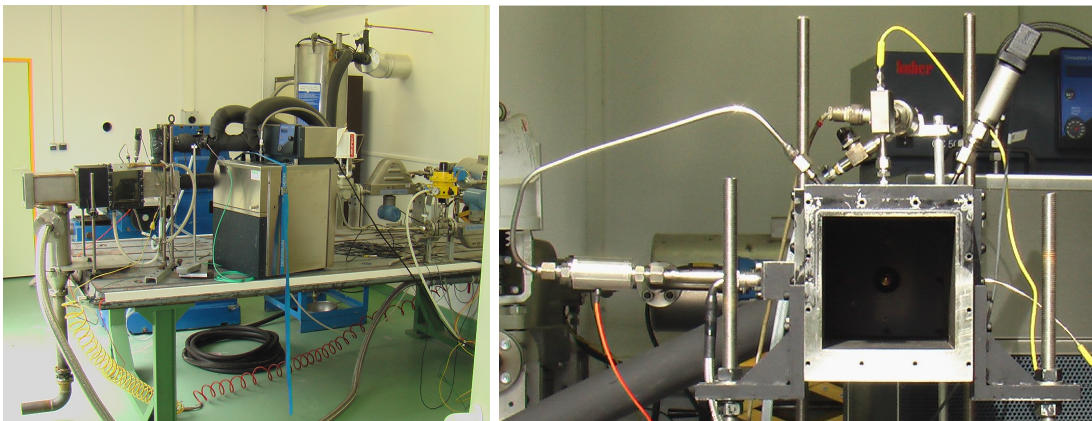


FIGURE 7.1 – Photo du dispositif expérimental : banc d'essai MERCATO.

#### 7.1.2.1 Écoulement dans le MERCATO

La figure 7.2 présente une vue du montage. L'air est injecté dans le plenum où il est tranquilisé. Il passe ensuite dans les canaux du tourbillonneur (ou *swirler*), et entre ainsi en rotation. L'air sortant débouche dans le diffuseur, qui mène directement à la chambre de combustion. Des zones de recirculation se créent dans les coins de la chambre à cause de ce brusque changement de section, limitant ainsi l'expansion radiale du jet d'air. Par ailleurs, la rotation de l'écoulement autour de l'axe central crée une recirculation au centre de la chambre de combustion. Lors de l'allumage et de la combustion dans les foyers aéronautiques, la présence de telles zones de recirculation, présentant un temps de séjour élevé, permet de piéger les gaz chauds et de favoriser le mélange du carburant et du comburant. La flamme peut ainsi se stabiliser dans le brûleur.

#### 7.1.2.2 Injection du carburant

Le système d'injection est un injecteur pilote Makila DLN conçu par Turbomeca. Il se compose d'un tourbillonneur à entrée d'air tangentielle, et d'une tête d'injection mécanique (Delevan). Le carburant liquide est tout d'abord injecté sous forme de nappe continue,

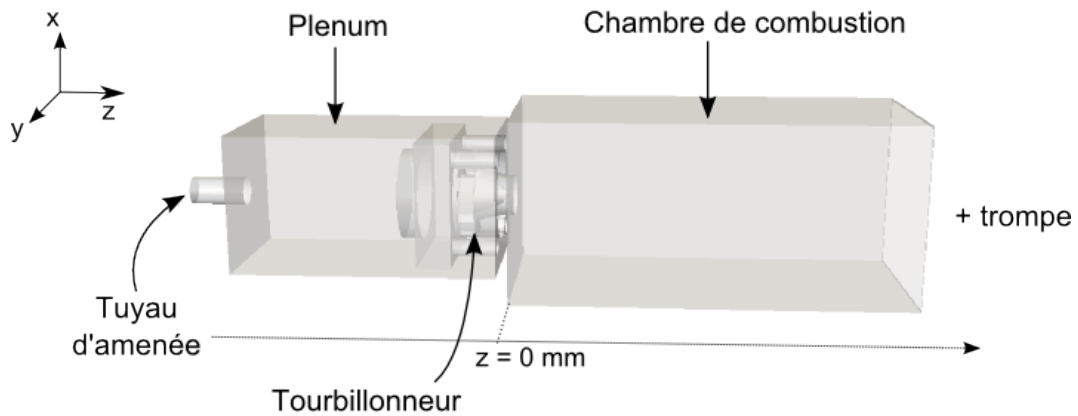


FIGURE 7.2 – Représentation de la maquette monosecteur dans le banc d'essai MERCATO.

qui se déstabilise et crée des ligaments et amas (atomisation primaire). Le cisaillement dû à l'écoulement tourbillonnaire de l'air pulvérise ensuite ces formations en gouttelettes (atomisation secondaire). Le cône creux, généré par la tête d'injection, a un demi-angle de  $40^\circ$ .

### 7.1.2.3 Dispositif d'allumage

Dans la suite de ce mémoire, nous définissons l'abscisse du fond de chambre, c'est à dire le plan coplanaire à la paroi d'entrée, égale à  $z = 0 \text{ mm}$  (voir Fig. 7.2).

L'allumage dans la chambre du MERCATO peut être réalisé via un laser ou à l'aide d'une bougie à arc électrique. Dans ce dernier cas, une étincelle peut être délivrée à la fréquence de 6 Hz, pour une puissance électrique égale à 400 mJ (donnée constructeur). Quatre emplacements ont été prévus sur un hublot en acier, afin de tester quatre positions de la bougie : 26, 56, 86 et 116 mm.

### 7.1.2.4 Recherche des limites pauvres d'allumage et d'extinction

Dans le cadre du programme européen TIMECOP-AE, des essais d'allumage et d'extinction ont été réalisés par Lecourt [72] pour caractériser les limites pauvres d'allumage de la chambre mono-secteur au banc d'essai MERCATO. Ces limites ont été obtenues par variations des débits d'air et de kérosène. La figure 7.3 expose les limites de l'allumage en basse richesse. La richesse minimale d'allumage est sensible à la position de la bougie, mais elle est peu affectée par la pénétration des électrodes dans l'écoulement.

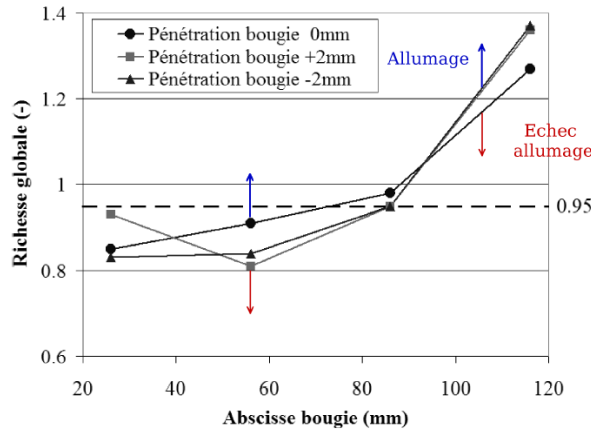


FIGURE 7.3 – Limites pauvre d’allumage en fonction de la position de la bougie et de la pénétration des électrodes dans l’écoulement, pour le *point de référence*, d’après Lecourt [72].

## 7.2 Conditions opératoires et campagnes de mesures

Une importante banque de données est disponible pour cette maquette mono-secteur complétée au cours de thèses ou programmes européens tels que TIMECOP-AE (Towards Innovative Methods for Combustion Prediction in Aero-Engines). Plus récemment, une maquette trisecteur a été caractérisée (Linassier [79], Goyer [52]). Ces nombreux résultats expérimentaux ont pour but d’aider au développement et à la validation de modèles et de code de calculs ainsi qu’à la compréhension du phénomène d’allumage.

On introduit la notion de débit réduit, appelé WR par les motoristes :

$$WR = \frac{Q_{air} \sqrt{T}}{P} \quad [kg.s^{-1}.K^{-\frac{1}{2}}.bar^{-1}] \quad (7.1)$$

On notera qu’à un débit réduit peuvent correspondre plusieurs températures. Etant donnée l’influence de cette dernière sur l’évaporation des gouttes, il est important de la préciser.

Nom	WR	$T_{air}$ (K)	P (bar)	$Q_{air}$ (g/s)	$T_{kero}$ (K)	$Q_{kero}$ (g/s)	$\Phi_{tot}$
Point de référence	0.6	293.0	1.0	35.0	293.0	2.25	0.95

TABLE 7.1 – Conditions opératoires du Point de référence

Le point de fonctionnement étudié dans cette thèse, nommé *Point de référence*, est défini dans le tableau 7.1. Pour l’écoulement non-réactif, les seules mesures de granulométrie et de vélocimétrie disponibles sont celles réalisées à l’abscisse  $z = 6$  mm. Le ruissellement sur les parois empêche d’avoir d’autres mesures de ce type. En réactif, on dispose d’autres plans de mesure. Néanmoins, Lecourt a observé que des mesures de l’écoulement monophasique faites dans des conditions différentes sont comparables moyennant leur adimensionnement. Ainsi, dans le chapitre 8.1, les profils de vitesse de la phase gazeuse pour un point autre que le point de référence seront adimensionnés et comparés aux résultats des calculs monophasiques. Les profils diphasiques au point de référence, à  $z = 6$  mm, seront utilisés pour valider le calcul de la phase dispersée. Le tableau 7.2 présente tous les points de fonctionnement étudiés et les moyens mis en œuvre pour cela.



	P bar	$T_{air}$ K	$T_{kero}$ K	$Q_{air}$ g/s	$Q_{kero}$ g/s	Diagnostics
Non-réactif	1.0	463	285	15.0	1.0 - 2.0	LDA, PDA
Non-réactif	1.0	463.0	293	6.6	0.45 - 0.9	LDA, PDI, Microphone
				13.2	0.6 - 1.2	
				19.8	1.0 - 2.0	
Allumage	1.0	285	285	26.0	3.0	PIV, Visu rapide, Tomo
Allumage	0.5	285	285	15.0	3.0	PIV, Visu rapide
Allumage	0.5	233	233	15.0	?	Visu couleur
Allumage et écoulement réactif	1.0	293	293	11.5 - 35	1.0 - 3.5	Visu rapide, Microphone

TABLE 7.2 – Synthèse des essais réalisés sur la chambre monosecteur du MERCATO, par García-Rosa, Linassier et, dans le cadre du programme TIMECOP, par Lecourt.

### 7.2.1 Champs de vitesse et granulométrie

La technique non-intrusive appelée LDA (Laser Doppler Anemometry) permet la mesure de la vitesse locale de l'air à l'aide de traceurs. Un volume de franges d'interférences est créé par le croisement de deux faisceaux laser cohérents. En traversant ce réseau d'interfranges, une particule diffuse un signal lumineux. La fréquence émise est alors proportionnelle à l'épaisseur de l'interfrange et à la vitesse de la particule. L'utilisation de deux paires de faisceaux laser orientés à  $90^\circ$  permet la mesure simultanée de deux composantes.

Les techniques PDA (Phase Doppler Anemometry) et PDI (Phase Doppler Interferometry) analysent le signal qu'émet une particule en traversant le réseau d'interférences. Le déphasage entre les signaux reçus par deux photo-récepteurs proches permet de déduire le diamètre de la particule.

Enfin, la PIV (Particule Image Velocimetry) est une méthode optique qui permet d'obtenir une mesure du champ de vitesse instantanée dans un plan. Les trois composantes de la vitesse peuvent être mesurées simultanément. Pour cela, deux photos des particules sont réalisées dans un très court intervalle de temps. L'identification des particules sur les deux images donne le déplacement de la particule, et donc sa vitesse instantanée. Dernièrement, Najid [87] a également réalisé des mesures PIV des champs de vitesses de l'écoulement monophasique dans le MERCATO.

La technique LDA a été appliquée à de fines gouttelettes d'huile d'olive (Garcia Rosa [48]) ou des particules de zirconium (Linassier [79]), pour caractériser les vitesses de l'écoulement gazeux non-réactif et réactif.

La vitesse des gouttes en écoulement non-réactif a été mesurée par la technique PDI. Cinq abscisses différentes correspondant aux cinq positions possibles de la bougie ont été examinées pour le point TIMECOP-AE :  $z = \{6; 26; 56; 86; 116\} \text{ mm}$ . L'abscisse  $z = 6 \text{ mm}$ , qui se trouve à  $10 \text{ mm}$  du gicleur, a été caractérisée pour le point de référence que nous étudions.

Les mesures de la phase liquide en écoulement réactif ont également été réalisées. La mise en place de ces mesures est détaillée par Linassier [79].

## 7.2.2 Visualisation directe de l'écoulement

L'étude expérimentale par visualisation de l'écoulement non-réactif ou réactif s'avère très enrichissante (García-Rosa [48], Linassier [79]). Par exemple, la figure 7.4 montre la luminance moyenne, proportionnelle à la surface des gouttes, dans la chambre du MERCATO dans un cas non-réactif.

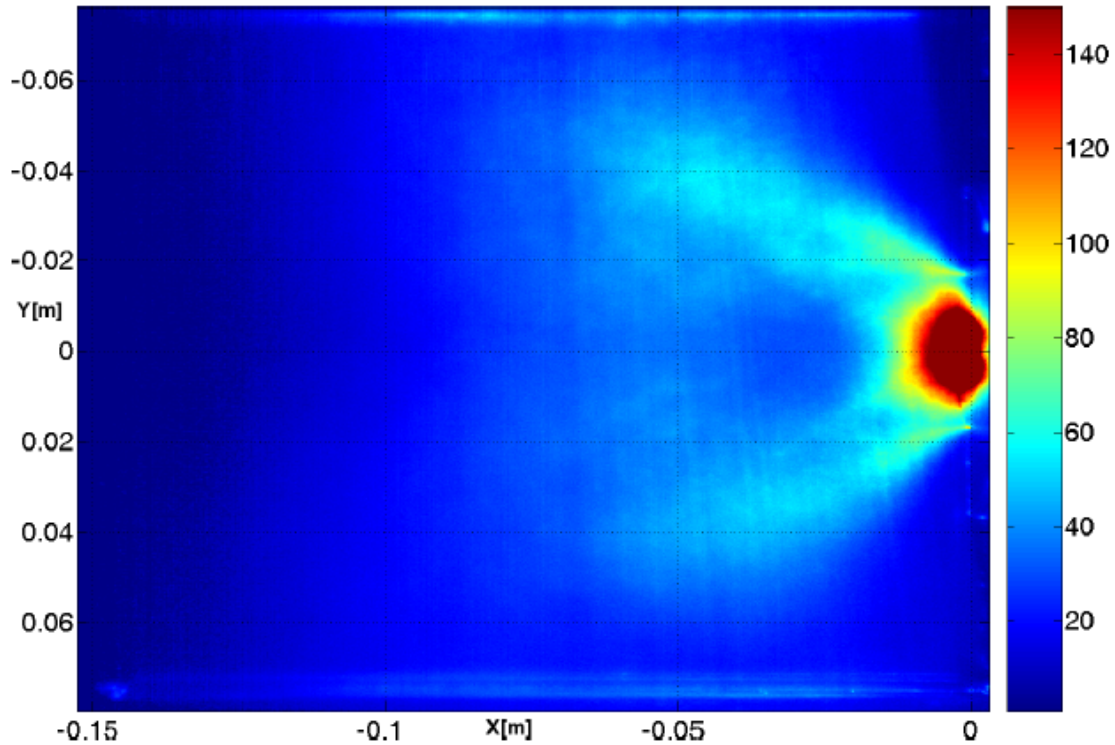


FIGURE 7.4 – Visualisation tomographique moyennée, pour un brouillard non-réactif (section longitudinale,  $f_{acq} = 1kHz$ ), d'après Linassier [79]. Signal de luminance proportionnel au diamètre au carré.

Par ailleurs, l'allumage d'une chambre de combustion modifie les champs de vitesse en combustion établie sont bien évidemment différents de ceux obtenus en écoulement non-réactif. L'allumage est une phase transitoire faisant intervenir des phénomènes physiques complexes sur des temps très courts :

1. formation, croissance et convection du noyau d'allumage après décharge de la bougie,
2. interaction du brouillard de gouttes avec les structures turbulentes instationnaires, et la flamme.

En premier lieu, la visualisation de l'allumage dès le dépôt de l'énergie par la bougie peut aider à la définition de conditions initiales représentatives. La validité des hypothèses faites sur les premiers instants de l'allumage peut également être vérifiée. Le temps de simulation d'un noyau d'allumage doit être compatible avec les hypothèses simplificatrices faites sur les propriétés de l'écoulement environnant. Enfin, l'allumage présente un caractère stochastique. Les raisons du succès ou de l'échec d'un allumage doivent être identifiées. Pour toutes ces raisons, García-Rosa [48] et Linassier [79] ont observé ces phénomènes à l'aide de caméras rapides.

De plus, cette méthode permet de révéler la structure de la phase liquide, y compris en combustion. Pour un spray dilué et pour des gouttes suffisamment petites, l'intensité diffusée par une goutte est proportionnelle à sa surface. La formation de poches de gouttes à la sortie de l'injecteur a ainsi été mise en évidence.

Enfin, le processus d'allumage complet du foyer a été observé par tomographie par Linassier [79]. La figure 7.5 présente la propagation de la flamme dans la chambre. Après claquage de la bougie, le noyau formé est convecté et se développe tout en tournant autour de l'axe de la chambre.

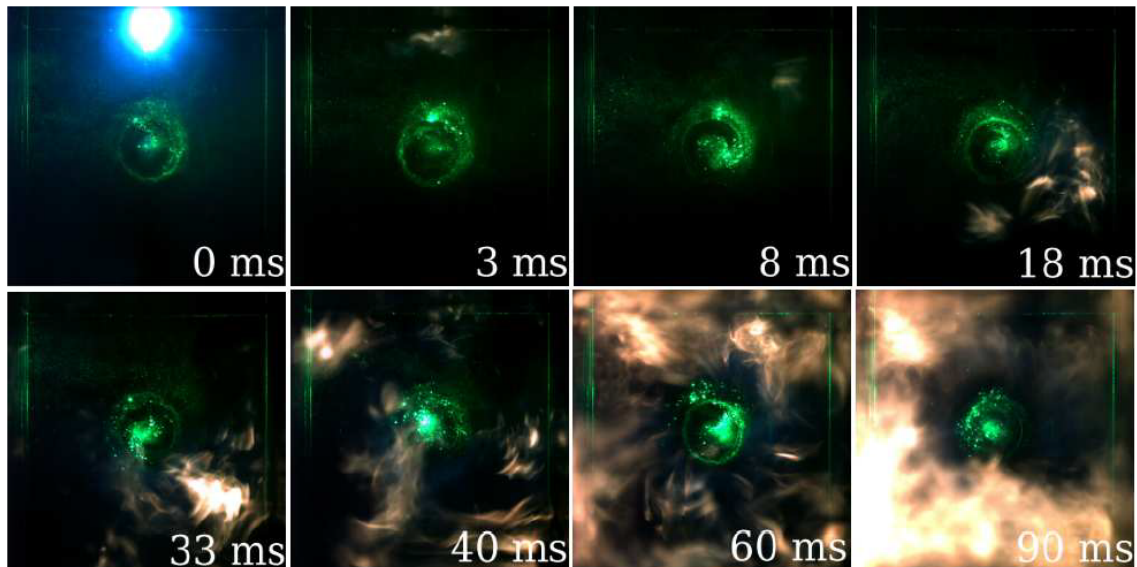


FIGURE 7.5 – Visualisation tomographique des différentes phases de l'allumage complet du foyer, section transversale 6 mm,  $f_{acqu} = 1 \text{ kHz}$ , d'après Linassier [79].

### 7.2.3 Essais d'allumage

Une étude statistique de l'allumage a été réalisée par Lang et Lecourt [70]. Le caractère probabiliste de l'allumage instationnaire est démontré. Pour une même position de bougie (à  $z = 56 \text{ mm}$ ) les auteurs ont réalisé 150 essais, en générant à chaque essai 30 étincelles à une fréquence de 6 Hz. Des statistiques sur le nombre d'étincelles générées avant la réussite de l'allumage ont ainsi été établies. Une loi de Poisson modélise la probabilité d'allumage trouvée, comme le montre la figure 7.6. La probabilité  $u_i$  désigne le succès de l'allumage pour une séquence au bout de la  $i^{\text{ème}}$  étincelle. La probabilité  $p_i$  qu'une étincelle provoque l'allumage est ensuite estimée. Chaque étincelle est alors considérée comme un événement indépendant. Il apparaît que  $p_i$  tend vers 37%.

Enfin l'évolution temporelle de la pression dans la chambre et de la perte de pression entre le plenum et la chambre dans le MERCATO au cours de l'allumage ont été mesurées par Linassier [79] pour le point de référence, et sont présentées figure 7.7. La pression augmente d'environ 8000 Pa en 50 ms.

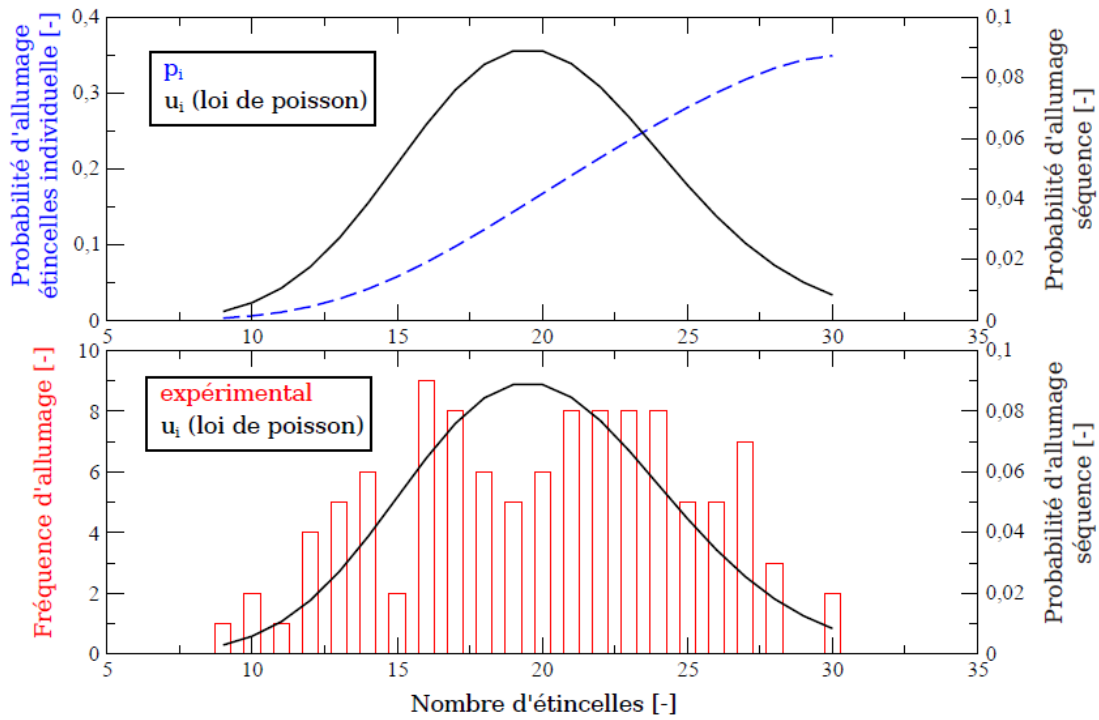


FIGURE 7.6 – Statistiques d’allumage du foyer monosecteur du MERCATO à partir de la bougie d’abscisse  $z = 56$  mm, d’après Lang [70].

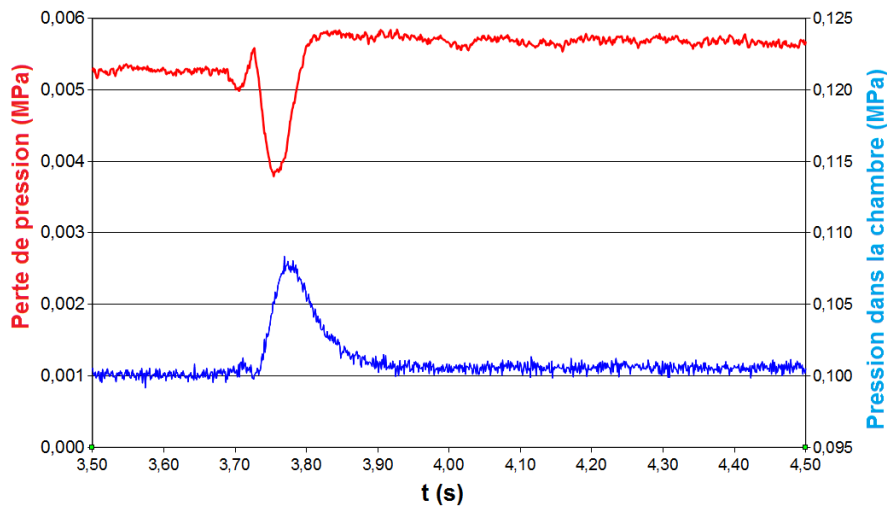


FIGURE 7.7 – Evolution temporelle de la pression (bleu) et de la perte de pression (rouge) dans la chambre du MERCATO au cours de l’allumage.

## 7.3 Simulations numériques de l'écoulement dans le MERCATO

La banque de données détaillée du MERCATO représente un support d'étude idéal pour valider les codes de calcul et les nouveaux modèles pour les écoulements diphasiques réactifs. De nombreuses simulations numériques ont donc été réalisées. Cette section a pour but de présenter les différentes approches développées et les résultats obtenus.

### 7.3.1 Simulations de l'écoulement non-réactif : méthodologie pour l'injection du carburant

L'injection est un point délicat de la simulation numérique. En effet les gouttes sont le résultat de la déstabilisation des nappes liquides injectées, et du cisaillement par l'écoulement d'air des ligaments formés. Ces phases sont respectivement appelées atomisation primaire et secondaire. La simulation numérique de l'atomisation nécessite un maillage très fin, une modélisation spécifique et des méthodes numériques aux interfaces. Afin de réduire les coûts de calcul, différentes approches ont donc été développées afin de créer un modèle d'injection représentatif de la phase dispersée en terme de distribution en vitesse et en diamètre des gouttes. Cette partie a pour objectif de présenter quelques-unes de ces approches.

#### 7.3.1.1 Approche FIM-UR

Sanjosé [104] et Senoner [107] ont développé la méthode FIM-UR, pour *Fuel Injection Method by Upstream Reconstruction* afin de déterminer les caractéristiques des gouttes en fonction des paramètres de la géométrie et de l'écoulement, pour un atomiseur de type simplex. Cette méthode consiste à définir la distribution de vitesse des gouttes, et l'angle d'injection de celles-ci grâce aux paramètres de l'injecteur et à des hypothèses basées sur des observations expérimentales. L'angle du spray et le diamètre moyen des gouttes sont des données expérimentales nécessaires. L'injection est ensuite réalisée au nez de l'injecteur.

Sanjosé [104] a utilisé le modèle FIM-UR pour des calculs Euler-Euler. Pour des raisons de stabilité numérique, le point d'injection est décalé par rapport au nez de l'injecteur. Un modèle d'échange des quantités de mouvement entre la phase gazeuse et la phase liquide a donc été développé pour calculer les vitesses des gouttes en ce point. Ce modèle, adapté d'une étude de Cossali [34] pour une injection en cône creux dans un gaz au repos, est étendu au cas d'un cône plein.

Des simulations numériques ont ensuite été réalisées sur la configuration du MERCATO par Sanjosé, la température de l'écoulement gazeux étant égale à  $T = 463 \text{ K}$ . Le modèle était initialement basé sur un brouillard monodisperse et les gouttes injectées avaient un diamètre  $d = 55 \mu\text{m}$ . Bien que les résultats des simulations numériques aient été satisfaisants, l'approche monodisperse a été pointée comme source d'imprécisions. Par ailleurs, l'injection de gouttes ne permet pas de retrouver les efforts de traînée subis par les ligaments à la sortie de l'injecteur. Cela influence la dynamique de la phase dispersée dès les premiers instants.

Ainsi, afin de s'affranchir du besoin de données expérimentales et dans un souci de reproduire une force de traînée plus proche de celle vue par les ligaments, Senoner [107] a

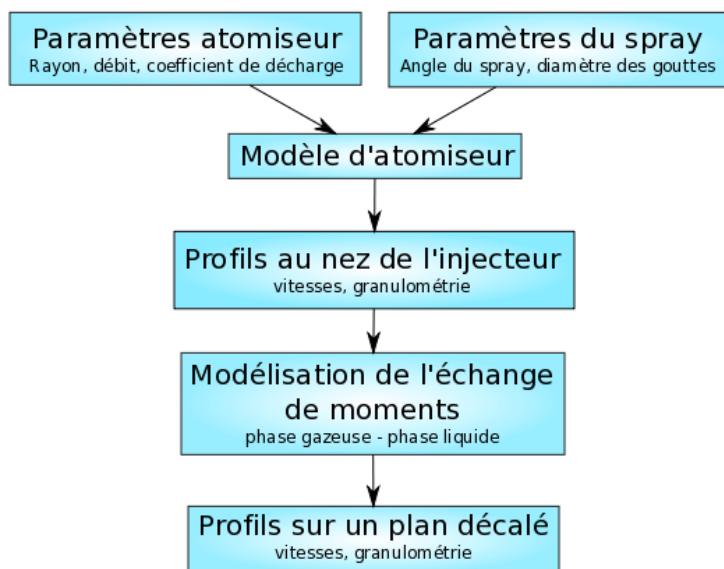


FIGURE 7.8 – Synthèse des étapes du modèle d’atomisation FIM-UR.

considéré l’injection de plus grosses gouttes auxquelles s’applique un modèle de fragmentation secondaire.

### 7.3.1.2 Approche FIM-UR avec modèle de fragmentation

L’approche prenant en compte la fragmentation secondaire des gouttes se veut complémentaire de l’approche FIM-UR. Plusieurs modèle de fragmentation existent et Senoner [107] a utilisé le modèle FAST, pour Fast Atomization Stochastic Treatment, développé par Gorokhovski *et al.* [50] [51]. Ce modèle propose que la distribution en taille des gouttes issues d’une fragmentation secondaire soit liée à une représentation log-normale.

Le modèle FAST a été appliqué au MERCATO (pour le même point de fonctionnement que Sanjosé [104], appelé TIMECOP) par Senoner [107] de deux façons. Dans un premier temps, les approches FIM-UR (adapté en polydisperse) et FAST sont couplées : les diamètres des gouttes injectées, ainsi que l’angle du spray, sont toujours des données nécessaires à la simulation. Dans un second temps, la taille des gouttes initiales est fixée bien supérieure ( $d = 250 \mu m$ ) à la taille des gouttes observées expérimentalement au sein de la phase dispersée, et le modèle de fragmentation secondaire est appliqué.

Les résultats obtenus sur le MERCATO montrent que la prise en compte de la fragmentation secondaire des gouttes a peu d’effet sur la représentation en vitesse et taille de gouttes dès lors que la phase dispersée est en équilibre dynamique avec la phase gazeuse. L’utilisation du modèle est en revanche très importante près de la zone d’injection. La taille des gouttes, lorsque celles-ci sont injectées avec les valeurs de la phase dispersée, est telle que l’accélération de la phase liquide est surestimée, d’après les profils de vitesse moyenne. Considérer des gouttes de diamètre plus important, tout en activant le modèle de fragmentation, permet d’éviter ce problème. L’interaction des gouttes avec le vortex de précession (PVC) est somme toute assez différente à cause encore une fois de la taille des gouttes près de l’injecteur qui modifie leur inertie.

On peut par ailleurs citer le travail de Menon et Patel [93] qui ont appliqué un modèle

de fragmentation dans leur étude de la combustion d'un spray tourbillonné. Les gouttes injectées ont pour taille caractéristique le diamètre de l'injecteur ( $d = 200 \mu m$ ). Elles modélisent ainsi les plus gros ligaments présents lors de l'injection. Les résultats montrent, comme dans l'étude de Senoner [107], que les champs diphasiques sont modifiés par l'utilisation du modèle de fragmentation secondaire près de l'injecteur. Dans les zones où la phase dispersée est à l'équilibre avec le gaz, les méthodes donnent des résultats similaires en terme d'histogrammes et de profils.

L'injection de grosses gouttes couplée à l'utilisation d'un modèle de fragmentation secondaire permet de s'affranchir de la connaissance de données expérimentales. La dynamique des grosses gouttes près de l'injecteur est plus proche de la dynamique réelle des ligaments. Si la méthode est intéressante et prometteuse, une étude paramétrique sur l'influence du diamètre initial des gouttes est nécessaire afin de connaître les limites de cette approche.

### 7.3.1.3 Injection à partir des résultats expérimentaux

De nombreuses simulations numériques ont été faites en caractérisant l'injection de la phase liquide à l'aide de données recueillies expérimentalement. On peut notamment citer les simulations numériques de la chambre TLC par Dorey [39]. Les diamètres de Sauter sont utilisés pour caractériser les gouttes, tandis que la vitesse axiale est déduite du débit de la phase liquide. Enfin, l'angle du spray est utilisé pour estimer la vitesse radiale des gouttes.

**Rappels des définitions classiques concernant les résultats expérimentaux** La distribution  $f(d)$  en taille des gouttes peut être représentée par une loi log-normale dont la densité peut s'exprimer par la relation suivante :

$$f(d) = \frac{1}{d} \frac{1}{\sigma \sqrt{2\pi}} \exp \left[ -\frac{(\ln(d) - \mu)^2}{2\sigma^2} \right] \quad (7.2)$$

La moyenne  $\mu$  et l'écart-type  $\sigma$  permettent de définir la distribution, et après un petit calcul on peut montrer qu'ils dépendent directement des diamètres moyens  $d_{10}$  et  $d_{32}$  :

$$\sigma^2 = \frac{1}{2} \ln \left( \frac{d_{32}}{d_{10}} \right) \quad (7.3)$$

$$\mu = \ln d_{32} - 5 \frac{\sigma^2}{2} \quad (7.4)$$

Connaître la distribution  $f$  donne également la distribution volumique de diamètre  $\alpha_d$  qui est, après calcul :

$$\alpha(d) = \frac{d^2}{d_{30}^3 \sigma \sqrt{2\pi}} \exp \left[ -\frac{(\ln(d) - \mu)^2}{2\sigma^2} \right] \quad (7.5)$$

avec le diamètre  $d_{30}$  défini par :

$$d_{30}^3 = \exp \left[ 3\mu + 9 \frac{\sigma^2}{2} \right] \quad (7.6)$$

La détermination expérimentale des diamètres moyens  $d_{10}$  et  $d_{32}$  est donc essentielle pour définir les caractéristiques de la phase dispersée dans le calcul.

**Injection à partir de données expérimentales détaillées** A partir de données expérimentales détaillées, on peut séparer les gouttes en un certain nombre de classes. Chaque classe  $i$  définit les propriétés d'un groupe de gouttes dont le diamètre  $d$  est compris entre deux valeurs  $[d_i; d_{i+1}]$ . Les propriétés définies sont la vitesse des gouttes et leur débit en un point de la couronne d'injection. L'injection est donc polydisperse.

A l'ONERA, García-Rosa [48] a créé un programme permettant de définir une couronne d'injection (voir Fig. 8.3) polydisperse à partir des données expérimentales. Les mesures PDI réalisées par Linassier [79] ont été soumises à un post-traitement visant à définir les profils de vitesse et la granulométrie de la phase liquide à proximité de la sortie du diffuseur. Afin que ces mesures soient représentatives de la phase dispersée, le processus d'atomisation doit être terminé. Les mesures ont donc été réalisées à l'abscisse  $z = 6 \text{ mm}$ . L'injecteur étant en retrait par rapport au fond de la chambre, la distance entre l'injecteur et le plan de mesure est de 10 mm.

Les données expérimentales brutes obtenues par PDI permettent de caractériser la phase dispersée à l'abscisse choisie. Cependant, un traitement est nécessaire afin de pouvoir utiliser ces données pour la caractérisation de l'injection. En effet, parmi les gouttes visualisées se trouvent des gouttes :

- issues directement de l'injecteur ;
- provenant des recirculations latérales ;
- ramenées par la recirculation centrale.

Il est possible de définir des groupes de gouttes, appelés *clusters*, dont les propriétés (diamètre, vitesse) sont similaires. Pour cela Linassier [79] a utilisé le programme MIX-MOD (Mixture Modeling) développé par Biernacki et al. [14]. Ce programme modélise la PDF de la vitesse des particules à l'aide d'autant de lois gaussiennes qu'il existe de *clusters*. Il est alors possible d'isoler les groupes de gouttes provenant directement de l'injecteur lors de la définition de l'injecteur numérique.

Ces gouttes sont ensuite rangées dans des classes selon leur diamètre. Linassier [79] a ainsi défini les caractéristiques des gouttes à injecter dans le calcul numérique. La figure 7.9 montre les profils de vitesse axiale, radiale et tangentielle selon les classes de gouttes. On remarque de fortes disparités concernant la vitesse axiale des gouttes en fonction de leur diamètre. Les petites gouttes, dont le temps de réponse est d'autant plus faible que leur diamètre est petit, sont bien plus rapides que les plus grosses gouttes. Ces dernières sont encore peu entraînées par le gaz à  $z = 6 \text{ mm}$ . La vitesse tangentielle ne dépend pas du diamètre des gouttes. Enfin, les mesures montrent que pour un rayon  $r < 20 \text{ mm}$  dans la couronne, la vitesse radiale ne dépend pas du diamètre. En revanche, pour un rayon  $r > 20 \text{ mm}$ , la vitesse radiale de la phase dispersée dépend du diamètre des gouttes. Cela s'explique par l'interaction avec la zone de recirculation latérale où recirculent de nombreuses gouttes.

Afin de valider la méthode pour déterminer les conditions aux limites pour l'injection, Linassier [79] a effectué des calculs RANS pour un autre point de fonctionnement : le point TIMECOP (voir Tableau 7.2). Au point TIMECOP la température des gaz est de  $T = 463 \text{ K}$ , ce qui provoque l'évaporation des gouttes et donc l'évolution des profils de granulométrie et de vitesse selon la distance à l'injecteur. Les calculs RANS que Linassier [79] a effectué avec CEDRE sont en bon accord avec les mesures expérimentales. La méthode adoptée pour définir l'injection des gouttes donne de bons résultats et a été généralisée pour définir l'injection au point de référence.



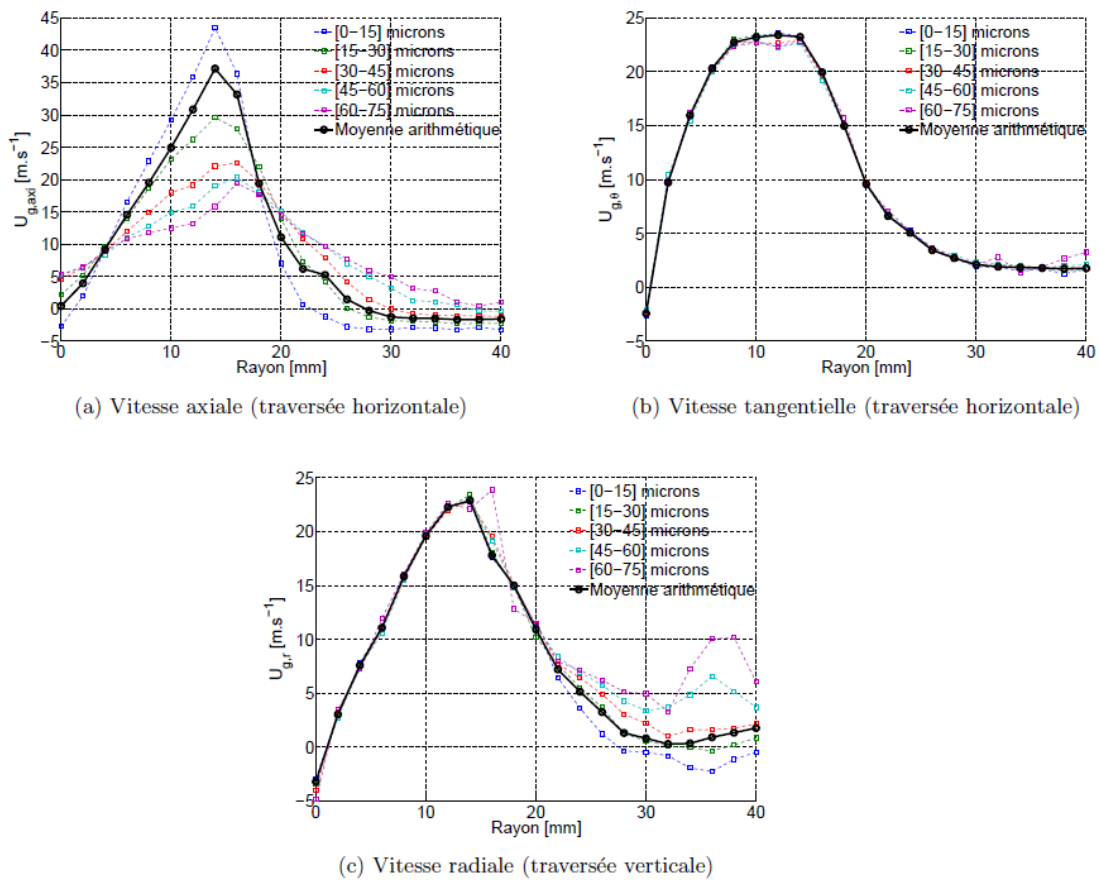


FIGURE 7.9 – Mesure PDI brutes par classe de gouttes pour une demi-traversée de la veine, section  $z = 6\text{mm}$  : point de référence, non réactif non confiné, d'après Linassier [79].

### 7.3.2 Simulations de l’allumage et de l’écoulement réactif

Les simulations numériques de l’allumage et de la combustion stabilisée ont été réalisées en RANS par Ouarti [92] Linassier [79] et en LES par Eyssartier [44].

#### 7.3.2.1 Simulation de la combustion stabilisée

Linassier [79] a utilisé la formulation Euler-Lagrange polydisperse du code de calcul CEDRE. Il a étudié l’influence de la cinétique chimique en la modélisant d’une part à l’aide de l’approche Arrhenius, via la cinétique PEA de Franzelli [46], et d’autre part en mettant en œuvre une chimie infiniment rapide avec le modèle de CRAMER. Les résultats des calculs stationnaires de l’écoulement réactif ne correspondent pas exactement aux données expérimentales. Linassier [79] suggère que l’injection de gouttes caractérisées pour un écoulement non-réactif dans le plan  $z = 6 \text{ mm}$  a une forte influence sur les résultats en combustion établie, notamment sur les vitesses de gaz brûlés.

Eyssartier [44] a quant à lui fait des calculs Euler-Euler monodisperse, en injectant les gouttes grâce au modèle FIM-UR (voir partie 7.3.1.1). La cinétique chimique est décrite par un modèle de flamme épaissie dynamique. Les résultats se rapprochent de façon satisfaisante des mesures expérimentales.

#### 7.3.2.2 Simulation de l’allumage

Selon les mêmes méthodes que celles présentées précédemment, plusieurs simulations de début d’allumage ont été réalisées par Eyssartier [44]. Pour cela, le maillage a été raffiné autour de la bougie, ce qui augmente considérablement le nombre d’éléments maillant la configuration. Eyssartier [44] met en évidence l’influence de l’instant initial sur le délai d’allumage ainsi que le développement du noyau dans les premiers instants. Au-delà des premiers instants, pour des allumages de noyaux réussis, l’évolution temporelle du taux de consommation total de carburant présente une pente retrouvée dans plusieurs calculs (voir Fig. 7.10).

Ouarti [92] a réalisé l’allumage d’une chambre de combustion 2D axisymétrique, avec une méthode RANS. Dans ces simulations, le noyau peut remonter l’écoulement vers le brûleur, la flamme se propageant dans la couche limite.

L’allumage de la configuration 3D du MERCATO a été fait en RANS par Linassier, en utilisant un modèle de combustion à chimie infiniment rapide (CRAMER). Les résultats montrent l’enroulement de la flamme autour de l’axe central de la chambre. Le comportement de la flamme est validé grâce à une comparaison aux visualisations expérimentales (voir Fig. 7.11). En revanche, le temps de propagation de la flamme dans la chambre est trop rapide.

## 7.4 Conclusion

Le MERCATO est un banc d’essai permettant l’utilisation de diagnostics optiques pour la compréhension des phénomènes se déroulant dans les chambres de combustion. Une maquette mono-secteur a particulièrement été étudiée et l’ONERA dispose d’une banque de données de vitesses, granulométrie, visualisations, etc, détaillée pour la phase gazeuse et la phase dispersée, pour des écoulements non-réactifs ou réactifs, à l’allumage ou en combustion stabilisée. De nombreuses visualisations expérimentales sont également disponibles pour la validation des outils numériques. Les écoulements non-réactifs ont été

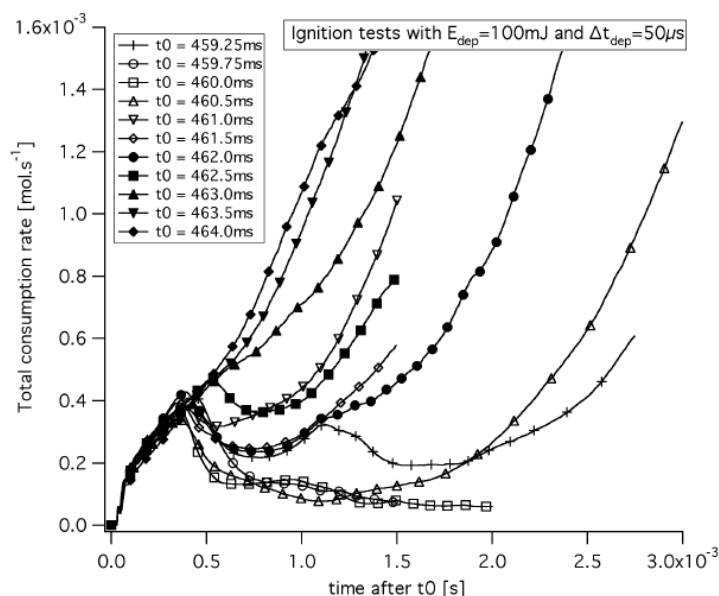


FIGURE 7.10 – Evolution temporelle du taux de consommation total de carburant dans le foyer, pour plusieurs instants initiaux d'allumage  $t_0$ , d'après Eyssartier.

caractérisés dans les cas monophasique et diphasique. Le caractère instationnaire de la phase dispersée a été détaillé. L'allumage de l'écoulement diphasique a été particulièrement renseigné au niveau expérimental : taille et comportement des noyaux d'allumage, probabilité d'allumage d'une bougie, propagation de la flamme dans la chambre. Enfin, des mesures expérimentales sur la vitesse des gaz sont également disponibles pour la combustion diphasique établie.

Parallèlement aux travaux expérimentaux, de nombreuses études numériques ont été réalisées, mettant en œuvre tant une approche stationnaire (RANS) qu'instationnaire (LES). L'injection des gouttes dans le calcul a fait l'objet d'un travail minutieux et plusieurs modèles ont été mis en œuvre pour modéliser l'injection : FIM-UR, modélisation de l'atomisation secondaire, traitement détaillé des données expérimentales pour l'injection numérique. Des simulations numériques de la combustion établie ont été réalisées. L'attention se porte à présent sur la phase transitoire entre l'écoulement diphasique non-réactif et la combustion établie : l'allumage.

L'allumage local a été modélisé à l'ONERA par un modèle de noyau d'allumage, à formulation 1D sphérique. Ce modèle, lorsqu'il est couplé à des critères d'analyse de l'écoulement, permet de réaliser une carte des positions favorables à l'allumage dans la chambre de combustion. Par ailleurs, il peut être utilisé pour définir les conditions initiales d'un calcul de propagation de flamme dans le foyer. Un calcul de propagation a été réalisé avec une approche RANS. Cependant, une approche RANS ne permet pas de rendre compte du caractère instationnaire de l'écoulement, et donc de l'aspect probabiliste de l'allumage. Une simulation numérique instationnaire par modélisation LES permettrait de rendre compte des différents phénomènes entrant en jeu dans la réussite ou l'échec d'un allumage, tels que la dispersion des gouttes dans la chambre.

Les deux chapitres suivants présentent les simulations numériques instationnaires LES qui ont été réalisées avec le code de calcul CEDRE. Dans un premier temps, l'écoulement

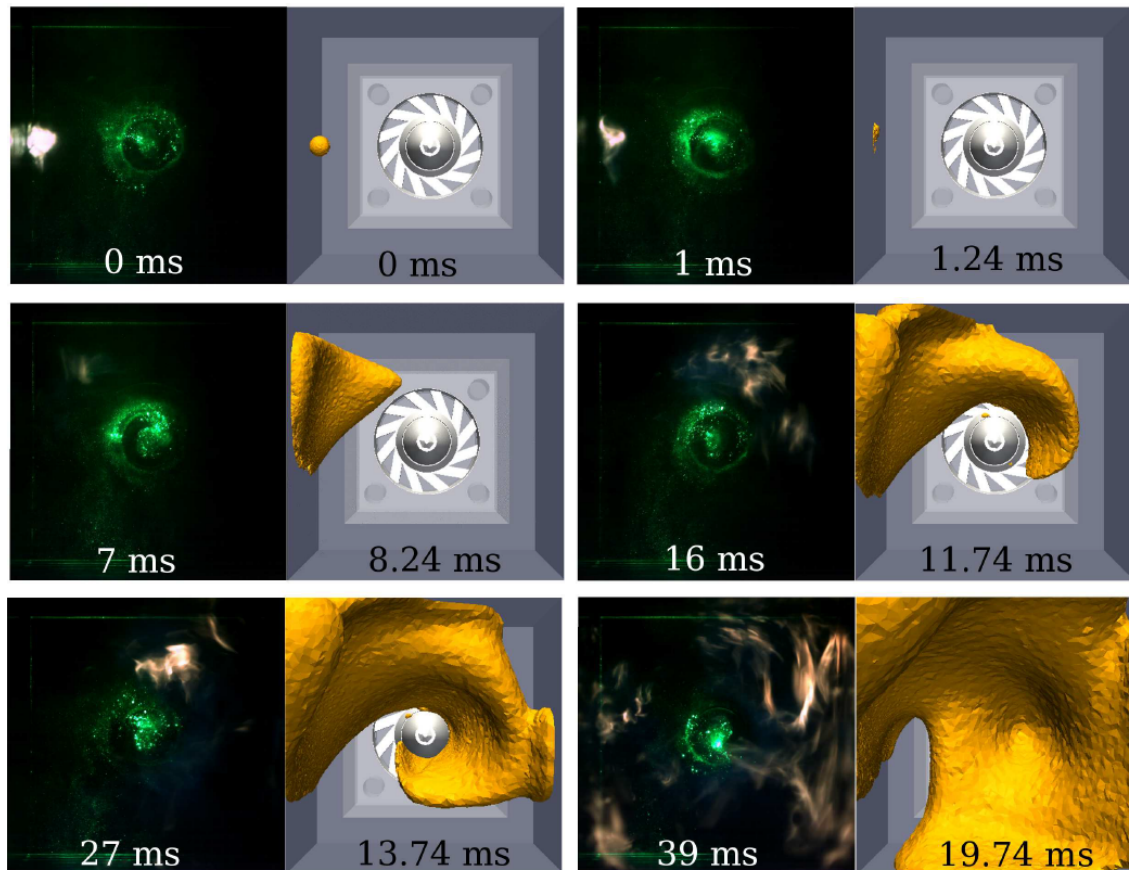


FIGURE 7.11 – Comparaison du développement et de la propagation de la flamme dans le MERCATO : simulation RANS (isocontour de température  $T = 1300\text{ K}$ ) et visualisation par tomographie laser, d'après Linassier [79].

non-réactif est validé par comparaison aux mesures expérimentales et l'aspect instationnaire est particulièrement étudié. Puis la simulation de l'allumage du MERCATO et de la propagation de la flamme dans la chambre de combustion est présentée.



## Chapitre 8

# Simulation aérodiphasique instationnaire du MERCATO

### Sommaire

---

<b>8.1</b>	<b>Mise en place et validation du calcul de l'écoulement diphasique</b>	<b>160</b>
8.1.1	Stratégie du calcul	160
8.1.2	Mise en place du calcul	160
8.1.3	Couplage des solveurs phase gazeuse-phase dispersée	165
<b>8.2</b>	<b>Modélisation de l'injection</b>	<b>165</b>
8.2.1	Décalage du plan d'injection	166
8.2.2	Traitement des données brutes	166
8.2.3	Discretisation spatiale et temporelle de l'injection	167
<b>8.3</b>	<b>Simulation numérique de l'écoulement aérodiphasique</b>	<b>167</b>
8.3.1	Analyse de l'écoulement moyen	167
8.3.2	Analyse de l'écoulement instationnaire	180
<b>8.4</b>	<b>Cartographie d'allumage</b>	<b>184</b>
8.4.1	Choix des paramètres	186
8.4.2	Résultats	186
<b>8.5</b>	<b>Conclusion</b>	<b>190</b>

---

La chambre de combustion monosecteur, présentée dans le chapitre 7, a été caractérisée expérimentalement au banc d'essai MERCATO. La banque de données très fournie disponible pour les écoulements en giration, monophasique ou diphasique, réactif ou non-réactif, en fait un cas de validation complet pour les modèles physiques et numériques. Ce chapitre a pour but de mettre en place et de valider le calcul de l'écoulement aérodiphasique non-réactif dans la chambre du MERCATO simulé par une approche LES.

La première partie de ce chapitre décrit les paramètres de calcul choisis pour réaliser les simulations. L'injection de la phase dispersée est particulièrement détaillée. La stratégie de calcul pour l'établissement de l'écoulement est ensuite décrite. La seconde partie du chapitre s'attache à la validation des grandeurs moyennes et instantanées de l'écoulement. Pour cela, la structure générale de l'écoulement est étudiée, et les champs et profils en monophasique et en diphasique sont comparés aux mesures et observations expérimentales. Un soin particulier est apporté à la description et à l'analyse du caractère instationnaire de l'écoulement afin de mettre en évidence la nature périodique de certains phénomènes en diphasique. Enfin, une méthode de cartographie de la probabilité d'allumage est mise en œuvre. Cette méthode permet la détermination à moindre coût des zones favorables à l'allumage de la chambre.

## 8.1 Mise en place et validation du calcul de l'écoulement diphasique

Cette partie présente les outils utilisés pour la simulation numérique de l'écoulement dans le MERCATO, ainsi que la stratégie de calcul mise en place. Les simulations numériques ont été réalisées en couplant les solveurs CHARME, pour la phase gazeuse, et SPARTE, pour la phase dispersée. Les modèles utilisés sont décrits dans le chapitre 1. Plus de détails sont disponibles par exemple dans le manuel utilisateur du code CEDRE [25] et à l'article de Thibert [117].

### 8.1.1 Stratégie du calcul

Les calculs aérodiphasiques non-réactifs présentés ici ont plusieurs raisons d'être. D'une part, il s'agit de valider l'approche numérique mise en place. Les résultats numériques seront comparés aux différentes grandeurs expérimentales disponibles, présentées dans la partie 7.2. D'autre part, les champs instantanés serviront de solution initiale pour la simulation numérique de l'allumage de la chambre de combustion et permettront la construction d'une carte de probabilité d'allumage.

Pour le point de référence, le calcul de l'écoulement diphasique de Linassier [79] s'appuie sur une approche RANS. En réalité, l'écoulement turbulent et ses structures instationnaires interagissent avec les gouttes, et créent des lâchers de poches de gouttes plus ou moins réguliers, mis en évidence par les observations expérimentales. Ces poches de gouttes peuvent provoquer localement une arrivée périodique de masse liquide de carburant plus ou moins importante, notamment près des bougies. Une méthode de calcul instationnaire est nécessaire pour simuler ces lâchers de gouttes dans l'écoulement et étudier ses effets potentiels sur l'allumage d'une chambre de combustion. Une approche de simulation numérique aux grandes échelles (LES) est donc utilisée.

La méthode d'injection adoptée est celle que Linassier [79] a validé. Les données expérimentales du point de référence, utilisées pour la définition de l'injection, correspondent à la granulométrie et aux vitesses de la phase dispersée à l'abscisse  $z = 6$  mm. Afin de prendre en compte au plus tôt les effets instationnaires de l'écoulement sur la phase dispersée, le plan d'injection est décalé de  $z = 6$  mm à  $z = 0$  mm (voir partie 8.2).

Les résultats sont comparés aux valeurs expérimentales disponibles et au calcul RANS. L'interaction des gouttes avec l'écoulement porteur est comparée aux observations expérimentales.

La suite de cette partie décrit la mise en place du calcul pour les deux phases.

### 8.1.2 Mise en place du calcul

#### 8.1.2.1 Composition des phases gazeuse et liquide

Les gouttes sont de n-décane. Cette espèce s'évapore et devient l'espèce  $C_{10}H_{20}$  dans la phase gazeuse, présenté au paragraphe 1.3. Initialement, la phase gazeuse contient seulement du dioxygène et du diazote dans la proportion  $\frac{Y_{N_2}}{Y_{O_2}} = 3.29$ . En non-réactif, l'évaporation partielle des gouttes de n-décane conduit à l'apparition de l'espèce  $C_{10}H_{20}$ . Dans le cas réactif, les espèces  $H_2O$ ,  $CO$ ,  $CO_2$  complètent la composition de la phase gazeuse.



### 8.1.2.2 Maillage

Les figures 8.1 et 8.2 présentent deux coupes du maillage. L'ensemble de la veine d'essai est reconstitué : le plenum, la chambre de combustion et la trompe d'aspiration. Chacun de ces éléments constitue un domaine de calcul. Etant donné que, dans la trompe, les vitesses sont faibles et qu'il y a peu d'interactions avec la chambre, la présence de gouttes a peu d'intérêt. Ainsi, lorsqu'elles arrivent dans la trompe, les gouttes ne sont plus prises en compte dans le calcul.

Le maillage est de type non-structuré, constitué de tétraèdres, et a été généré grâce au mailleur CENTAUR. Le tableau 8.1 présente les caractéristiques du maillage. Une attention particulière a été portée au raffinement du maillage au sein des vrilles du tourbillonneur ainsi que dans la zone du jet et où se trouve le PVC (Processing Vortex Core), une instabilité hydrodynamique présentant une fréquence de rotation caractéristique. Enfin, le maillage autour des quatre bougies d'allumage a été raffiné afin de simuler au mieux l'expansion et la convection du noyau après la décharge.

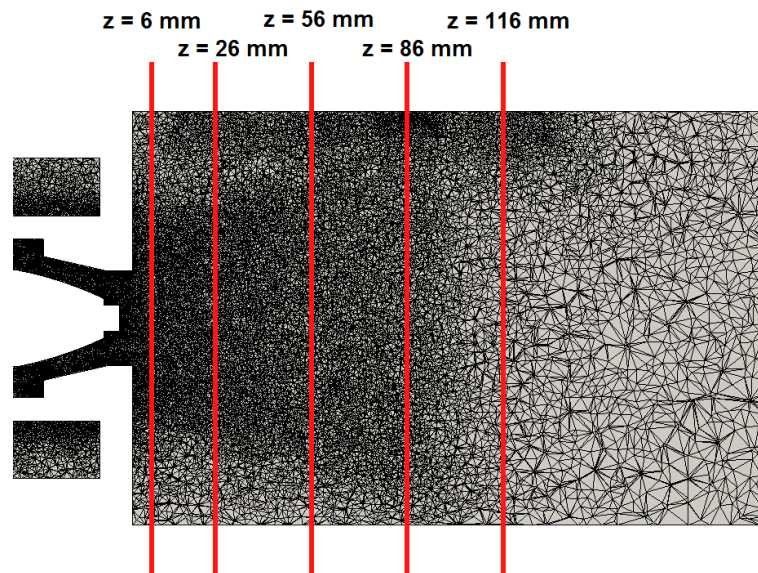


FIGURE 8.1 – Maillage du MERCATO, zoom. Les traits rouges figurent les plans de mesures de la phase gazeuse et la position des bougies.

Nombre d'éléments	4 200 000
Volume du plus petit élément	$1 \cdot 10^{-12} \text{ m}^3$

TABLE 8.1 – Maillage du MERCATO.

### 8.1.2.3 Conditions aux limites pour la phase gazeuse et de la phase dispersée

Les conditions limites de la phase gazeuse sont présentées dans le tableau 8.2.

La condition limite entrante est de type *débit imposé*. Bien que cette condition ne présente par le caractère non-réfléchissant adopté pour la condition de sortie, un coefficient

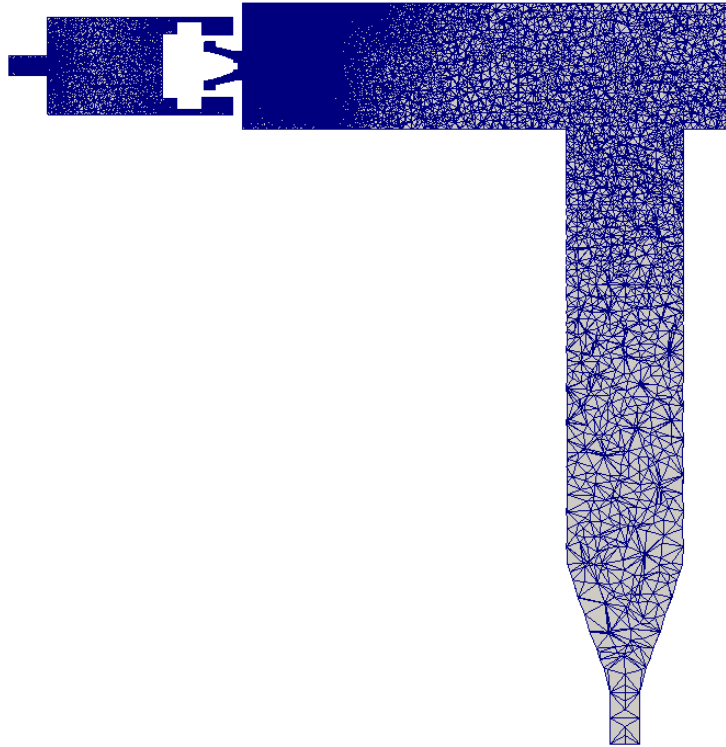


FIGURE 8.2 – Maillage du MERCATO.

Nom	Type	Paramètres physiques	
Tuyau d'amenée	Débit imposé	Température	$T = 293 \text{ K}$
		Débit massique	$\dot{m}_{air} = 35 \text{ g/s}$
Paroi	Paroi	Adiabatique + Loi de paroi	
Sortie	Non-réfléchissant	Pression	$P = 1 \text{ atm}$

TABLE 8.2 – Conditions aux limites pour la phase gazeuse.

de relaxation peut être choisi afin d'atténuer les perturbations numériques et d'amortir les ondes physiques. Par ailleurs, ce type de condition limite permet de s'affranchir des instabilités générées par une condition limite *Entrée non-réfléchissante à vitesse imposée*, pour laquelle il a été observé qu'imposer la vitesse à l'entrée pouvait modifier le débit massique si la masse volumique de l'écoulement venait à varier. D'autre part, les ondes acoustiques pouvant être générées par l'écoulement seront évacuées par la condition limite de sortie. Cependant, la dissipation numérique et le déraffinement dissiperont les ondes arrivant à la sortie.

Enfin, les conditions limites de la phase dispersée sont présentées dans le tableau 8.3.

Nom	Type	Paramètres physiques	
Parois Chambre	Paroi complexe	Température de la paroi	$T = 300 \text{ K}$
Interface Chambre-Trompe	Sortie des gouttes		

TABLE 8.3 – Conditions aux limites de la phase dispersée.

### 8.1.2.4 Modèles physiques pour les gouttes

Le tableau 8.4 présente les modèles retenus pour décrire la phase dispersée.

Modèle de diffusion dans la goutte	Conduction infinie
Modèle de diffusion dans la phase gazeuse	Ranz-Marshall
Modèle de traînée	Schiller et Neumann
Écoulement de Stefan	Abramzon et Sirignano

TABLE 8.4 – Modèles pour SPARTE

**Calcul de la traînée** Lorsqu'une goutte évolue dans un écoulement, l'écoulement gazeux environnant exerce une force de traînée. Dans cette étude, le coefficient de traînée est calculé par la loi de Schiller et Neumann.

**Chauffage et évaporation** Pour la simulation de l'écoulement diphasique dans la configuration du MERCATO, comme pour l'étude des flammes planes diphasiques laminares, le chauffage des gouttes est modélisé par un modèle de conduction infinie. Ce modèle néglige les gradients de température dans la goutte. Par ailleurs, les transferts massiques sont calculés à l'aide du nombre de Spalding massique, en fonction des fractions massiques de vapeur à la surface de la goutte et dans la cellule de calcul. La règle du tiers de Hubbard et al. [61] est utilisée pour calculer les propriétés du gaz à la surface de la goutte. La convection de la vapeur autour de la goutte est modélisée par les corrélations d'Abramzon et Sirignano lors du calcul du nombre de Sherwood. Enfin, l'écoulement de Stefan autour de la goutte est pris en compte.

### 8.1.2.5 Temps caractéristiques

Les temps caractéristiques de la phase gazeuse et de la phase dispersée sont évalués afin de fixer les pas de temps des solveurs CHARME et SPARTE, et le couplage entre les solveurs.

**Temps convectif**  $\tau_{conv}$  Ce temps correspond au temps de renouvellement de l'écoulement gazeux contenu dans le domaine de calcul, lorsque le régime est établi. Une première estimation peut être faite en négligeant la giration de l'écoulement due au tourbillonneur, ainsi que l'écoulement dans les zones latérales de recirculation. Pour cela on considère la vitesse moyenne  $u_{bulk}$  comme la vitesse débitante moyenne dans la section carrée de la chambre :

$$\dot{m}_{air} = \rho_g u_{bulk} S_{section} \quad (8.1)$$

Pour le point de référence, le débit d'air vaut  $\dot{m}_{air} = 35$  g/s. L'arête de la section étant égale à  $a = 129$  mm, la vitesse débitante est estimée à  $u_{bulk} = 1,8$  m/s. Si l'on choisit comme longueur caractéristique de la chambre de combustion  $L = 50$  cm, le temps de convection vaut :

$$\tau_{conv} = \frac{L}{u_{bulk}} \approx 270 \text{ ms} \quad (8.2)$$

**Temps de relaxation des gouttes  $\tau_p$**  Il s'agit du temps nécessaire pour que la goutte atteigne la vitesse de l'écoulement porteur grâce à la traînée :

$$\tau_p = \frac{\rho_l d^2}{18\mu_g} \quad (8.3)$$

Pour un gaz à température  $T_g = 293$  K, le temps de relaxation des gouttes varie entre  $\tau_p = 0.06$  ms pour les plus petites gouttes  $d = 5$   $\mu$ m, et  $\tau_p = 15.5$  ms pour des gouttes de diamètre  $d = 80$   $\mu$ m.

Le point de fonctionnement étudié présente une température inférieure à la température normale d'ébullition du n-décane, il y a très peu d'évaporation. Les temps de chauffage et d'évaporation ne sont donc pas estimés.

### 8.1.2.6 Nombre de swirl

Les écoulements giratoires sont obtenus grâce à la combinaison de deux jets d'air : l'un axial, l'autre tangentiel. Différents régimes existent et sont décrits dans les articles de synthèse de Luca-Negro et O'Doherty [80] et Syred [115]. Lorsque la giration de l'écoulement est suffisamment élevée, un gradient de pression inverse selon l'axe de la chambre et une zone de recirculation toroïdale apparaissent. Le caractère de ces zones est déterminé par leur nombre de swirl  $S$  :

$$S = \frac{\int_0^R \rho u_x u_\theta r^2 dr}{R \int_0^R \rho u_z^2 r dr} \quad (8.4)$$

où  $R$  est le rayon du jet.

Le comportement du jet en fonction du nombre  $S$  est :

- $S < 0,3$  : expansion du jet ,
- $0,3 < S < 0,6$  : apparition d'une zone de recirculation et de tourbillons instationnaires,
- $S > 0,6$  : la recirculation est aspirée vers le système d'injection.

Pour le point de fonctionnement choisi dans cette étude, le nombre de swirl vaut  $S = 0,77$ , d'où l'apparition d'une zone de recirculation centrale.

### 8.1.2.7 Stratégie numérique

Le tableau 8.5 présente les modèles utilisés dans le solveur CHARME.

Modèle de sous-maille	Smagorinsky
Schéma numérique	$2^{nd}$ ordre
Flux euler	Schéma de Roe
Flux numérique	Limiteur de type Van Leer
Loi de paroi	Turbulent
Quantité de mouvement	Boussinesq

TABLE 8.5 – Modèles pour CHARME

**Intégration temporelle et couplage entre les solveurs** Le pas de temps doit être suffisamment faible pour éviter qu'une particule numérique ne traverse plusieurs cellules lors d'une itération. Pour la phase dispersée comme pour la phase gazeuse, la sortie du

diffuseur est une zone sensible. D'une part les vitesses du gaz peuvent atteindre 80 m/s, d'autre part le maillage dans cette zone est relativement fin et la plus petite cellule a un volume  $V = 1 \cdot 10^{-12} \text{ m}^3$ . Le pas de temps choisi doit donc être inférieur à :

$$\Delta t = \frac{\Delta x}{U_{g,max}} = \frac{10^{-4}}{80} = 1,25 \mu s \quad (8.5)$$

Le couplage entre les solveurs CHARME et SPARTE se fait à chaque itération temporelle. Le tableau 8.6 présente les choix faits pour l'intégration temporelle.

Pas de temps	$\Delta t = 1 \mu s$
Schéma d'intégration temporelle	Runge-Kutta Implicite 2 <sup>nd</sup> ordre
Résolution GMRES	valeurs standard
Couplage CHARME/SPARTE	chaque itération

TABLE 8.6 – Intégration temporelle

**Conditions initiales** Le calcul LES est initialisé à l'aide d'une solution RANS convergée. Ce calcul préliminaire a été effectué avec un modèle de turbulence  $k - \omega$  EARSM. En entrée, le taux de turbulence a été fixé à 5%, et l'échelle intégrale de turbulence a été supposée égale à 10% du diamètre de la section d'entrée. Ce sont des valeurs couramment utilisées pour les calculs d'écoulement turbulent en conduite.

A partir du champs obtenus par méthode RANS, l'écoulement monophasique est établi sur un temps physique égal à 200 ms. Les moyennes sont ensuite effectuées sur un temps physique de 170 ms. Lorsque l'écoulement monophasique est établi, une solution instantanée sert à initialiser le calcul diphasique. La durée du transitoire est de 200 ms jusqu'à ce que l'écoulement diphasique soit établi. Le calcul est alors poursuivi sur un temps physique de 102 ms afin de réaliser les moyennes.

### 8.1.3 Couplage des solveurs phase gazeuse-phase dispersée

Dans le code de calcul CEDRE, la phase gazeuse et la phase dispersée sont respectivement décrites par les solveurs CHARME et SPARTE. De fait, l'utilisateur doit définir trois pas de temps :

1.  $\Delta t_{CHARME}$  : pour la phase gazeuse,
2.  $\Delta t_{SPARTE}$  : pour la phase dispersée,
3.  $\Delta t_{CEDRE}$  : pour l'échange des données entre les solveurs

Un cycle CEDRE est défini par une ou plusieurs itérations des solveurs CHARME ou SPARTE. A chaque cycle, les termes sources de la phase dispersée sont communiqués au solveur CHARME, tandis que SPARTE reçoit les termes sources de la phase gazeuse (dans le cas du *two-way coupling*). Les deux solveurs effectuent alors séparément une ou plusieurs itérations puis échangent à nouveau leurs termes sources à la fin du cycle CEDRE.

## 8.2 Modélisation de l'injection

La méthode présentée dans la partie 7.3.1.3 nécessite une caractérisation expérimentale de l'injection au point de fonctionnement simulé afin de créer un injecteur numérique.

Les essais sont longs et coûteux, et un post-traitement minutieux est nécessaire. Si les expérimentations sont nécessaires afin de constituer une banque de données validant les résultats, l'utilisation des données collectées pour définir l'injection du calcul devrait permettre de valider le reste de la chaîne de calcul lors de la simulation d'un écoulement diphasique réactif. Cette méthode d'injection est donc choisie au cours de notre étude.

Quelques modifications ont néanmoins été faites par rapport au travail de Linassier [79] et sont détaillées ici.

### 8.2.1 Décalage du plan d'injection

Tout d'abord, le plan d'injection a été décalé. Le nez de l'injecteur est situé à  $z = -4$  mm, et Linassier [79] effectue son injection à l'abscisse du plan de mesure où la phase dispersée est telle que les gouttes sont formées, c'est à dire à  $z = 6$  mm. Il y a donc un espace de 10 mm entre le nez de l'injecteur et le plan d'injection. Les résultats obtenus par Linassier [79] montrent que cette approche semble applicable dans le cas d'une approche RANS. L'injection tardive des gouttes, dont les caractéristiques ont été mesurées en écoulement non-réactif, semble néanmoins avoir un effet important sur la simulation de la combustion établie car les caractéristiques de l'injection devraient être modifiées. Dans cette étude, les phénomènes instationnaires tels que la recirculation centrale toroïdale due au vortex de précession (PVC) sont simulés par approche LES. Cette structure, ainsi que les recirculations latérales, agissent sur les gouttes et peuvent avoir des effets sur la dispersion de celles-ci. Aussi semble-t-il important d'injecter des gouttes plus près de l'injecteur.

Ainsi, on pourrait décaler l'injection des gouttes au nez de l'injecteur, réduisant la couronne d'injection à quelques points. Il faut alors rappeler les observations de Sanjosé [104] et Senoner [107] : l'injection au nez de l'injecteur des gouttes ne reproduit pas l'écoulement diphasique dans lequel se trouvent des ligaments de taille importante. De plus, la description des gouttes injectées numériquement repose sur les mesures PDI à  $z = 6$  mm. L'impact de ces gouttes sur l'écoulement via la force de traînée, par exemple, diffère de celui des ligaments. Inversement, la dynamique des gouttes dépend du point d'injection.

Le choix est donc fait de décaler légèrement le plan d'injection, afin que le PVC puisse agir au plus tôt sur les gouttes, sans pour autant que la dynamique des gouttes ne soit trop affectée. L'abscisse du plan d'injection est alors fixée à  $z = 0$  mm. Etant donnée la faible température des gaz ( $T = 293$  K), l'évaporation est supposée négligeable et la granulométrie obtenue expérimentalement est conservée.

Ce choix implique plusieurs modifications par rapport aux données expérimentales mesurées à  $z = 6$  mm. Comme le montre la tomographie moyennée (Fig. 7.4), l'angle de l'enveloppe du spray varie en fonction de l'abscisse au sein de la chambre. Néanmoins, entre  $z = 0$  mm et  $z = 6$  mm, cet angle varie peu et sera conservé.

Le plan d'injection étant déplacé plus près de l'injecteur, la vitesse axiale des gouttes est également modifiée. Le débit massique est conservé. L'adaptation des vitesses tangentielle et radiale fait l'objet d'une discussion dans la partie qui suit.

### 8.2.2 Traitement des données brutes

Les premières simulations LES ont montré que le diamètre moyen des gouttes était anormalement bas au plan de mesure  $z = 6$  mm, par rapport aux données expérimentales. En effet, une étape nécessaire au traitement des données brutes obtenues expérimentalement par PDI introduisait un biais.

Les données du PDI sont collectées sur deux voies. La première voie contient pour chaque goutte mesurée l'instant de mesure  $t$ , le diamètre  $d$ , ainsi que la vitesse axiale. La seconde voie contient l'instant de mesure  $t'$  ainsi que la seconde composante de la vitesse relevée (qui sera la vitesse radiale ou tangentielle suivant l'axe de mesure choisi). Les données obtenues sont ensuite mises en coïncidence afin d'obtenir les deux composantes de vitesse pour une goutte d'un diamètre  $d$  donné, à l'instant  $t = t'$ . Les gouttes mesurées sur l'une des voies et qui n'ont pas été mesurées sur l'autre voie -on compare les temps  $t$  et  $t'$ - sont rejetées.

En pratique, l'une des deux voies du PDI contient plus d'informations que l'autre. La coïncidence conduit à une réduction du nombre de gouttes effectivement mesurées et introduit un biais : le niveau moyen sur les profils de diamètre moyen arithmétique  $D_{10}$  et de diamètre moyen de Sauter  $D_{32}$  a tendance à baisser de  $10 \mu\text{m}$ .

Nous avons fait le choix de conserver les données brutes obtenues sur la première voie. On dispose alors pour chaque goutte de son diamètre et de sa vitesse axiale. Reste à déterminer les composantes radiale et tangentielle de la vitesse.

La figure 7.9 présente les profils de vitesses radiale et tangentielle des gouttes. Comme on l'a fait remarquer précédemment, la vitesse tangentielle des gouttes n'est que très peu influencée par leur diamètre. On fait donc les hypothèses suivantes :

**Hypothèse 8.2.1** *A l'abscisse  $z = 6 \text{ mm}$ , la vitesse tangentielle des gouttes est indépendante de leur diamètre, et ne dépend que de la distance à l'axe.*

**Hypothèse 8.2.2** *On suppose que la vitesse tangentielle à  $z = 0 \text{ mm}$  est égale à la vitesse tangentielle à  $z = 6 \text{ mm}$ .*

**Hypothèse 8.2.3** *A l'abscisse  $z = 0 \text{ mm}$ , la vitesse radiale des gouttes est supposée proche de zéro.*

Les deux dernières hypothèses sont évidemment discutables. Le choix fait ici est tel que l'on considère que, entre le plan d'injection  $z = 0 \text{ mm}$  et le plan de mesure  $z = 6 \text{ mm}$ , la vitesse radiale sera partiellement restituée aux gouttes via la relaxation partielle de la phase dispersée et par transferts de quantité de mouvement tangential et radial.

La figure 8.3 présente la couronne d'injection à  $z = 6 \text{ mm}$  par Linassier [79] et la couronne d'injection à  $z = 0 \text{ mm}$  après les modifications expliquées précédemment. Dans le cas de l'injection de Linassier, le nombre d'injecteur numériques est réduit afin de faciliter la lecture de l'image.

### 8.2.3 Discrétisation spatiale et temporelle de l'injection

## 8.3 Simulation numérique de l'écoulement aérodiphasique

Les résultats obtenus lors de la simulation numérique instationnaire de l'écoulement diphasique au sein du MERCATO sont présentés dans cette partie. Ils sont comparés aux observations et résultats expérimentaux.

### 8.3.1 Analyse de l'écoulement moyen

#### 8.3.1.1 Champ moyen gazeux

L'écoulement monophasique est moyenné sur un temps physique de  $170 \text{ ms}$ .

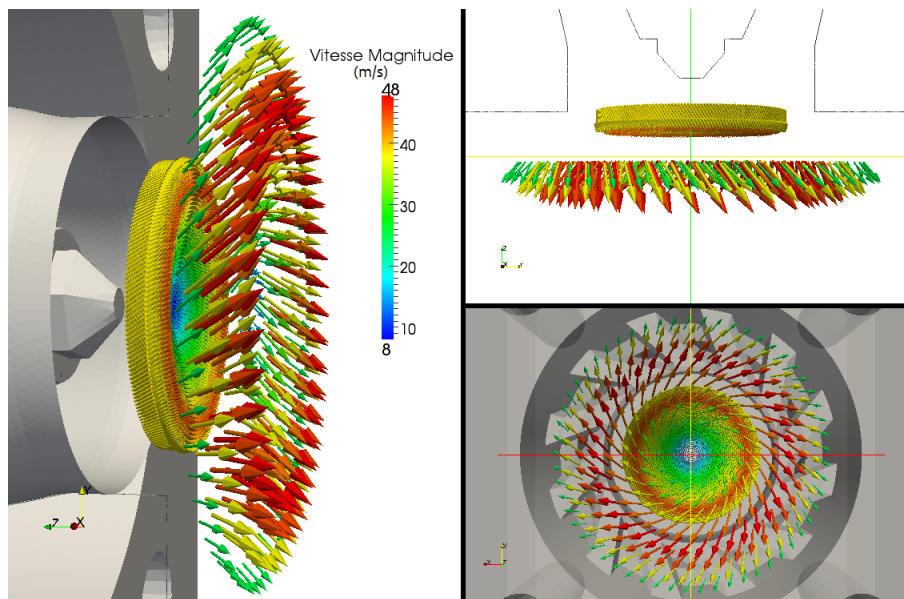


FIGURE 8.3 – Décalage du plan d’injection de  $z = 6 \text{ mm}$  à  $z = 0 \text{ mm}$  et modification des vitesses

**Zones de recirculation** La giration de l’écoulement par le tourbillonneur, puis son expansion brutale à la sortie du diffuseur, créent dans la chambre de combustion des zones de recirculation qui permettent de stabiliser l’écoulement dans le foyer.

Des recirculations latérales dues au changement brutal de section apparaissent en fond de chambre, autour du jet. Elles se retrouvent jusqu’à l’abscisse  $z = 80 \text{ mm}$  en aval du fond de chambre (voir Fig. 8.4). A cause de la giration de l’écoulement, et de la section carrée de l’enceinte de confinement, la zone de recirculation n’est pas axisymétrique. Elle adopte une forme de croix, présentée sur la figure 8.5. Les quatre branches de la croix forment des couloirs dans lesquels les gaz piégés dans la recirculation peuvent revenir vers l’axe de la chambre. La figure 8.6 montre que plus loin, les quatre poches de recirculation se rejoignent. Si les vitesses sont quasiment nulles à l’infini aval de la chambre dans la zone centrale, le champ de vitesse axiale moyenne montre que celle-ci ne semble pas se refermer. Bien que la simulation par approche RANS de Linassier [79] montre que la zone de recirculation centrale se referme, les dernières mesures expérimentales PIV de Najid [87] ont été effectuées pour des abscisses inférieures à la possible fermeture. La structure en croix a été observée expérimentalement. La figure 8.7 montre le fond de la chambre du MERCATO. La peinture noire initialement apposée a été diluée par les gouttes de kérosène liquide impactant sur la paroi. La forme une forme de croix est clairement visible.

La zone de recirculation centrale apparaît si le nombre de swirl, calculé dans le paragraphe 8.1.2.6, est suffisamment élevé. Syred [115] décrit le mécanisme de formation de cette zone, appelé *vortex breakdown* par Lucca-Negro et O’Doherty [80]. L’expansion brutale de la section, et la giration de l’écoulement conduisent à l’apparition d’un gradient de pression adverse près de l’axe. Ainsi l’écoulement central s’inverse, et recircule.

**Lignes de courant** La figure 8.8 met en évidence des lignes de courant particulières, construites à partir de la sortie du diffuseur. On remarque l’enroulement des lignes de courant autour de l’axe central, dès la sortie du diffuseur. La giration de l’écoulement crée



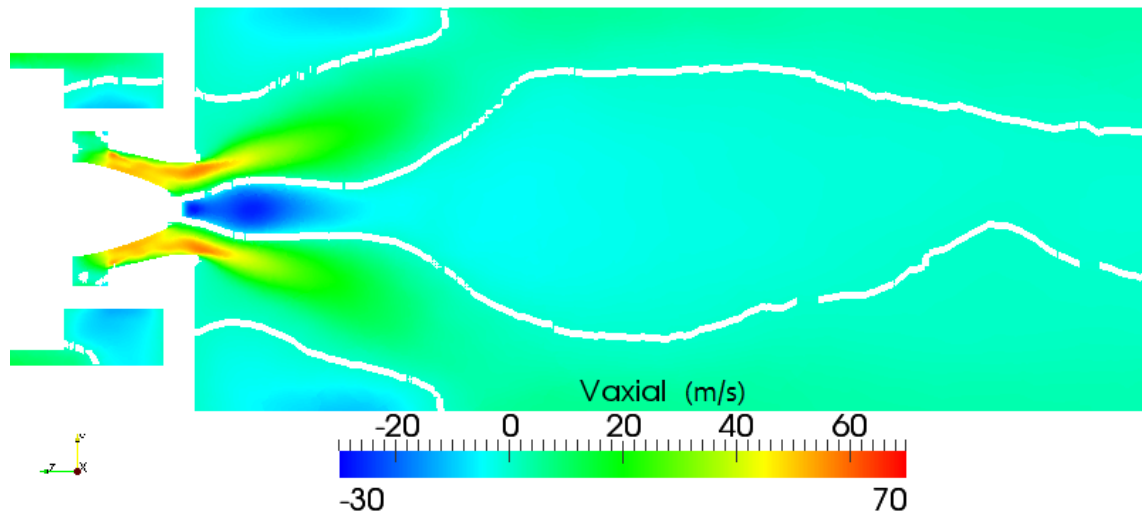


FIGURE 8.4 – Champ moyen de vitesse axiale et isolignes de vitesse  $V_{axial} = 0 \text{ m/s}$ .

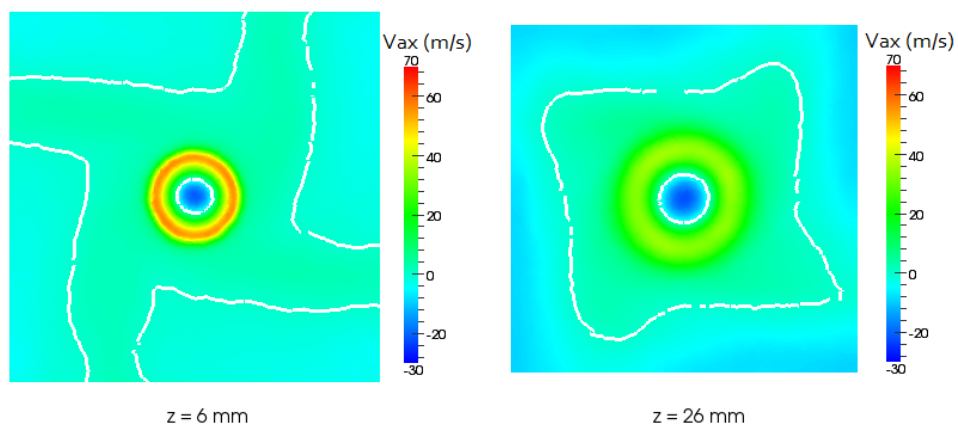


FIGURE 8.5 – Champ moyen de vitesse axiale et isolignes de vitesse  $V_{axial} = 0 \text{ m/s}$ , à  $z = 6 \text{ mm}$  et  $z = 26 \text{ mm}$ .

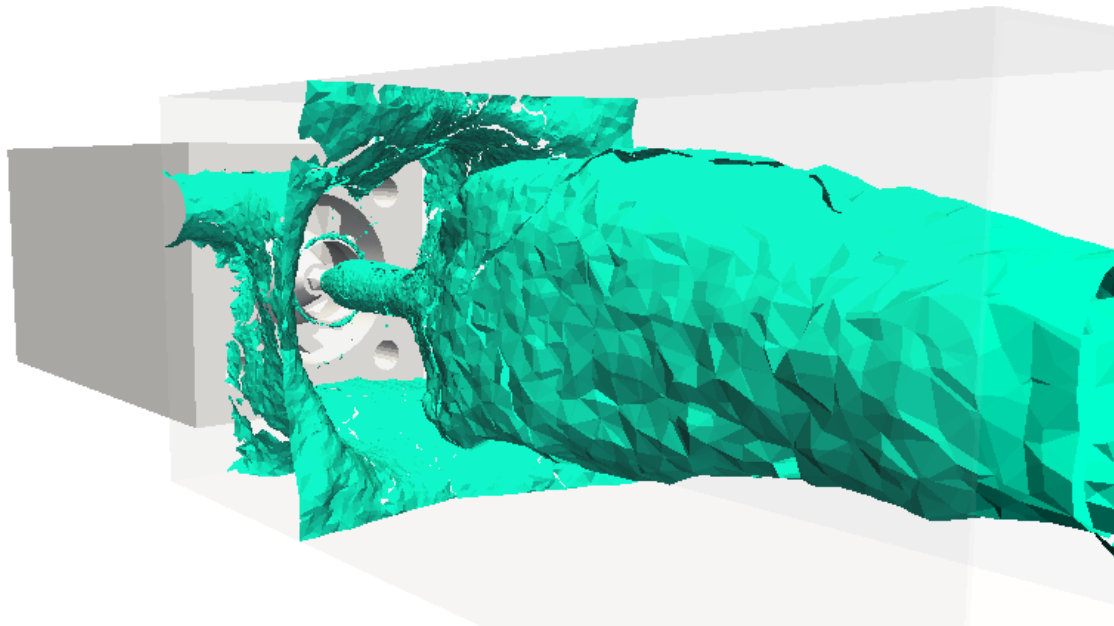


FIGURE 8.6 – Iso-surface de vitesse axiale moyenne nulle  $V_{axial} = 0 \text{ m/s}$ .

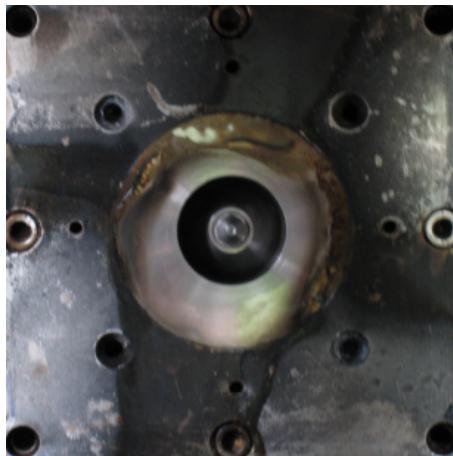


FIGURE 8.7 – Fond de chambre du MERCATO après plusieurs séances de mesures. Photo R. Lecourt.

une zone centrale de dépression que suivent les lignes de courant. Au milieu de l'enroulement, quelques lignes de courant sont colorées localement en bleu à cause de leur vitesse axiale négative. Ces lignes correspondent à la zone de recirculation centrale. Les zones de recirculation latérales sont également mises en évidence. On peut même deviner la position des branches de la croix. Enfin, certaines lignes de courant s'échappent des zones de recirculation et se dirigent vers l'aval en s'étendant radialement.

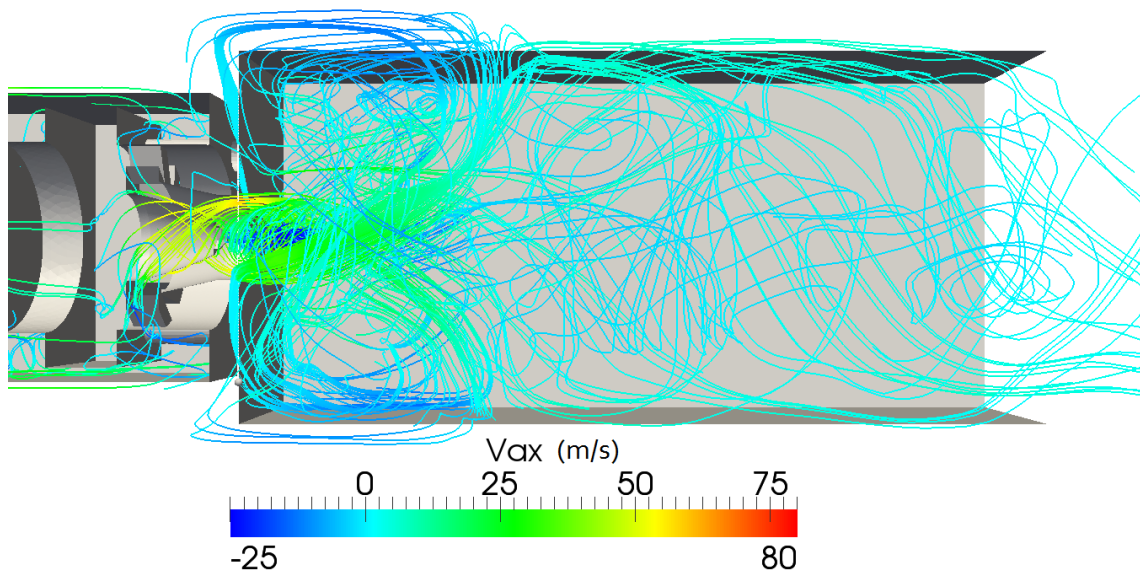


FIGURE 8.8 – Lignes de courant de l'écoulement moyen monophasique, colorées par la vitesse axiale.

**Profils de vitesse** Les vitesses sont comparées aux résultats RANS de Linassier [79], ainsi qu'aux valeurs expérimentales obtenues par LDA pour le point TIMECOP ( $WR = 0,42$ ,  $T = 463\text{ K}$ ). Bien que les conditions d'essai diffèrent du point de référence choisi pour notre simulation, Lecourt [74] a montré que les profils sont autosimilaires. Afin d'effectuer la comparaison, les valeurs obtenues sont donc divisées par la vitesse débitante de l'écoulement dans le plenum. Les vitesses moyennes axiale, radiale et tangentielle sont respectivement présentées sur les figures 8.9, 8.10 et 8.11. Les sections sont localisées à 8, 26, 56 et 116 mm du fond de la chambre. Les vitesses fluctuantes sont présentées sur les figures 8.12, 8.13) et 8.14. Les résultats montrent la bonne reproduction des différentes caractéristiques du jet. L'évolution du profil de vitesse axiale montre que l'expansion du jet est correctement restituée, de même que la diminution de la vitesse axiale maximale. Les vitesses radiales et tangentielles sont, elles aussi, bien retrouvées. Les profils de vitesse fluctuante sont correctement approchés par l'approche LES, qui sous-estime cependant légèrement certaines amplitudes. L'atténuation de la turbulence est néanmoins correctement reproduite. Les résultats de l'approche RANS, calculés à partir de l'énergie cinétique turbulente, montrent la difficulté de retrouver les niveaux d'énergie corrects.

La comparaison des profils montrent que les vitesses moyennes et fluctuantes sont correctement représentées par les deux approches. Les LES et RANS n'utilisent pas le même

maillage (4 200 000 éléments pour l'approche LES, 3 800 000 éléments pour l'approche RANS). L'approche LES est plus proches que l'approche RANS des résultats expérimentaux, en particulier pour les grandeurs fluctuantes.

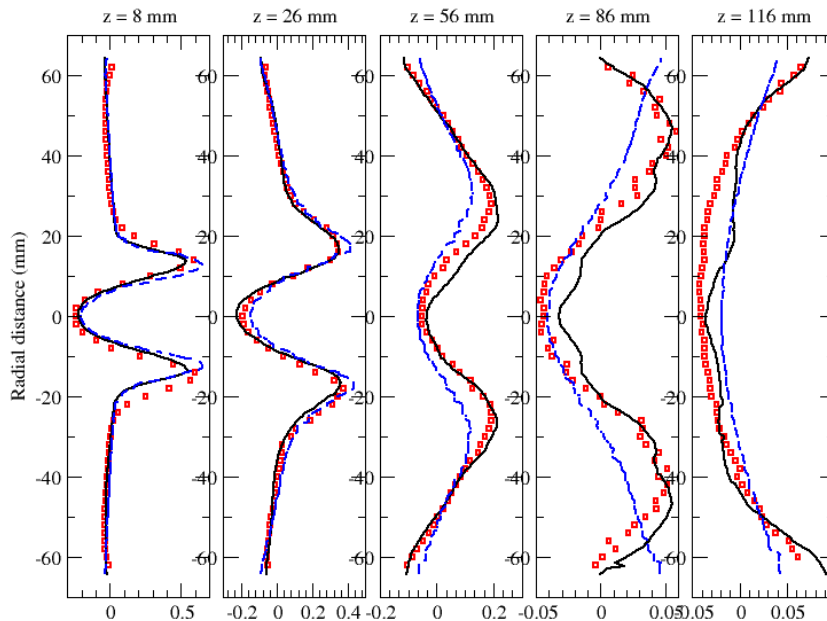


FIGURE 8.9 – Vitesse moyenne axiale adimensionnée (— : LES, - - : RANS,  $\square$  : LDA).

**Champ de pression et perte de charge** Grâce à des capteurs placés dans le plenum et dans la chambre de combustion, la perte de pression statique qui constitue, parce que les vitesses sont faibles, l'essentiel de la perte de charge dans le système d'injection a été expérimentalement mesurée à  $\Delta P = 5500 Pa$ . La simulation numérique LES donne une perte égale à  $\Delta P = 4500 Pa$ . Cette différence pourrait être expliquée par des lois de paroi mal adaptées dans les vrilles du tourbillonneur.

### 8.3.1.2 Champ moyen de la phase dispersée

Après l'établissement de l'écoulement gazeux, des gouttes sont injectées. Les résultats de cette partie sont obtenus lorsque l'écoulement diphasique est établi.

#### Comparaison des profils de la phase dispersée aux résultats expérimentaux

Les résultats numériques sont comparés aux calculs RANS de Linassier [79], ainsi qu'aux mesures expérimentales obtenues pour le point de référence à  $z = 6 mm$ . Le ruissellement du carburant liquide sur les parois n'a pas permis d'effectuer d'autres mesures.

La figure 8.15 montre la vitesse axiale moyenne des gouttes. Les données ayant été mesurées selon les axes vertical et horizontal, deux jeux de données expérimentales sont disponibles. La simulation RANS de Linassier [79] donne des résultats très proches des valeurs expérimentales à  $z = 6 mm$ , ce qui s'explique simplement : l'injection est réalisée à partir de ces mêmes données expérimentales, à cette même abscisse-là. La simulation LES,

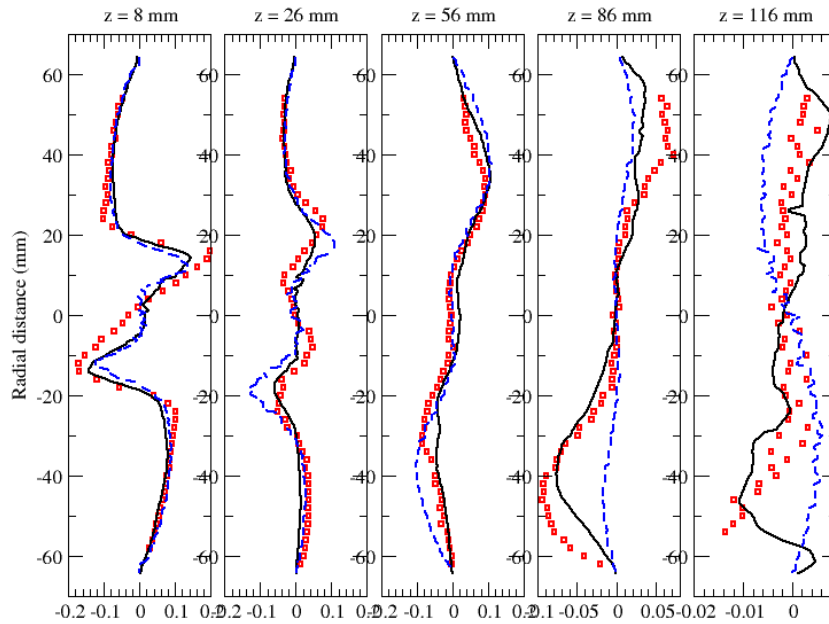


FIGURE 8.10 – Vitesse moyenne radiale adimensionnée (— : LES, - - : RANS,  $\square$  : LDA).

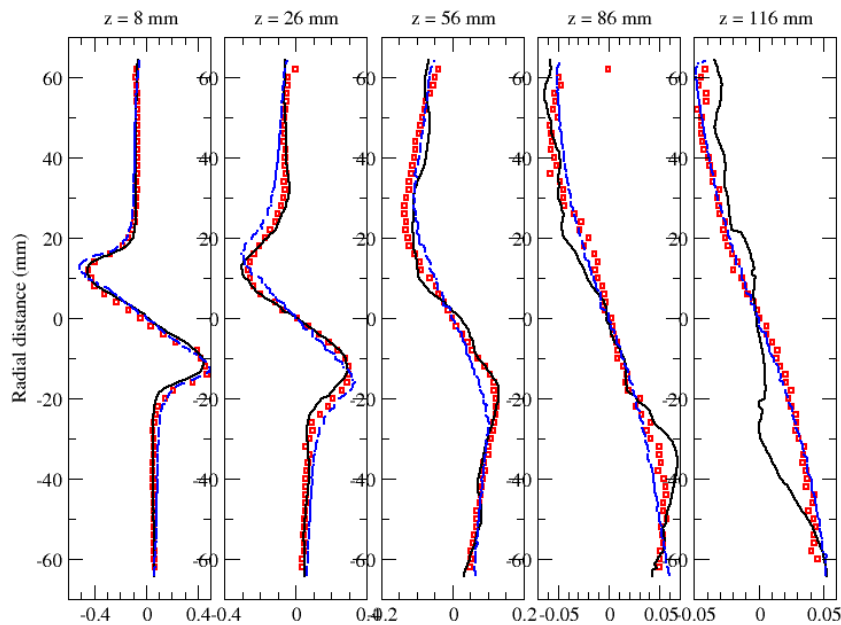


FIGURE 8.11 – Vitesse moyenne tangentielle adimensionnée ((— : LES, - - : RANS,  $\square$  : LDA).

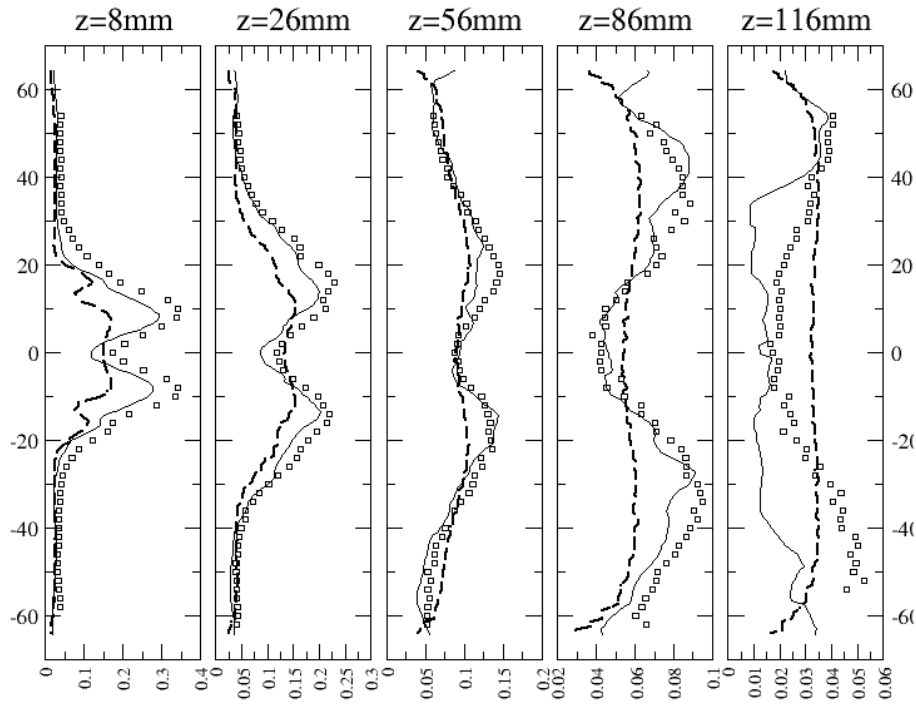


FIGURE 8.12 – Vitesse fluctuante moyenne axiale adimensionnée (— : LES, - - : RANS, □ : LDA).

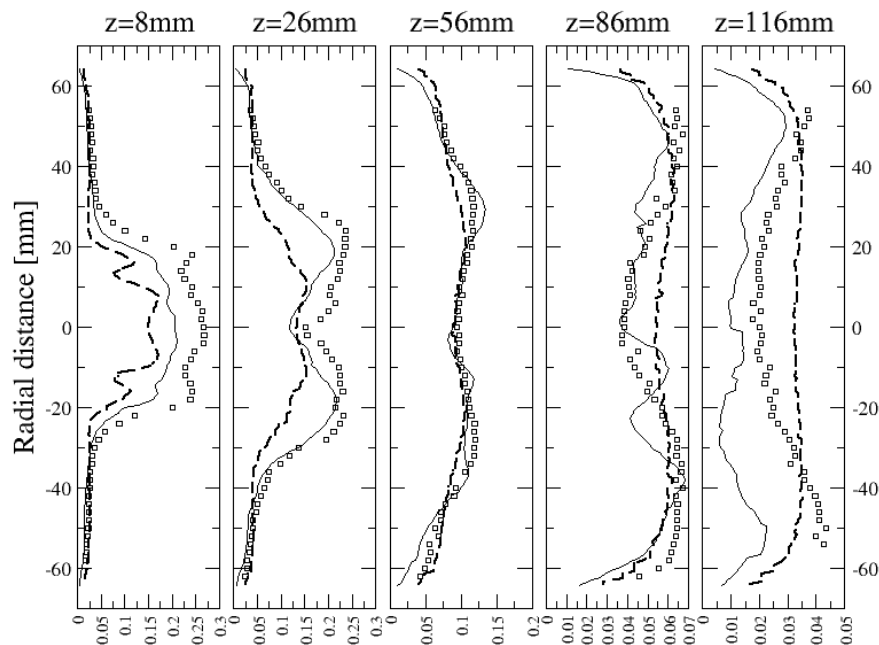


FIGURE 8.13 – Vitesse fluctuante moyenne radiale adimensionnée (— : LES, - - : RANS, □ : LDA).

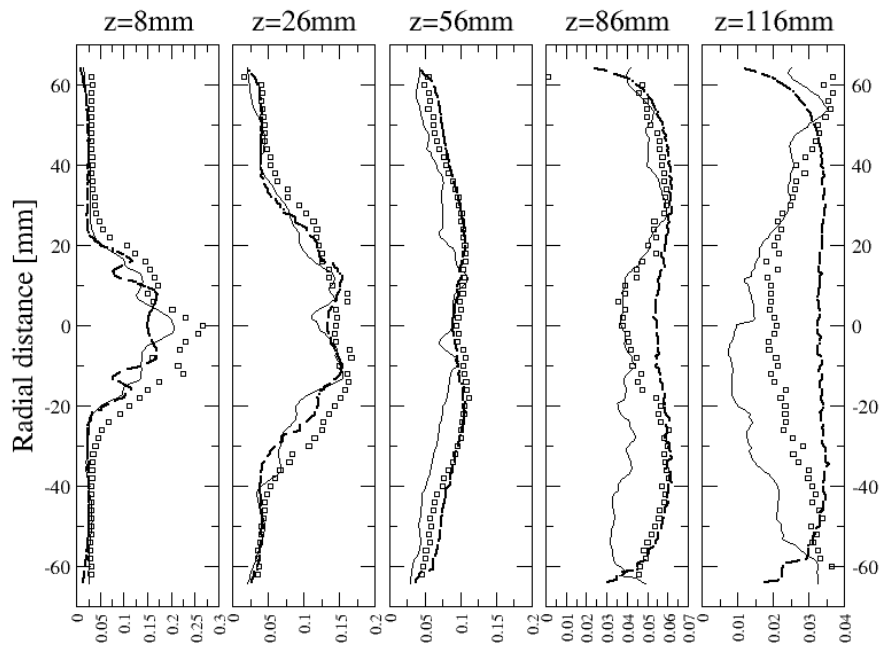


FIGURE 8.14 – Vitesse fluctuante moyenne tangentielle adimensionnée (— : LES, - - : RANS, □ : LDA).

pour laquelle le plan d'injection est décalé à l'abscisse  $z = 0$  mm, donne une vitesse axiale maximale légèrement inférieure. Par ailleurs, la vitesse axiale au centre devient négative pour la LES, tandis que les mesures expérimentales montrent une vitesse quasi-nulle. Cela peut être dû à une plus forte quantité de gouttes, généralement de petite taille, recirculant. Les petites gouttes suivent l'écoulement porteur qui présente également une vitesse axiale négative à l'abscisse  $z = 6$  mm (voir Fig. 8.9). Le débit est cependant très faible dans cette zone. La validation des mesures expérimentales nécessite qu'un nombre suffisant de gouttes soit mesuré. Étant donné la faible densité volumique dans la zone de recirculation centrale, les temps de mesures peuvent être plus longs que prévus et biaiser les résultats. Il faudrait réaliser les moyennes de l'écoulement sur un temps aussi long que le temps d'acquisition PDI. Si on compare les simulations RANS et LES aux abscisses  $z = 26$  mm et  $z = 56$  mm, le jet s'étend moins dans le cas de la LES. Cet effet est attribuable à l'hypothèse 8.2.3 sur la vitesse radiale à l'injection. Cela est aussi dû à l'écoulement porteur car l'on retrouve le même phénomène, bien qu'atténué, sur le profil de vitesse axiale gazeuse (voir Fig. 8.9, à  $z = 26$  mm et  $z = 56$  mm). Les observations faites pour la vitesse axiale des gouttes se retrouvent également sur les profils de vitesses radiale (Fig. 8.16) et tangentielle (Fig. 8.17). Pour des abscisses supérieures à  $z = 6$  mm, sans valeurs expérimentales, il est difficile de juger quelle approche donne les meilleurs résultats.

Le diamètre moyen de Sauter  $D_{32}$  est présenté figure 8.18. Le niveau maximal de  $D_{32}$  est effectivement retrouvé. Le diamètre près de l'axe semble sous-estimé par la LES, ce qui est dû à nouveau à la recirculation des plus petites gouttes. Au-delà d'un rayon de couronne égal à 20 mm, le niveau du diamètre  $D_{32}$  reste quasi-constant d'après les observations expérimentales. Ce résultat n'est pas retrouvé par les simulations, qui donnent néanmoins des résultats phénoménologiquement corrects : les recirculations latérales piègent les plus petites gouttes, d'où un  $D_{32}$  plus petit dans ces zones. Aux abscisses  $z = 26$  mm et  $z =$

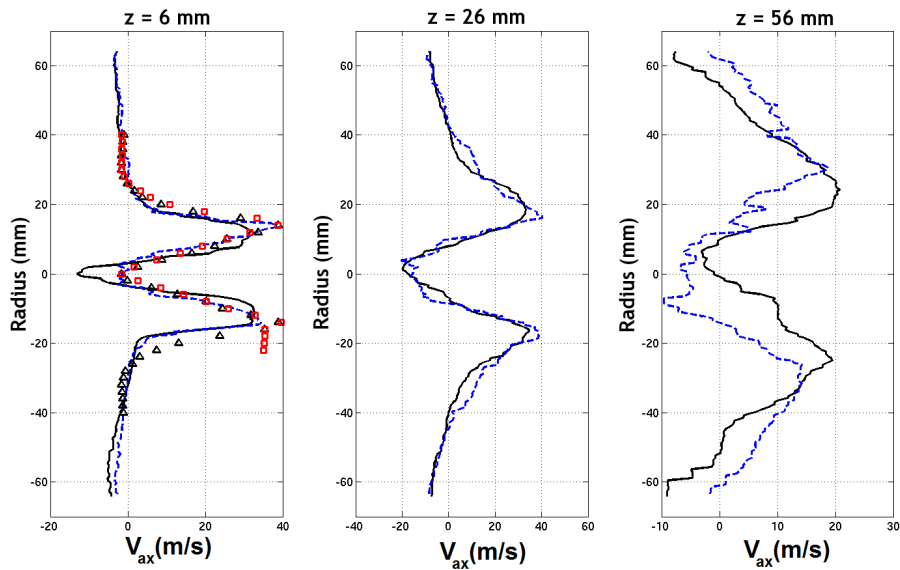


FIGURE 8.15 – Vitesse axiale de la phase dispersée (— : LES, - - : RANS,  $\square$  et  $\triangle$  : PDI).

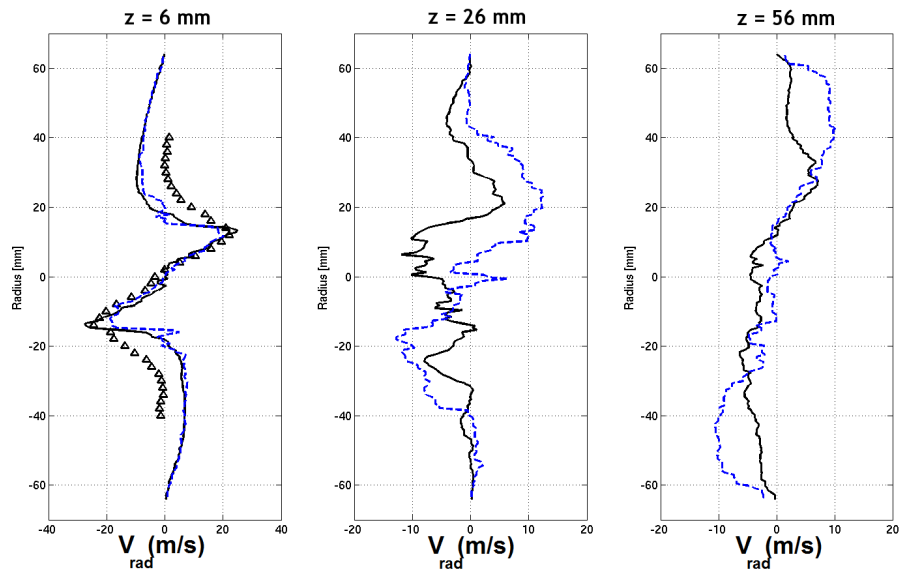


FIGURE 8.16 – Vitesse radiale de la phase dispersée (— : LES, - - : RANS,  $\triangle$  : PDI).



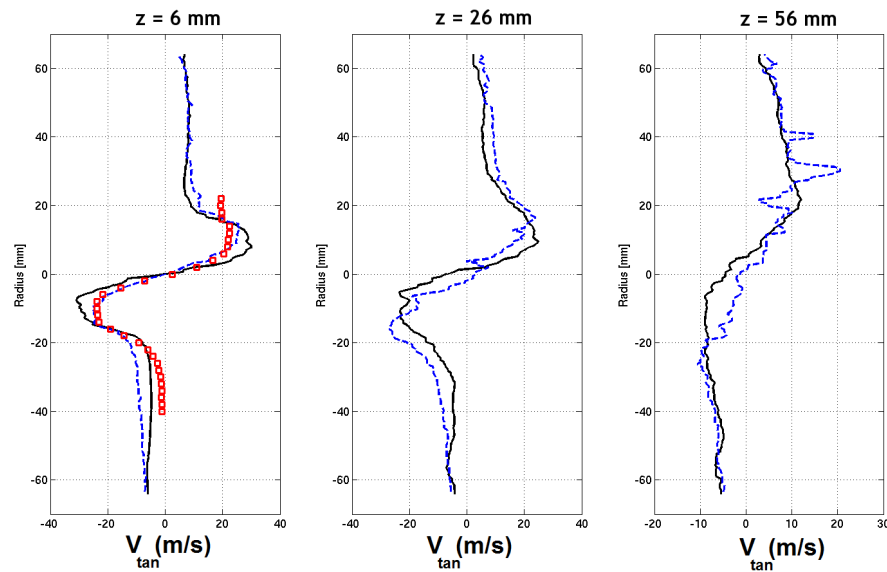


FIGURE 8.17 – Vitesse tangentielle de la phase dispersée (— : LES, - - : RANS,  $\square$  : PDI).

56 mm, les simulations LES et RANS donnent des profils de  $D_{32}$  différents. Les résultats LES démontre l'expansion du jet sur le profil de  $D_{32}$ . Pour les simulations RANS, le diamètre moyen de Sauter a tendance à s'uniformiser rapidement autour d'une valeur  $D_{32} = 10 \mu\text{m}$ .

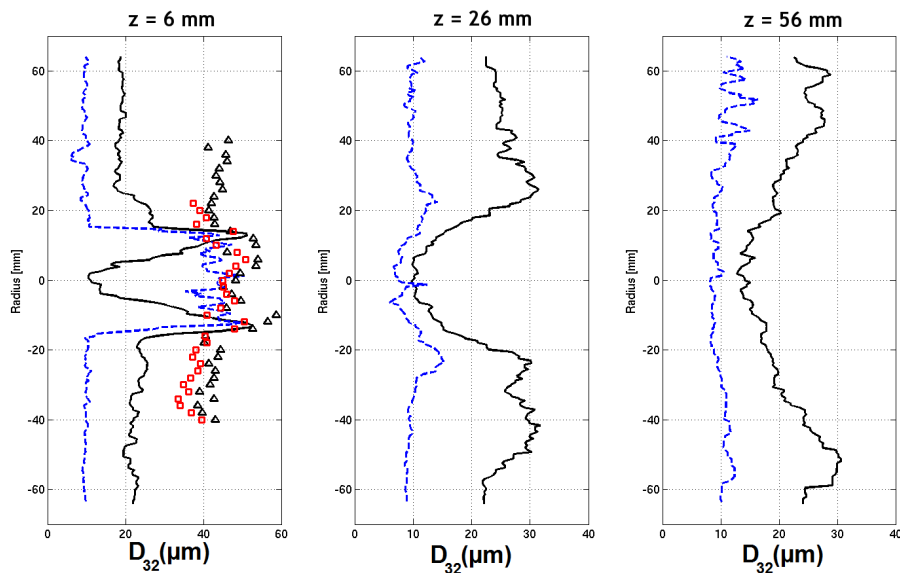


FIGURE 8.18 – Diamètre moyen de Sauter  $D_{32}$  (— : LES, - - : RANS,  $\square$  et  $\triangle$  : PDI).

Enfin le flux volumique est présenté sur la figure 8.19. Les mesures expérimentales ne prenant pas en compte toutes les gouttes, le débit massique est adimensionné par sa valeur maximale. Ces résultats sont à considérer avec prudence mais permettent néanmoins de savoir comment la phase dispersée se déplace. Les profils RANS de Linassier [79] ainsi que les profils LES sont adimensionnés par leur propre débit massique maximal, à chaque

abscisse. La valeur maximale du flux est atteinte au même rayon, pour les simulations et les mesures. Le flux expérimental s'étale sur un rayon supérieur à celui des simulations, ce qui peut traduire une mauvaise représentation de l'apport de gouttes par les recirculations latérales. Par ailleurs, le flux de carburant liquide près de l'axe est trouvé non-nul à cause du rebond des gouttes à la paroi. Le RANS donne un flux inférieur près de l'axe alors que la LES le donne nul. Les profils aux abscisses  $z = 26$  mm et  $z = 56$  mm montrent à nouveau la différence d'expansion radiale du jet pour les deux approches. Dans les deux simulations, un flux important apparaît aux parois, traduisant la présence de nombreuses gouttes.

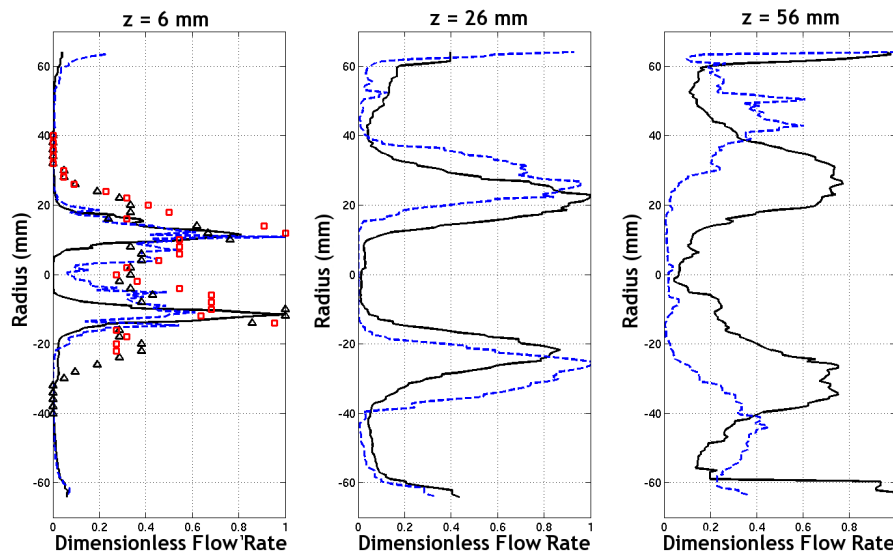


FIGURE 8.19 – Flux volumique de la phase dispersée (— : LES, - - : RANS,  $\square$  et  $\triangle$  : PDI).

**Champ moyen de richesse liquide** Le champ moyen de richesse liquide est présenté sur la figure 8.20. Bien que la valeur maximale atteigne  $\Phi_0 = 13$ , l'échelle a été adaptée afin de mieux mettre en évidence les zones de forte richesse. La zone proche de l'injecteur, où sont injectées les gouttes, présente sans surprise une forte richesse liquide. Conformément aux profils de flux volumique, les parois présentent également une forte concentration de gouttes, en particulier dans la zone de recirculation latérale. Les gouttes se concentrent notamment dans les coins et près de la sortie du diffuseur. A la sortie du diffuseur, les gouttes recirculées rencontrent le flux de gouttes injectées, ce qui se traduit par une accumulation des gouttes. Ce comportement est retrouvé expérimentalement, comme le montre la tomographie laser de Linassier [79] en figure 7.5.

La figure 8.21 présente la fraction volumique moyenne dans le MERCATO. On remarque ainsi que si la plus grande partie de l'écoulement est effectivement dans les hypothèses de two-way coupling ( $1 \cdot 10^{-6} < \alpha_p < 1 \cdot 10^{-3}$ ), les parois et la zone proche injecteur relèvent plus certainement de l'approche *four-way coupling* où les interactions des gouttes entre elles sont prises en compte pour calculer aussi bien le mouvement des particules que le taux d'évaporation.

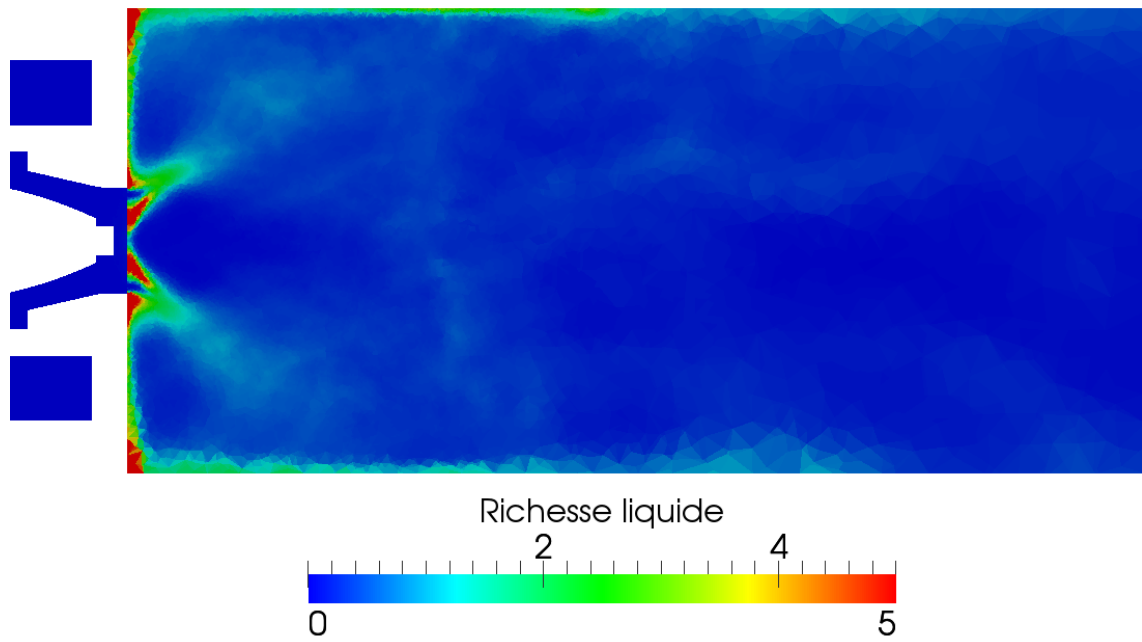


FIGURE 8.20 – Champ moyen de richesse liquide.

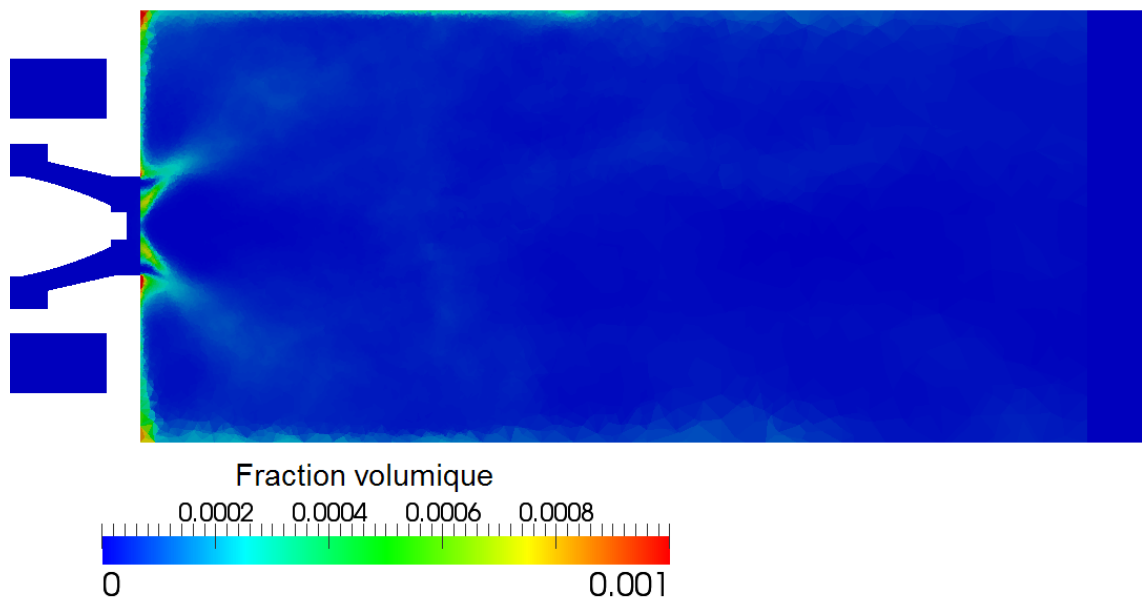


FIGURE 8.21 – Champ moyen de fraction volumique.

### 8.3.2 Analyse de l'écoulement instationnaire

Nous nous intéressons à présent à l'écoulement instationnaire afin de caractériser les phénomènes intervenant pour la dispersion des gouttes ou lors de l'allumage.

#### 8.3.2.1 Frequence du PVC

De part et d'autre de la zone de recirculation centrale, l'écoulement présente des vitesses opposées. Le cisaillement ainsi créé déstabilise l'écoulement en giration, et un tourbillon énergétique apparaît : le vortex de précession (ou *PVC* : *Processing Vortex Core*). Ce tourbillon opère un mouvement de précession autour de la zone de recirculation centrale et, d'après Luca-Negro et O'Doherty [80], façonne la zone de recirculation centrale. Cette structure peut se matérialiser de plusieurs façons. L'une d'entre elle consiste à calculer le critère  $Q$ , qui compare le taux de rotation  $\tilde{\Omega}$  au taux de déformation  $\tilde{S}$  et à ensuite tracer une iso-surface de cette grandeur de valeur positive c'est à dire telle que la rotation soit plus importante que le cisaillement :

$$Q = \frac{1}{2} \left( \|\tilde{\Omega}\|^2 - \|\tilde{S}\|^2 \right) \quad (8.6)$$

où  $\tilde{S}$  est défini par l'équation (1.46) et  $\tilde{\Omega}$  est défini par :

$$\tilde{\Omega} = \frac{1}{2} \left( \nabla \tilde{V} - (\nabla \tilde{V})^T \right) \quad (8.7)$$

Sans modifier les résultats, le PVC, qui se caractérise par une pression plus faible par rapport au reste de l'écoulement, peut également être matérialisé par une iso-surface de pression. Cette méthode, plus intuitive, est utilisée. La figure 8.22 montre la structure du PVC.

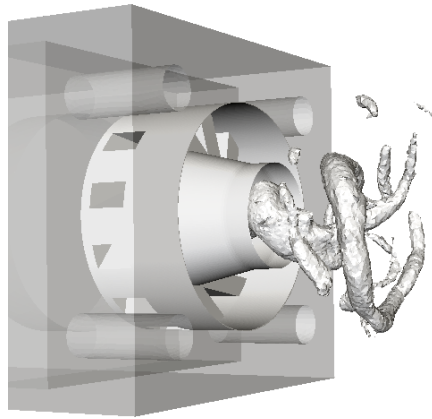


FIGURE 8.22 – Vortex de précession (PVC) matérialisé par une iso-surface de pression  $P = 103\,000$  Pa.

Cette instabilité hydrodynamique présente une fréquence caractéristique dépendant du point de fonctionnement choisi, et plus particulièrement de la vitesse débitante des gaz au niveau du tourbillonneur. Pour le point de référence, Lecourt [74] a identifié cette valeur égale à  $f_{PVC} = 1050$  Hz.

L'installation de capteurs numériques dans le domaine de calcul, et plus particulièrement dans la chambre (voir leur position sur la figure 8.23), permet de capter les

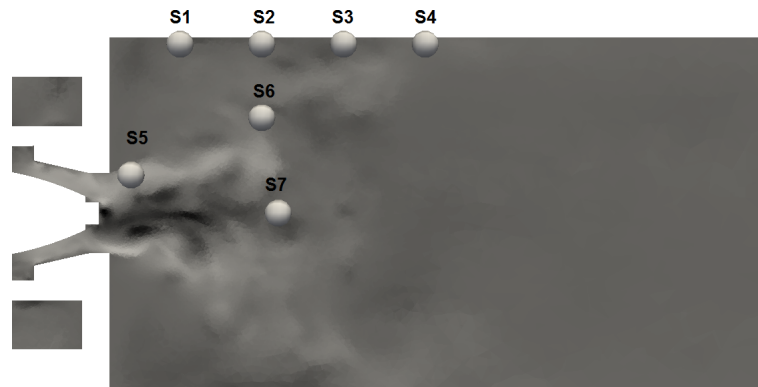


FIGURE 8.23 – Position des capteurs CHARME dans la chambre du MERCATO.

fréquences de ce phénomène instationnaire via un traitement par transformée de Fourier des signaux de pression relevés. Les signaux relevés par divers capteurs placés dans le domaine de calcul (voir figure 8.23) ont été traités. La fréquence du PVC identifiée est égale à  $f_{PVC} = 920$  Hz pour l'écoulement monophasique (voir Fig. 8.24). L'analyse de l'écoulement diphasique montre que l'introduction de carburant dans la chambre de combustion modifie légèrement cette fréquence, passant à  $f_{PVC} = 1005$  Hz (voir Fig. 8.30). La fréquence du PVC est bien approchée.

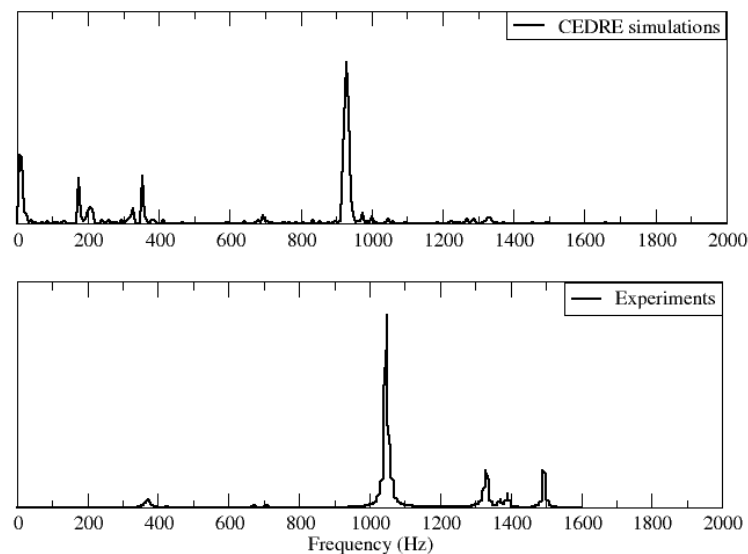


FIGURE 8.24 – Comparaison du spectre obtenu par simulation LES monophasique, au spectre pour l'écoulement monophasique obtenu expérimentalement par Lecourt.

### 8.3.2.2 Interaction gouttes-turbulence

Le PVC tourne autour de l'axe de la chambre de combustion, et interagit avec la phase dispersée. Cette interaction peut avoir des répercussions sur l'allumage, aussi faut-il caractériser le comportement des gouttes lorsqu'elles rencontrent cette structure.

**Champs instantanés** La figure 8.25 présente un champ de gouttes instantané. La phase dispersée est représentée par des sphères, dont la taille est proportionnelle au diamètre réel des gouttes, colorées par la vitesse axiale des gouttes. Les gouttes sont incluses dans une tranche d'épaisseur de  $\pm 1$  mm autour de l'abscisse  $z = 6$  mm. Les lignes noires signalent une vitesse axiale nulle pour la phase gazeuse à l'abscisse  $z = 6$  mm. On reconnaît la structure en croix formée par les poches de la recirculation latérale. Au centre, les gouttes ont une forte vitesse axiale : il s'agit des gouttes injectées. Dans les poches de recirculation, la vitesse des gouttes est négative. Les gouttes piégées dans la recirculation rejoignent ensuite l'axe de la chambre en empruntant l'une des branches de la croix formée ; leur vitesse est alors de 10 à 20 m/s. Cette structure, imposée par l'écoulement porteur, se retrouve à tout instant.

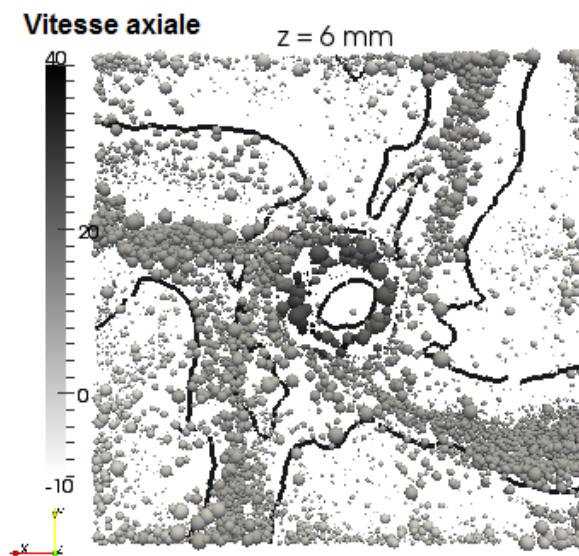


FIGURE 8.25 – Tranche transversale (à  $z = 6$  mm) de la répartition de la phase dispersée colorée par la vitesse axiale des gouttes. La taille des sphères est proportionnelle à la taille des gouttes. Isolignes de vitesse axiale gazeuse nulle.

Si la trajectoire des gouttes est influencée par les recirculations de coin, elle est également modifiée par la recirculation centrale, et plus particulièrement par le PVC. La figure 8.26 montre la phase dispersée selon une tranche latérale et une tranche transversale à l'abscisse  $z = 26$  mm, avec ou sans la représentation du PVC, matérialisé par une iso-surface de pression  $P = 103\,000$  Pa. On remarque qu'il n'y a pas de goutte là où se trouve le PVC. La tranche latérale montre ainsi que le PVC repousse les gouttes injectées. La rotation de la structure crée ainsi des poches de gaz où se trouve peu de carburant liquide. Les gouttes se déplacent ensuite par paquet, que l'on peut observer dans le reste de la chambre de combustion. La tranche autour de l'abscisse  $z = 26$  mm montre qu'au centre, près de l'axe de rotation, de très petites gouttes se déplacent avec une vitesse négative due au gradient de pression adverse. Les petites gouttes sont cependant peu nombreuses, rendant une propagation de la flamme peu probable lorsque l'allumage est effectué au centre de la chambre.

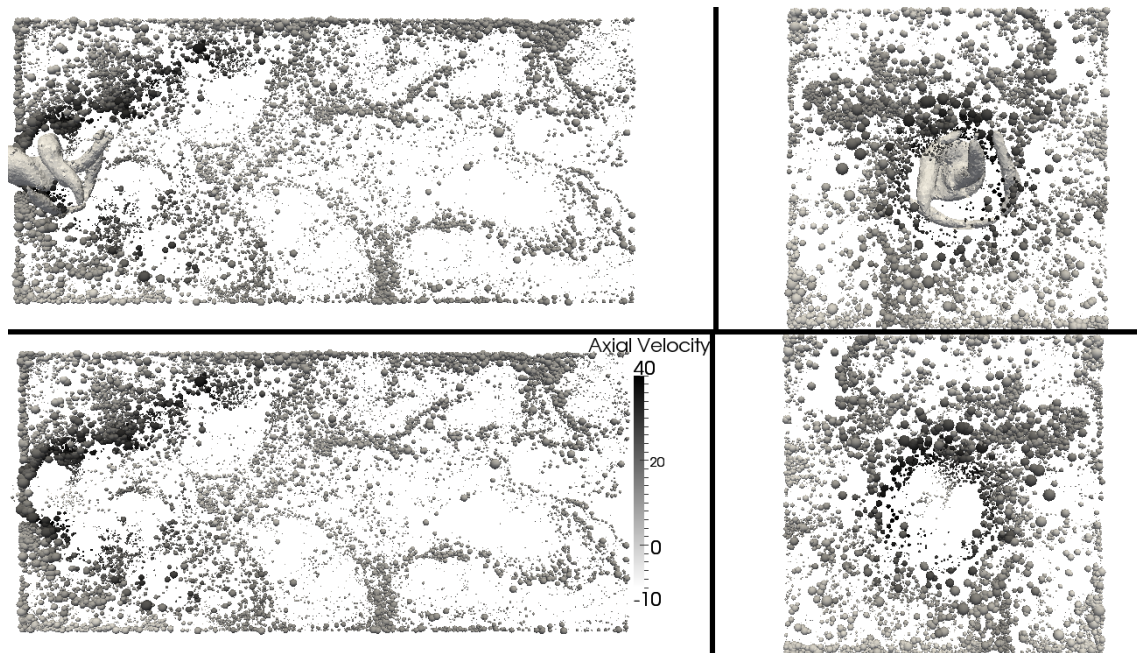


FIGURE 8.26 – Tranches longitudinales et transversales (à  $z = 26$  mm) de la répartition de la phase dispersée, colorée par la vitesse axiale des gouttes. La taille des sphères est représentative de la taille des gouttes. Le PVC est représenté par une iso-surface de pression  $P = 103\,000$  Pa.

**Evolution temporelle de la masse liquide locale des gouttes** Si la distribution des gouttes dans la chambre de combustion répond au caractère instationnaire et périodique du PVC, les caractéristiques de l'écoulement diphasique vu par les bougies mérite d'être étudié. La convection et l'expansion du noyau d'allumage dépend en effet des conditions rencontrées à proximité des bougies.

Les investigations expérimentales de Linassier [79], rappelées dans la partie 7.2.2, ont montré que l'analyse de Fourier de la simulation retrouve la fréquence du PVC. Les capteurs relevant le signal expérimental de luminescence (proportionnel au diamètre au carré des gouttes) aux positions des bougies n'ont quant à eux rien retrouvé. Plus récemment, Goyer [52] a montré que la densité de gouttes dans la recirculation centrale, ou dans une partie des zones de recirculation latérales, n'est pas influencée par le PVC. En revanche les capteurs étudiant la densité et la taille des gouttes dans la zone de cisaillement retrouvent la fréquence caractéristique de l'instabilité hydrodynamique, ainsi que pour les bougies situées aux abscisses  $z = 26$  mm et  $z = 56$  mm. Ce résultat montre que l'influence du PVC est expérimentalement difficile à capter.

Afin de savoir si ces résultats peuvent être reproduits numériquement, l'évolution locale des caractéristiques diphasiques est étudiée pour trois hauteurs, à cinq abscisses différentes (tableau 8.7). En chaque point, le bilan est effectué sur une boîte cubique, d'arête 10 mm.

Les figures 8.27, 8.28 et 8.29 présentent le diamètre moyen de Sauter  $D_{32}$  de la phase dispersée aux ordonnées respectives 0 mm, 20 mm et 50 mm. Les fluctuations obtenues pour le  $D_{32}$  sont représentatives des fluctuations observées pour la masse liquide et pour le diamètre moyen arithmétique  $D_{10}$ . Conformément à l'étude de Goyer [52], aucune périodicité n'est retrouvée sur l'axe de la chambre. A  $x = 20$  mm, le signal est clairement

Abscisses $z =$	8 mm, 26 mm, 56 mm, 86 mm, 116 mm
Hauteurs $x =$	0 mm, 20 mm, 50 mm

TABLE 8.7 – Abscisses et hauteurs de la position des capteurs numériques pour la phase dispersée.

périodique pour les capteurs aux abscisses  $z = 8 \text{ mm}$  et  $z = 26 \text{ mm}$ . Une transformée de Fourier du signal montre que la fréquence est celle du PVC ( $\approx 1000 \text{ Hz}$ ). Les diamètres peuvent diminuer jusqu'à 40%, ce qui est retrouvé expérimentalement. Les bougies situées au delà de  $z = 56 \text{ mm}$  ne montre pas de caractère périodique marqué. Selon Goyer [52], le point ( $x = 20 \text{ mm}$ ,  $z = 56 \text{ mm}$ ) se situe dans une zone de transition où l'instabilité du PVC tend à disparaître. Enfin, à  $x = 50 \text{ mm}$ , le caractère périodique du signal tend à disparaître. On rejoint en cela les résultats de Linassier [79].

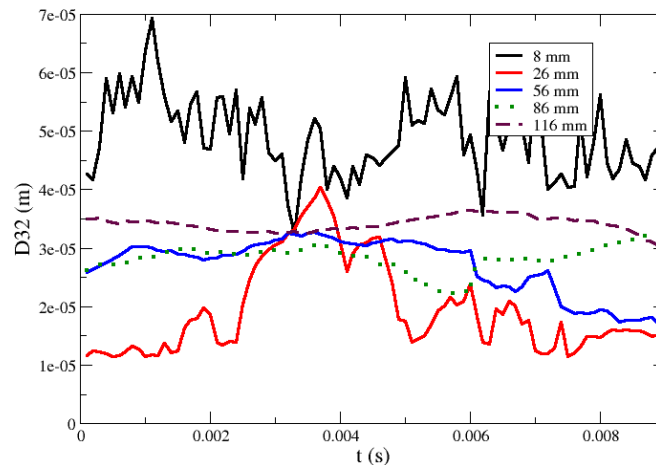


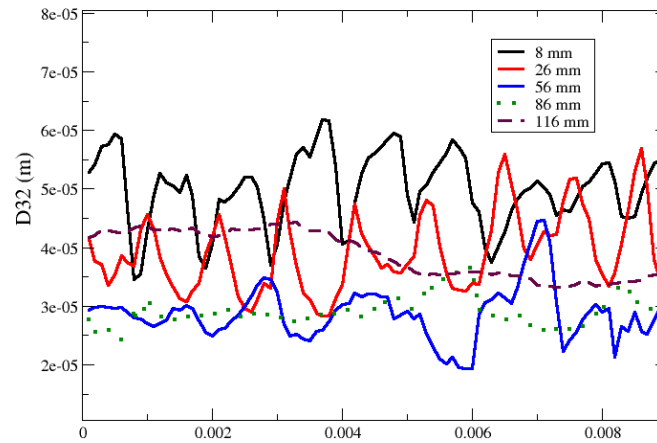
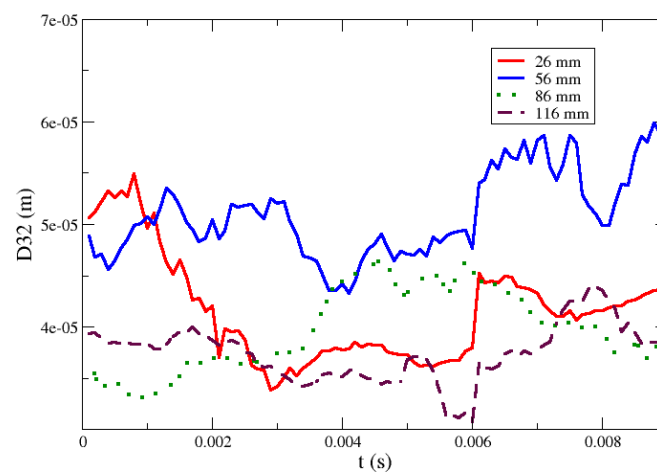
FIGURE 8.27 – Evolution temporelle du diamètre moyen de Sauter  $D_{32}$  sur l'axe de la chambre à  $x = 0 \text{ mm}$

Les résultats obtenus pour l'évolution temporelle des grandeurs de la phase dispersée se retrouvent également via les capteurs CHARME dans la chambre. La position des sondes est décrite figure 8.23. L'analyse fréquentielle du signal de fraction massique de carburant  $Y_F$ , présenté sur la figure 8.30, montre ainsi que la sonde S6 situé dans le spray capte la fréquence du PVC. La sonde S3 située près de la bougie à  $z = 56 \text{ mm}$  ne relève rien.

## 8.4 Cartographie d'allumage

L'écoulement diphasique au sein du MERCATO étant fortement instationnaire, la réussite de l'allumage n'est pas certaine. La position de la bougie doit alors être optimisée afin que la probabilité d'allumage soit la plus élevée possible. Afin de déterminer la position optimale, il est possible de réaliser des essais expérimentaux. Cependant, compte tenu du coût des essais, ils ne peuvent être réalisés que pour un nombre restreint de positions. Les industriels peuvent également utiliser des moyens numériques. Le caractère fortement



FIGURE 8.28 – Evolution temporelle du diamètre moyen de Sauter  $D_{32}$  à  $x = 20$  mmFIGURE 8.29 – Evolution temporelle du diamètre moyen de Sauter  $D_{32}$  près des bougies à  $x = 50$  mm

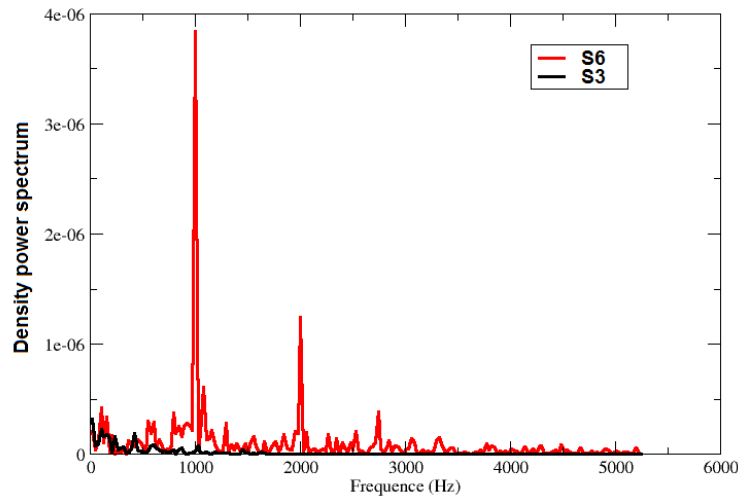


FIGURE 8.30 – Spectre du signal de fraction massique de carburant  $Y_F$ .

instationnaire de l'écoulement tend à privilégier l'approche LES mais le coût de calcul unitaire élevé rend difficile la réalisation d'une étude paramétrique exhaustive. Cette partie s'intéresse donc à l'utilisation d'un modèle d'allumage de premier niveau pour déterminer, à partir de champs diphasiques non-réactifs, les positions les plus propices à un l'allumage réussi de la chambre. Cet outil, présenté dans la partie 5.4.4, permet de dresser une carte de probabilité de réussite de l'allumage.

#### 8.4.1 Choix des paramètres

Le modèle d'allumage est appliqué à la section longitudinale ( $x = 0$  mm) du champ aérodiphasique. Ainsi les quatre positions de bougie d'allumage seront étudiées.

Les données d'entrée du modèle, outre le champ aérodiphasique, sont le rayon et la température du noyau. Ceux-ci sont pris respectivement égaux à  $r_1 = 5,1$  mm et  $T_1 = 3500$  K. La détermination expérimentale et théorique de ces valeurs réalisée par García-Rosa [48] et Linassier [79] est expliquée dans la partie 5.3.5. Le noyau est simulé jusqu'à un temps physique égal à 1 ms, temps déterminé expérimentalement pour lequel le noyau évolue peu en proche paroi. A noter que dans les zones de forte vitesse, ce délai est sans doute surestimé et le noyau pourrait en réalité être convecté ou déformé.

Le modèle d'allumage est appliqué à 90 champs instantanés, échantillonnés à une fréquence de  $f = 10\,000$  Hz afin de capter les différentes phases du PVC. Cela correspond donc à un temps physique de 9 ms. Pour chaque champ, 1000 positions de dépôt d'énergie sont simulées, pour lesquelles on détermine si l'allumage est réussi. Pour chaque position on calcule le pourcentage d'allumages réussis : il s'agit de la probabilité d'allumage  $P_{ign}$ .

#### 8.4.2 Résultats

Dans cette partie, quelques résultats instantanés du champ d'allumage réussis sont présentés. La carte de probabilité d'allumage obtenue est ensuite analysée, et comparée aux résultats de l'approche RANS de Linassier [79] et aux résultats expérimentaux de Lecourt [73].

### 8.4.2.1 Quelques champs instationnaires

Les figures 8.31 et 8.32 présentent les résultats à deux instants différents de l'application de l'outil de cartographie. Les sphères blanches représentent les positions propices à l'allumage. Les traits de couleurs représentent les résultats expérimentaux de Lecourt [73]. En jaune : l'allumage est très probable, en rouge : il n'y a pas eu d'allumage observé, enfin en orange : les allumages réussis restent rares, mais ont été observés.

La figure 8.31 montre que beaucoup de positions sont favorables à l'allumage, y compris sur l'axe de la chambre. La figure 8.32 montre le résultat obtenu sur un champ figé 3,6 ms plus tard. Dans les deux cas, la zone de recirculation latérale est relativement favorable à l'allumage. Le premier champ montre que des allumages peuvent être réussis pour une abscisse  $z > 86$  mm, c'est à dire au delà de la zone de recirculation latérale. Enfin sur l'axe et dans la recirculation latérale, peu de positions semblent propices à l'allumage.

Le résultat concernant le coin de la recirculation latérale est intéressant. En effet la richesse liquide est très importante près du fond de chambre, ce qui peut expliquer l'échec de l'allumage. Cependant, dans le reste de la recirculation, le champ présente tous les aspects favorables à la réussite de l'allumage : beaucoup de petites gouttes sont présentes avec des temps d'évaporation faible, la vitesse de l'écoulement est faible et l'écoulement se rapproche de l'injecteur.

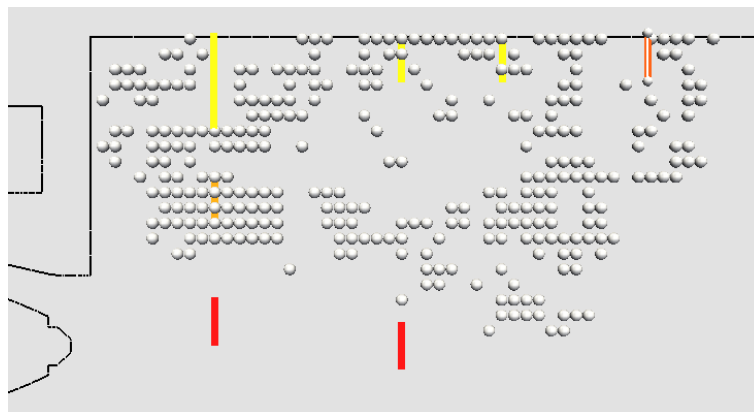


FIGURE 8.31 – Champ instationnaire des positions favorables à l'allumage. Comparaison aux données expérimentales de Lecourt [73] (jaune : allumage très probable, orange : allumage parfois observé, rouge : pas d'allumage).

### 8.4.2.2 Analyse des critères

Les critères d'allumage sont maintenant étudiés dans le second cas afin de comprendre pourquoi certaines zones sont plus favorables à l'allumage que d'autres. Le champ présenté figure 8.32 est donc examiné critère par critère afin de déterminer celui (ou ceux) qui est discriminant. L'application des critères sur le délai d'allumage et le rayon final du noyau n'est pas montrée car ces critères ne sont pas discriminants.

**Limite basse d'inflammabilité** Pour que l'allumage local réussisse, la quantité de carburant sous forme liquide ou gazeuse doit être suffisante. L'application du critère  $\Phi_0 > 0,4$  au champ instantané est montrée figure 8.33. Une partie des zones où la quantité de

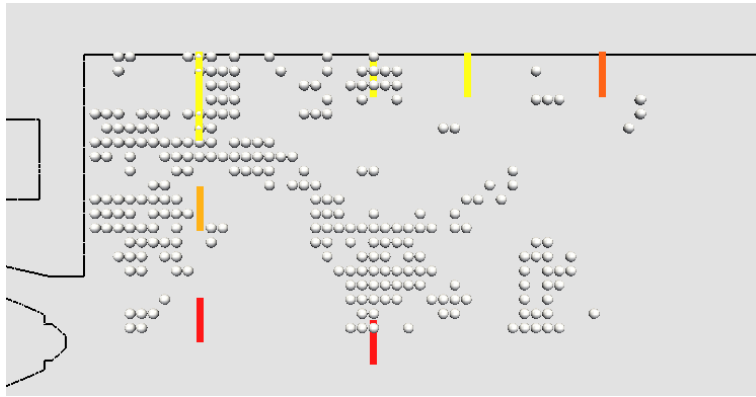


FIGURE 8.32 – Champ instationnaire des positions favorables à l’allumage, 3,6 ms plus tard. Comparaison aux données expérimentales de Lecourt [73] (jaune : allumage très probable, orange : allumage parfois observé, rouge : pas d’allumage).

gouttes n’est pas suffisante est relativement proche de la recirculation centrale. Pour la recirculation latérale, le critère est favorable.

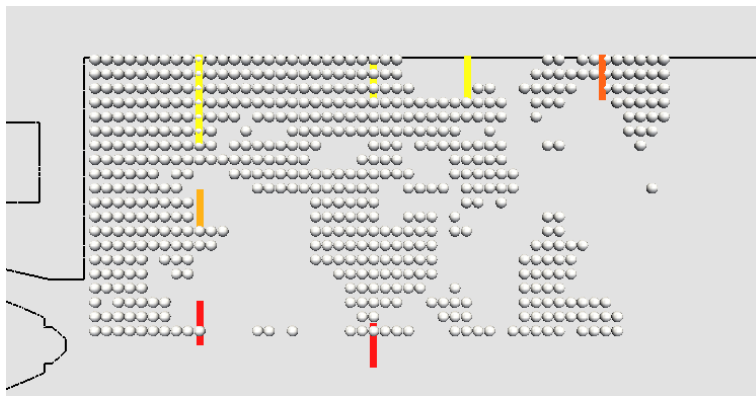


FIGURE 8.33 – Champ instantané de noyaux d’allumage satisfaisant le critère de limite d’inflammabilité.

**Température finale du noyau** En combustion diphasique il est difficile d’appliquer un critère sur la richesse haute, car celui-ci dépendrait notamment de la taille des gouttes. Appliquer un critère sur la température finale du noyau permet d’éliminer les zones trop riches ou présentant des diamètres de gouttes suffisamment grands pour que l’évaporation soit un phénomène bloquant pour la combustion. La forte évaporation des gouttes en ces endroits abaisse la température du gaz. La figure 8.34 montre les noyaux répondant aux précédents critères et dont la température finale vérifie l’inégalité  $T > T_0$ . La température  $T_0$  est ici choisie égale à  $T_0 = 600$  K. La température finale  $T_0$  supérieure éliminerait davantage de noyaux et jouerait sur le niveau moyen de probabilité d’allumage complet de la chambre diminuerait.  $T_0$  est donc un paramètre à fixer avec soin pour être représentatif des probabilités d’allumage mesurées expérimentalement.

L’application de ce critère supprime les zones proches du fond de chambre, où la richesse liquide est importante (voir Fig. 8.20).

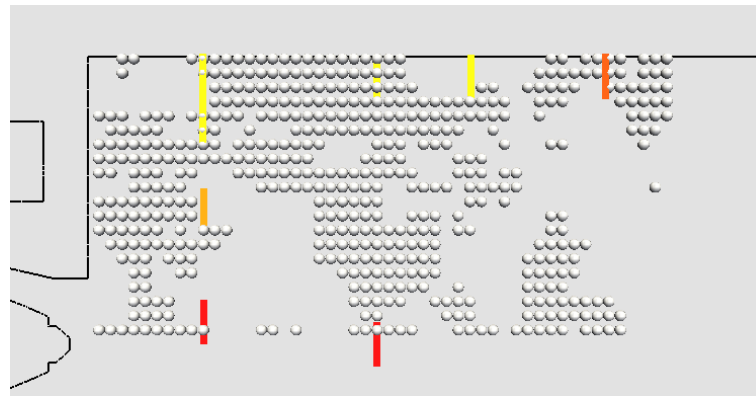


FIGURE 8.34 – Champ instantané de noyaux d'allumage satisfaisant le critère de limite d'inflammabilité et la température finale du noyau.

**Convection au sein du foyer** Le critère défini dans le paragraphe 5.4.4.2 est appliqué en comparant la vitesse moyenne de l'écoulement porteur à la somme de la vitesse fluctuante et de la vitesse de flamme calculée par le modèle d'allumage. L'application de ce troisième critère correspond au champ de la figure 8.32. Les zones éliminées correspondent à l'aval de l'impact du jet diphasique à la paroi.

### 8.4.2.3 Carte de probabilité d'allumage

A partir de tous les champs instantanés donnant pour chaque position un résultat binaire (allumage réussi, ou échec), une carte de la probabilité d'allumage est réalisée (voir Fig. 8.35). Pour chaque position, le pourcentage d'allumage réussi est calculé. Pour améliorer la lisibilité du résultat, seules les positions présentant une probabilité d'allumage  $P_{ign} > 30\%$  sont montrées. A nouveau, les traits de couleur rappellent les résultats expérimentaux de Lecourt [73].

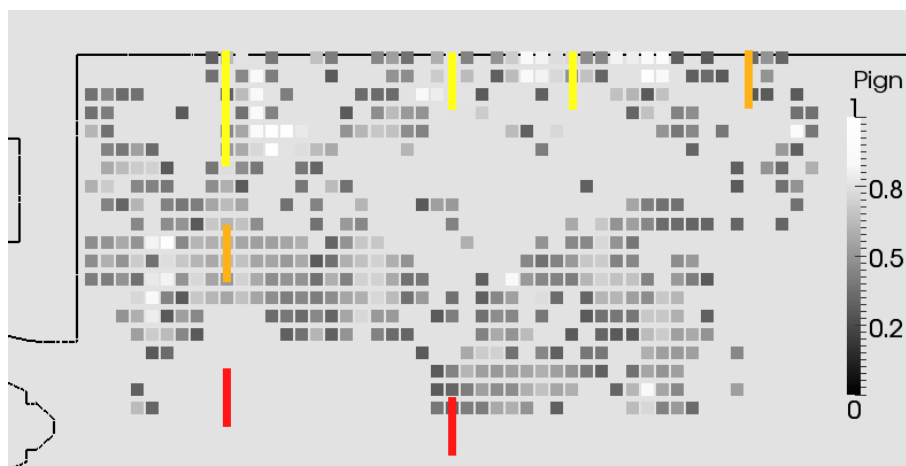


FIGURE 8.35 – Carte de probabilité d'allumage ( $P_{ign} > 30\%$ ). Comparaison aux données expérimentales de Lecourt [73] (jaune : allumage très probable, orange : allumage parfois observé, rouge : pas d'allumage).

Les résultats présentés par la figure 8.35 montrent que la zone de proche paroi, et

plus particulièrement près de la bougie à l'abscisse  $z = 26$  mm, est très propice à réussir un allumage local du mélange et à la propagation de la flamme au reste de la chambre. Cela est possible en raison de la présence de la recirculation latérale et de l'apport continu en gouttelettes. Ce résultat rejoint les résultats de Linassier [79] (voir Fig. 5.19) obtenus par approche RANS. A la différence de Linassier [79] cependant, la zone à proximité de la bougie à la position  $z = 116$  mm est également favorable à l'allumage. La bougie est située très près du point de recollement de l'écoulement, après la recirculation latérale. Cependant l'écoulement est très instationnaire, et le jet bat : il est donc possible, à certains instants, que la vitesse axiale soit négative près de la bougie  $z = 116$  mm. La cartographie de Linassier étant réalisée sur un champ moyen RANS, les effets instationnaires ne sont pas considérés. Faire une carte de probabilité à partir de champs instantanés obtenus par LES permet d'obtenir des résultats plus précis.

Le coin de la recirculation latérale, proche du fond de chambre, ne semble pas favorable à l'allumage. Les raisons de ce résultat ont été précisées en étudiant un champ instationnaire : la richesse totale, et plus particulièrement la richesse liquide, est trop importante dans cette zone. Enfin, la recirculation centrale présente peu de positions favorables à l'allumage. Cela s'explique par la faible concentration des gouttes dans cette zone. On remarque néanmoins, sur l'axe central, entre  $z = 86$  mm et  $z = 116$  mm, une zone propice à l'allumage. Comme l'illustre la figure 8.26, la structure de l'écoulement porteur est tel que cette zone contient une quantité suffisante de gouttes. L'évaporation des gouttes présentes fournit la vapeur de carburant nécessaire au développement et à la propagation de la flamme.

Les résultats obtenus sont en accord avec les observations expérimentales. La procédure mise en place permet donc d'identifier à moindre coût les zones les plus favorables à l'allumage de la chambre de combustion.

## 8.5 Conclusion

L'écoulement diphasique dans la chambre du MERCATO a été simulé par approche LES. Les grandeurs moyennes telles que les vitesses moyennes et fluctuantes, l'abscisse de fermeture de la zone de recirculation latérale, etc, ont été comparées aux mesures expérimentales et la validation est bonne. Le comportement instationnaire de l'écoulement a été retrouvé, notamment la fréquence du PVC. L'interaction des structures instationnaires avec la phase dispersée a été plus particulièrement étudiée. Le calcul des diamètres moyens  $D_{10}$  et  $D_{32}$ , effectué en divers endroits de l'écoulement, montrent que, dans la zone de cisaillement du jet, les diamètres varient périodiquement sous l'influence du PVC. Par contre, aucune fréquence caractéristique n'apparaît à proximité des bougies. L'allumage ne sera peut-être pas conditionné par le PVC dans les premiers instants, mais la propagation de la flamme le sera.

Par ailleurs, une méthode de cartographie d'allumage a été appliquée à une série de champs instantanés afin de créer une carte de probabilité d'allumage. La carte est en bon accord avec des essais d'allumage réalisés expérimentalement. Les bougies à  $z < 116$  mm sont particulièrement favorables à l'allumage. La bougie à  $z = 116$  mm est également, d'après les résultats numériques, propice à la croissance et à la convection du noyau. Les résultats de probabilité d'allumage sont à considérer avec prudence puisqu'ils ont été obtenus sur un temps physique correspondant à neuf périodes de PVC. Qui plus est, le modèle de cartographie s'appuie seulement sur l'analyse de paramètres instantanés locaux. Si l'allumage local du mélange est possible, il est difficile de juger de la propagation

de la flamme au reste de la chambre. Celle-ci sera en effet tributaire de l'écoulement instationnaire dans l'ensemble de la chambre de combustion. Enfin, les dégagements de chaleur de la flamme vont également modifier l'écoulement.

Ces remarques justifient l'intérêt et la nécessité d'étudier le processus d'allumage complet d'une chambre par une approche LES.





## Chapitre 9

# Simulation numérique instationnaire de l’allumage du MERCATO

### Sommaire

---

<b>9.1</b>	<b>Modèles physiques et numériques</b>	<b>194</b>
<b>9.2</b>	<b>Conditions initiales</b>	<b>194</b>
9.2.1	Dépôt d’énergie	194
9.2.2	Solution diphasique instantanée	194
<b>9.3</b>	<b>Allumage</b>	<b>196</b>
9.3.1	Champs de température	196
9.3.2	Champs de richesse, taux de réaction	196
9.3.3	Champs de vitesse	196
9.3.4	Diagramme richesse effective - température	199
9.3.5	Evolution de la pression et des débits	201
<b>9.4</b>	<b>Etude numérique de l’allumage</b>	<b>203</b>
9.4.1	Stratégie d’investigation	204
9.4.2	Cas 2 : Pas de temps	206
9.4.3	Cas 3 : Conditions limites de sortie	206
9.4.4	Cas 4 et 5 : Modèle de combustion	206
9.4.5	Cas 6 : Evaporation des gouttes	209
<b>9.5</b>	<b>Etude du comportement de l’allumage</b>	<b>210</b>
9.5.1	Allumage à la bougie $z = 116$ mm	211
<b>9.6</b>	<b>Conclusion</b>	<b>214</b>

---

Le chapitre 8 a décrit la mise en place et la validation l’écoulement diphasique instationnaire au sein de la chambre monosecteur montée sur le banc d’essai MERCATO. Le caractère périodique de la phase dispersée a été mis en évidence dans la zone du jet de gouttes, où la fréquence caractéristique du PVC a été retrouvée. Les bougies d’allumage ne semblent, dans les simulations numériques, pas affectées par ce résultat. Cependant, la croissance et la propagation du noyau d’allumage au sein de la chambre de combustion dépendra du reste de l’écoulement. Ce chapitre s’intéresse donc au processus de propagation de l’allumage dans la chambre du MERCATO.

## 9.1 Modèles physiques et numériques

La modélisation des phénomènes chimiques pour la combustion turbulente diphasique est délicate. Celle-ci doit être adaptée au caractère non-prémélangé que l'écoulement présente lorsque les gouttes ne sont pas évaporées. Pour ses simulations RANS de l'allumage diphasique, Ouarti [92] a utilisé le modèle de combustion CLE (Combustion Limitée par l'Equilibre). Ce modèle n'étant plus disponible dans le code CEDRE, Linassier [79] a eu recours au modèle CRAMER. Ce modèle ne prend pas en compte l'équilibre chimique et mène à la consommation complète du carburant, ou du comburant selon la richesse locale. Par conséquent, ce modèle surestime la température des gaz brûlés.

Précédemment, Dorey [39] et Eyssartier [44] ont simulé la combustion diphasique dans une chambre avec le modèle PEA de Franzelli [46], c'est à dire un modèle cinétique de type Arrhenius. Qui plus est, le front de flamme peut être plissé par la turbulence, ce qui augmente les échanges thermiques. Les effets du plissement de la flamme sont pris en compte par le modèle de flamme épaissie (voir partie 1.2.5.3) qu'Eyssartier [44] utilise. Cependant, en combustion diphasique, l'épaississement de la flamme a des effets sur la traînée et les termes sources d'évaporation des gouttes. Boileau [16] et Senoner [107] ont quantifié ces erreurs pour des flammes planes diphasiques laminares (voir partie 2.2.2.2).

Etant donné que CEDRE ne propose actuellement pas de correction sur la phase dispersée lorsque l'épaississement de la flamme est actif, la cinétique PEA de Franzelli [46] est utilisée sans modèle d'épaississement pour ce premier calcul. Le maillage a été raffiné dans la zone des bougies afin de réduire les erreurs numériques.

## 9.2 Conditions initiales

Sont présentées ici les conditions initiales du calcul instationnaire. L'allumage d'une chambre de combustion présente un caractère stochastique dépendant de plusieurs facteurs. L'un d'entre eux est la quantité d'énergie déposée. Le comportement du noyau d'allumage, sa convection et son expansion sont également tributaires de l'instant auquel l'énergie est déposée. La partie 8.3.2.2 a en effet montré qu'en certains points de l'écoulement, l'apport de carburant liquide peut être périodique. Le champ instantané servant à l'initialisation du calcul d'allumage est donc précisé.

### 9.2.1 Dépôt d'énergie

Les paramètres utilisés pour le dépôt d'énergie sont les mêmes que ceux utilisés pour l'application de la cartographie d'allumage. La figure 9.1 présente l'évolution du profil de température dans le noyau. La flamme se propage et il y a donc bien allumage. Etant donné que la valeur initiale de la température est supérieure à la température adiabatique de flamme maximale (obtenue pour une richesse gazeuse  $\Phi_{gaz} = 1$ ), la température maximale du noyau diminue au cours du temps. Afin de respecter au mieux les hypothèses 5.3.1 et 5.3.2 concernant la sphéricité du noyau et son immobilité durant les premiers instants, le noyau intégré dans le calcul 3D est celui obtenu à l'instant  $t = 0.2 \text{ ms}$ .

### 9.2.2 Solution diphasique instantanée

La présence du vortex de précession peut agir de deux façons sur l'allumage. D'une part, la densité de gouttes en un point peut dépendre de la phase du PVC. D'autre part,

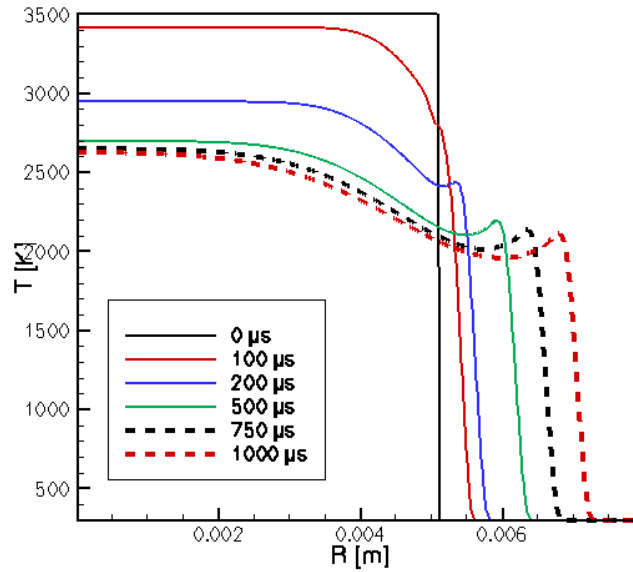


FIGURE 9.1 – Evolution temporelle du profil de température dans le noyau.

cette instabilité hydrodynamique peut agir sur la convection du noyau d'allumage ainsi que sur la propagation de la flamme. La figure 9.2 présente l'allure du PVC à l'instant  $t_0$  où l'énergie de la bougie est déposée.

Les conditions locales dans la zone de la bougie sont précisées dans le tableau 9.1.

$\Phi_0$	0,97
$d_{10}$	16,48 mm
$d_{32}$	24,35 mm

TABLE 9.1 – Conditions initiales à proximité de la bougie

FIGURE 9.2 – Isocontour de pression  $P = 103\,000$  Pa matérialisant l'instabilité PVC, à l'instant  $t_0$ . Bougies à  $z = 56$  mm et  $z = 116$  mm.

## 9.3 Allumage

Cette partie présente les résultats d'une première simulation de l'allumage complet de la chambre.

### 9.3.1 Champs de température

La propagation de la flamme dans la chambre de combustion est présentée sur la figure 9.3. La flamme est matérialisée par une iso-surface de température  $T_g = 1500$  K, colorée par le taux de réaction du carburant. Le noyau est tout d'abord déformé par la turbulence et s'écrase vers la paroi, où la couche limite présente une faible vitesse axiale. La propagation se fait ensuite sur deux fronts : d'un côté, la flamme se propage près de la paroi dans la couche limite. De l'autre côté, la flamme suit le sens de giration de l'écoulement. Elle se rapproche alors de l'axe de la chambre. Après 5 ms, le front de flamme a presque atteint le fond de chambre, où se trouvent les gouttes piégées dans la recirculation latérale. Elle remonte alors vers les lèvres de l'injecteur. La partie de la flamme en aval de l'écoulement se développe également et allume le reste de la chambre. Enfin, au-delà de 10 ms, le front de flamme remonte dans l'injecteur et est alimée par la vapeur de carburant qui remonte également.

Dans l'expérience réelle, aucun retournement de l'écoulement n'est observé. Par ailleurs, le processus d'allumage simulé est significativement plus rapide que dans l'expérience une dizaine de millisecondes contre 40 à 60 ms dans le cas expérimental (Fig. 7.5). La suite des observations essaie de mettre en avant les causes possibles de ce comportement.

### 9.3.2 Champs de richesse, taux de réaction

Les figures 9.4, 9.5 et 9.6 présentent les champs de température, richesse effective et concentration volumique à divers instants. On remarque qu'au début, là où la température est la plus élevée, la richesse effective est aussi élevée (aux alentours de  $\Phi_{eff} = 5$ ). Lorsque la flamme se propage dans toute la chambre, très peu de gouttes sont encore disponibles dans le coeur de la chambre. Seuls le fond de chambre et le plan d'injection ont encore une quantité significative de gouttes. En accord avec les observations expérimentales, l'allure du spray est modifiée par l'allumage de la chambre. D'autre par, le niveau moyen de richesse effective semble constant : le processus d'évaporation n'a pas l'air de s'emballer. Néanmoins, au moment où la flamme remonte dans l'injecteur, la richesse effective maximale est atteinte dans le diffuseur. L'évaporation à proximité du plan d'injection pourrait donc être surestimée.

### 9.3.3 Champs de vitesse

La figure 9.7 présente l'évolution temporelle du champ de vitesse axiale du gaz. Les gaz s'écoulant en aval sont plutôt jaunes et les gaz recirculant sont en vert et bleu. A  $t = t_0 + 10$  ms, la zone de recirculation centrale a quasiment disparu. Les gaz sont alors tous mis en mouvement vers l'aval de la chambre, expliquant ainsi les forts débits observés à l'interface de la chambre et de la trompe. Enfin, à  $t = t_0 + 15$  ms, la zone de gaz ayant une vitesse axiale positive s'est agrandie et se rapproche de l'injecteur. En même temps, l'écoulement dans l'injecteur s'est inversé.

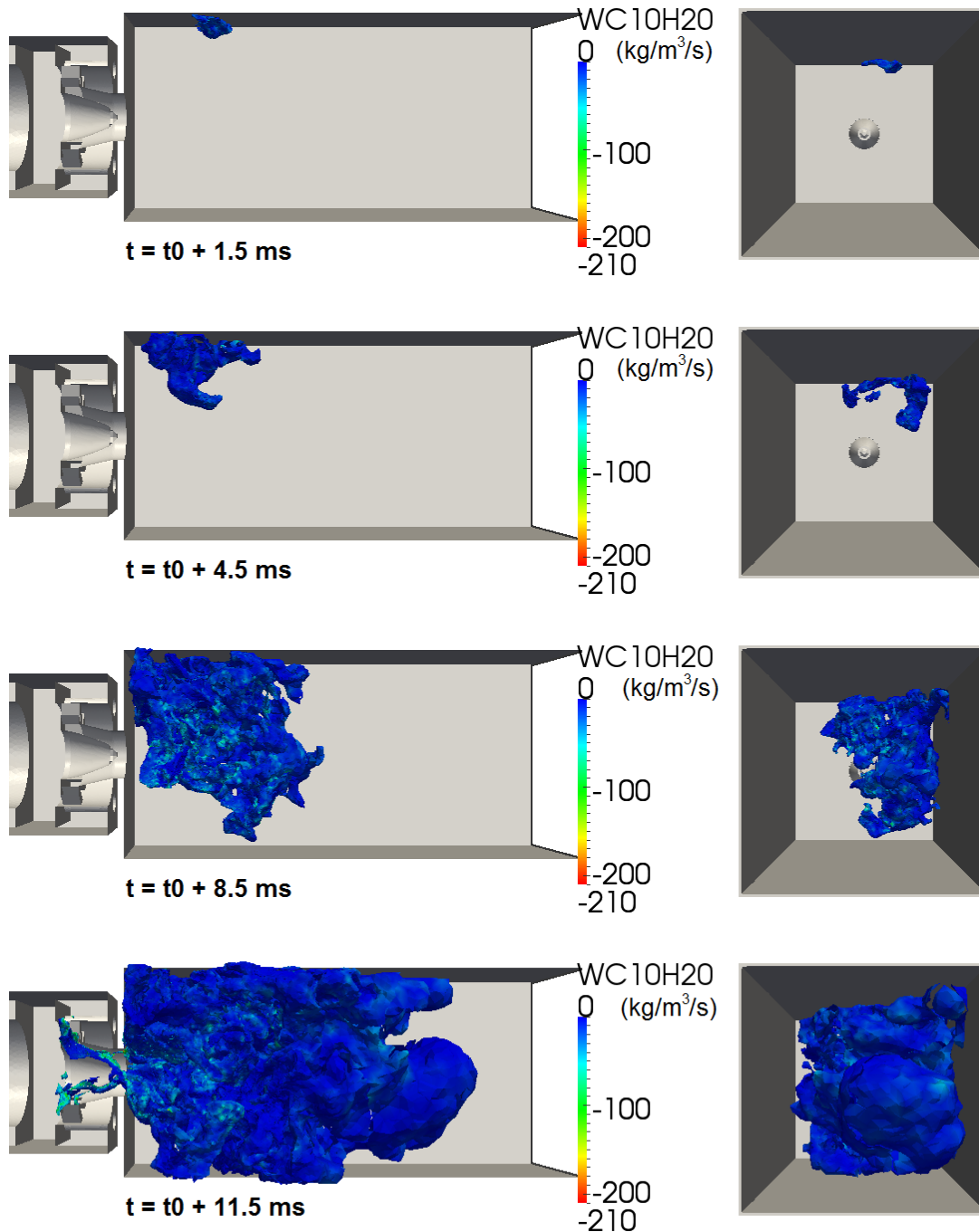


FIGURE 9.3 – Evolution temporelle de la flamme, matérialisée par une iso-surface  $T = 1500 \text{ K}$ , colorée par le taux de réaction du carburant.

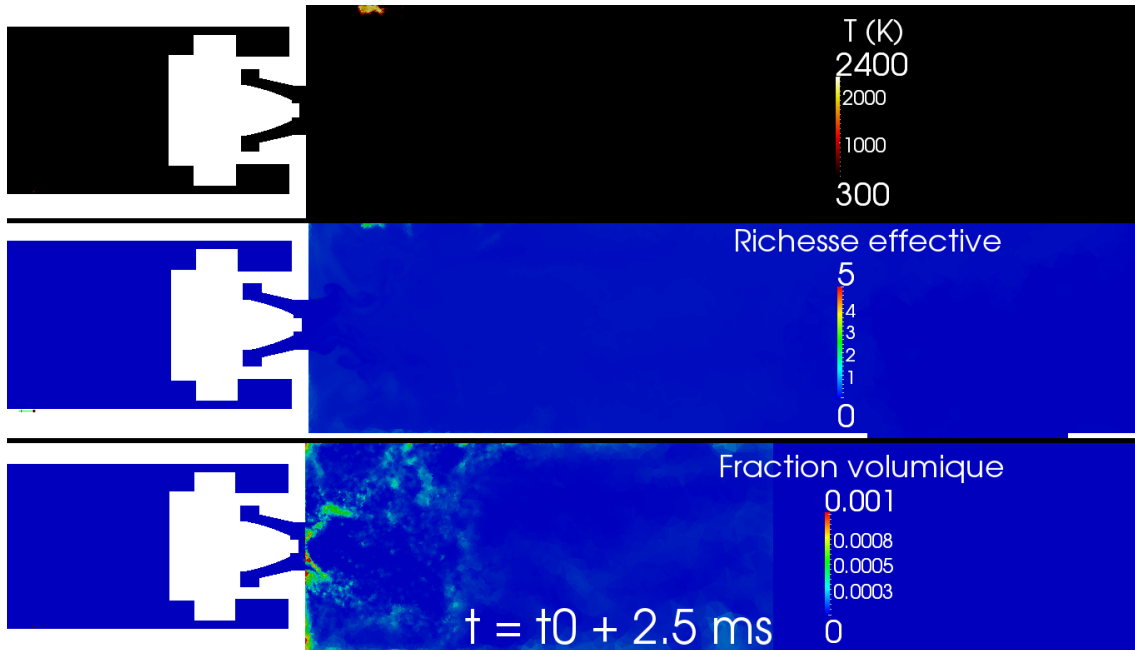


FIGURE 9.4 – Champs instantanés ( $t = t_0 + 2,5$  ms) de température, richesse effective et concentration volumique des gouttes.

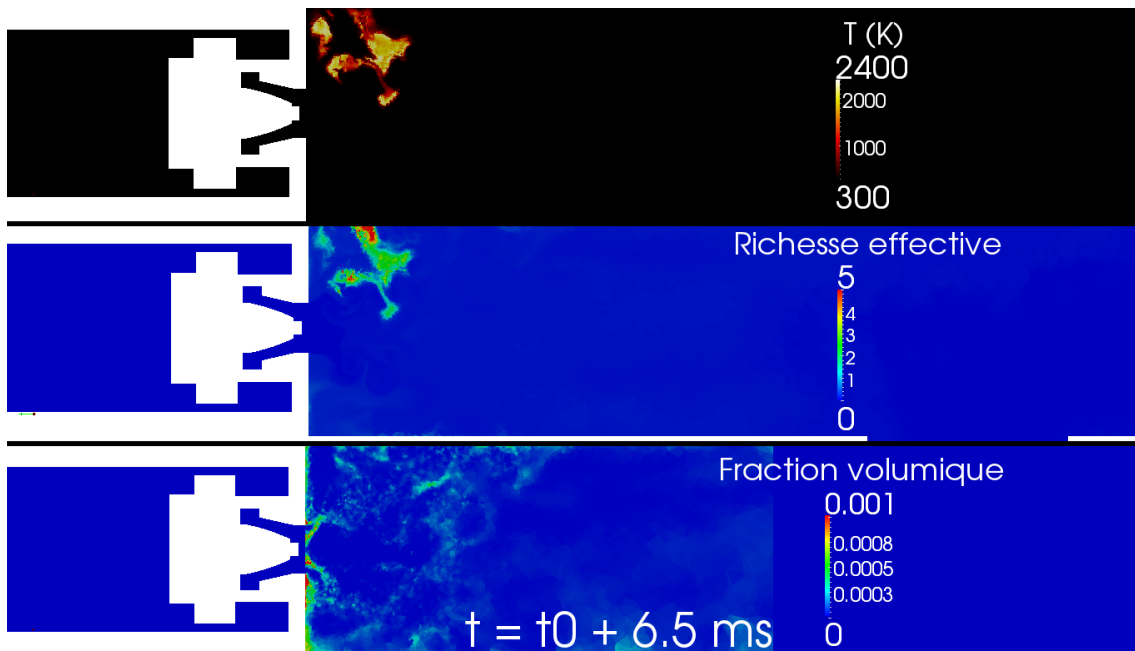


FIGURE 9.5 – Champs instantanés ( $t = t_0 + 6,5$  ms) de température, richesse effective et concentration volumique des gouttes.

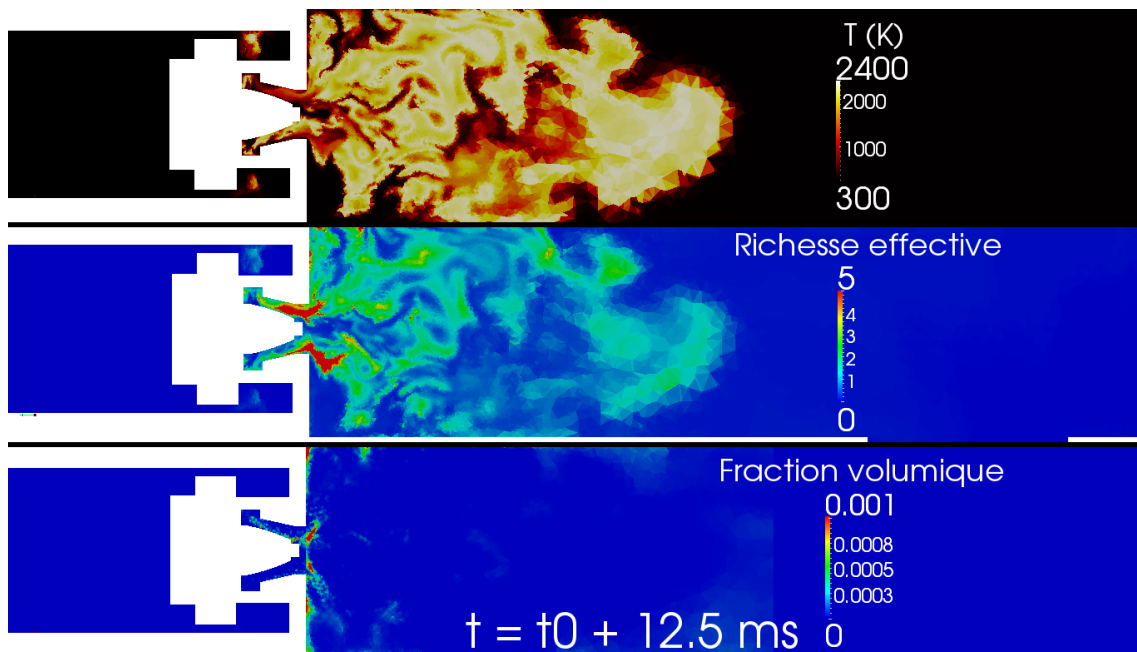


FIGURE 9.6 – Champs instantanés ( $t = t_0 + 12,5$  ms) de température, richesse effective et concentration volumique des gouttes.

### 9.3.4 Diagramme richesse effective - température

Le nuage de points sur la figure 9.8 présente la température dans la chambre en fonction de la richesse effective pour différents instants. Au delà de  $t = t_0 + 6,5$  ms, le diagramme n'évolue quasiment plus. Les valeurs sont encadrées en rouge par la courbe de saturation définie par la loi de Clausius-Clapeyron (voir Eq. (3.18)), et en vert par la ligne d'équilibre pour une cinétique chimique infiniment rapide et irréversible (voir paragraphe 6.3). Cette analyse de la combustion diphasique est suggérée par Réveillon et Vervisch [99]. Ils précisent que le diagramme obtenu en combustion diphasique établie est différent du diagramme pour une flamme de diffusion purement gazeuse.

Initialement, le spray est non-réactif et se situe dans la zone de basse température et basse richesse effective. A proximité de la flamme, le brouillard de gouttes commence à s'évaporer et la richesse effective augmente. L'évolution du nuage de points durant l'allumage montre que, dans les premiers instants, la température est largement surévaluée pour les richesses effectives supérieures à 1, par rapport aux courbes de l'équilibre chimique. Cela peut s'expliquer par l'emballement des réactions chimiques au début de l'allumage. La présence des gaz chauds permet ensuite d'évaporer les gouttes restantes. Cela a pour effet de refroidir le mélange et d'augmenter sa richesse effective. On retrouve alors de très fortes richesses, allant même au delà de  $\Phi_{eff} = 6$  dans les gaz brûlés.

Ces diagrammes de température en fonction de la richesse effective sont différents de ceux de la littérature : généralement, une majorité de points se concentre sur une plage de richesse effective allant de 0 à 2 environ et les températures de ces points sont très proches des courbes limites. Les résultats des diagrammes 9.8 mettent particulièrement en évidence le caractère instationnaire de l'allumage : la présence de points à température et à richesse moyennes (c'est-à-dire non-concentrés près des courbes d'équilibre) montre que les dynamiques d'évaporation des gouttes et de la combustion ne sont pas encore établies.

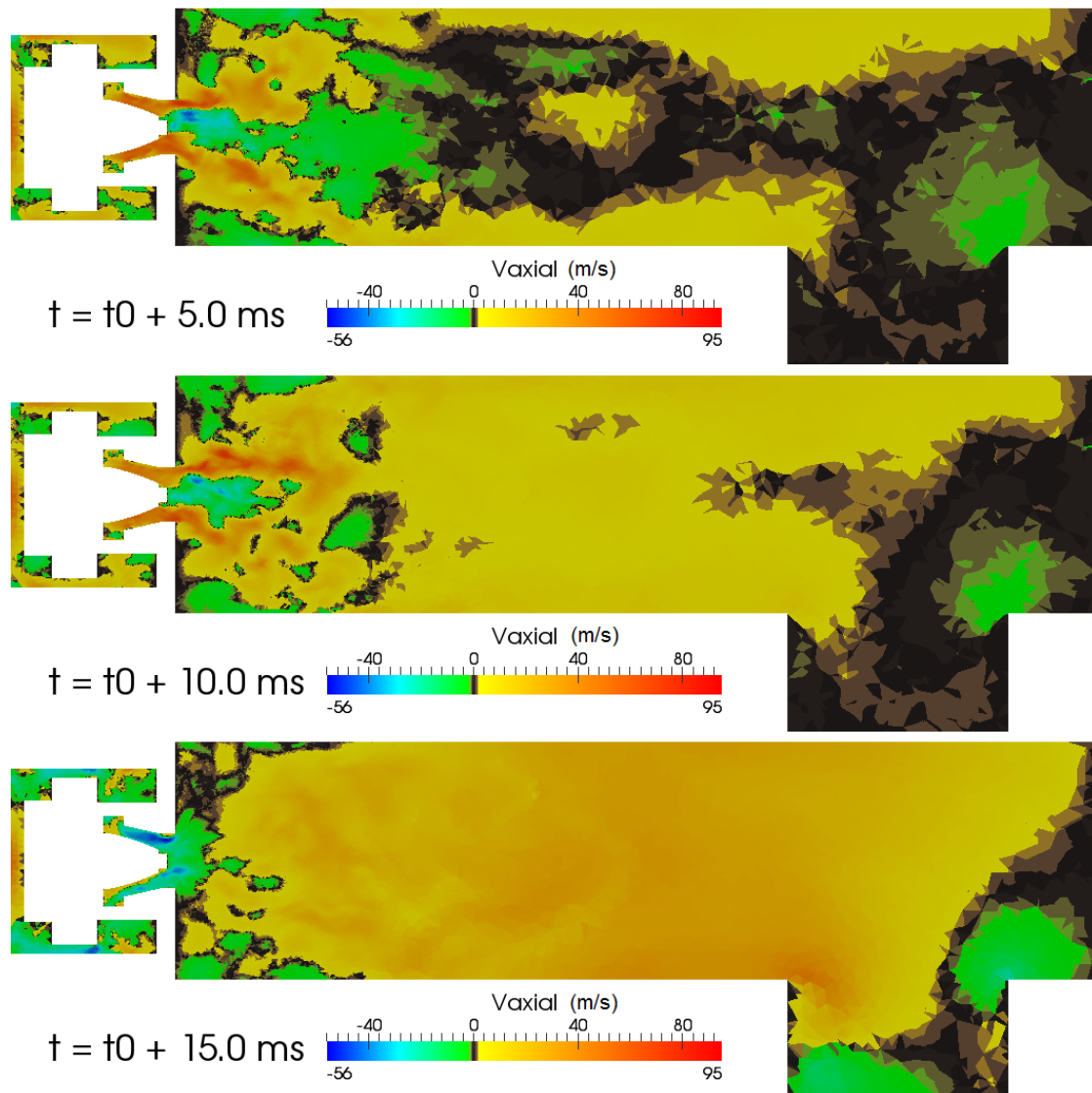


FIGURE 9.7 – Champs de vitesse axiale du gaz.



A  $t = t_0 + 0,5$  ms, la présence de points au dessus de la courbe d'équilibre montre que la combustion augmente la température des gaz, ce qui évapore les gouttes à proximité. Localement, la richesse effective augmente donc. La grande quantité de points à richesse élevée ( $\Phi > 3$ ) souligne l'importante quantité de carburant présent lors de cette phase transitoire.

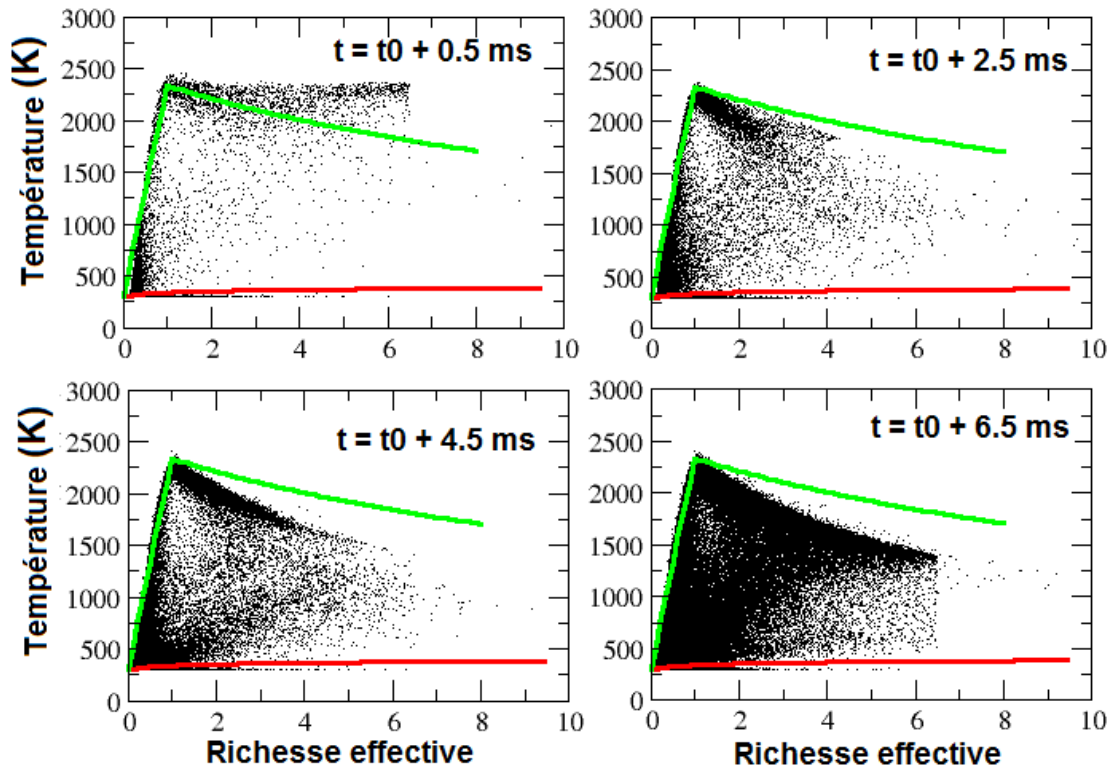


FIGURE 9.8 – Diagrammes de répartition de la température locale en fonction de la richesse effective locale, à divers instants. Ligne rouge : courbe de saturation, Ligne verte : courbe d'équilibre.

La figure 9.9 montre l'évolution temporelle du taux de réaction du carburant local en fonction de la richesse effective locale. La combustion se déroule pour des richesses effectives proches de la stœchiométrie et les très fortes richesses effectives ne réagissent quasiment pas. Ainsi, cela confirme que dans le diagramme 9.8, les points à température assez élevée peuvent présenter une importante richesse effective du fait de l'évaporation des gouttes environnantes.

### 9.3.5 Evolution de la pression et des débits

**Pression moyenne** A la fin de l'allumage, l'écoulement s'inverse et la flamme remonte dans l'injecteur. Cela se produit en raison de l'évolution de la pression dans les différentes parties de la chambre. Dans le plenum comme dans la chambre, la pression maximale passe d'environ  $P = 111\,000$  Pa lors du dépôt d'énergie, à  $P = 145\,000$  Pa. La montée en pression est donc de  $40\,000$  Pa en  $10$  ms alors que dans l'expérience (Fig. 7.7) la pression augmente en un point de  $8000$  Pa en  $50$  ms. La figure 9.10 présente l'évolution temporelle de la pression moyenne au cours du calcul. Les évolutions de la pression moyenne et de la

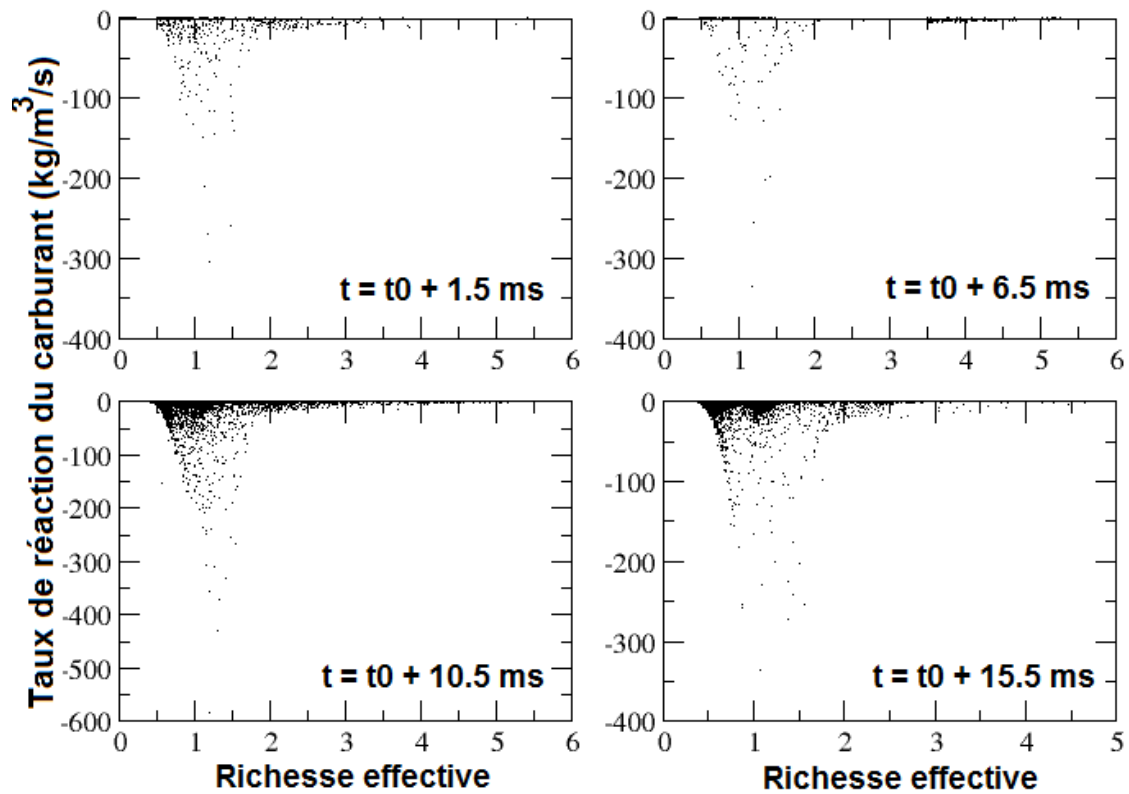


FIGURE 9.9 – Diagrammes de répartition du taux de réaction du  $C_{10}H_{20}$  en fonction de la richesse effective locale, à divers instants.

pression maximale étant similaires, elles seront indistinctement montrées par la suite. Si la pression moyenne reste à peu près constante jusqu'à  $t = t_0 + 7.0 \text{ ms}$ , elle croît ensuite exponentiellement.

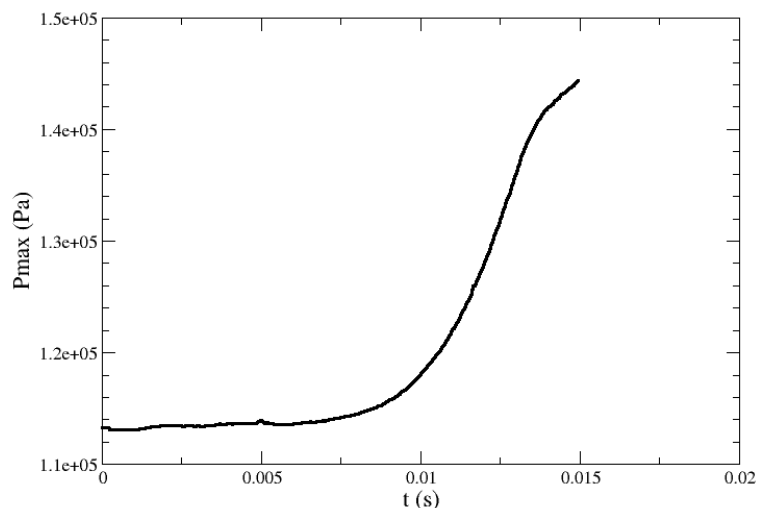


FIGURE 9.10 – Evolution temporelle de la pression moyenne dans la chambre de combustion

L'analyse de la figure 9.3 montre qu'à  $t = t_0 + 7 \text{ ms}$ , la flamme est développée dans quasiment un quart de la section (vue depuis le fond de la chambre). Elle a atteint le fond de la chambre où se trouvent de nombreuses gouttes. Cela laisse à penser qu'à ce stade, les gouttes en fond de chambre s'évaporent trop vite et trop vite.

**Débits** La figure 9.11 présente l'évolution temporelle des débits à travers les plans suivants : interface entre le plenum et la chambre (c'est à dire en sortie de diffuseur), interface entre la chambre de combustion et la trompe (interface où sortent les gouttes), et enfin en sortie de la trompe.

Le débit à l'interface plenum-chambre montre clairement l'inversion du sens de l'écoulement à partir de  $t = t_0 + 9 \text{ ms}$ . On s'attache ensuite à comparer les débits entre l'interface chambre-trompe et la sortie de la trompe afin de voir de quelle façon sont évacués les gaz brûlés. A l'interface chambre-trompe, le débit massique passe de  $\dot{m} = 35 \text{ g/s}$  à plus de  $600 \text{ g/s}$ , avant de diminuer. A la sortie, le débit massique initialement de  $35 \text{ g/s}$  double, montrant que l'équilibre entre les débits n'est pas atteint au moment où la flamme remonte dans l'injecteur. L'accumulation des gaz brûlés dans la chambre conclut à l'augmentation de pression. Cette accumulation est liée à la présence importante de gouttes piégées dans les recirculations et dont l'évaporation favorise la réaction d'oxydation. Ces observations montrent qu'il est possible que la condition de sortie ne permette pas d'évacuer suffisamment vite les gaz brûlés. Il faut néanmoins préciser que l'analyse de ces données ne permet pas distinguer clairement les causes et les conséquences menant à l'inversion de l'écoulement.

## 9.4 Etude numérique de l'allumage

Cette première simulation de l'allumage donne des résultats non satisfaisants : la flamme s'établit trop vite en comparaison avec les observations expérimentales, les gaz

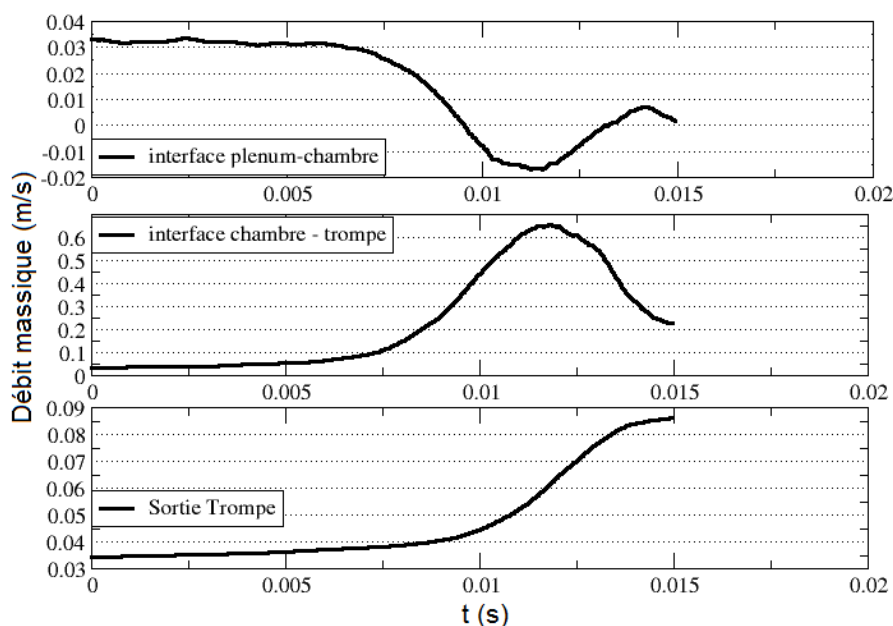


FIGURE 9.11 – Evolution temporelle des débits

brûlés ne sont pas suffisamment vite évacués et la pression augmente jusqu'à l'inversion de l'écoulement et la remontée de la flamme dans les vrilles du système d'injection.

Cette partie a pour but d'identifier les causes possibles de l'échec de la simulation numérique de l'allumage.

### 9.4.1 Stratégie d'investigation

Etant donné les observations faites sur les champs et les capteurs lors de la première simulation numérique, plusieurs causes potentielles sont identifiées. La figure 9.12 résume chacun des cas qui sera étudié.

## Causes potentielles du retour de flamme et cas-test effectués

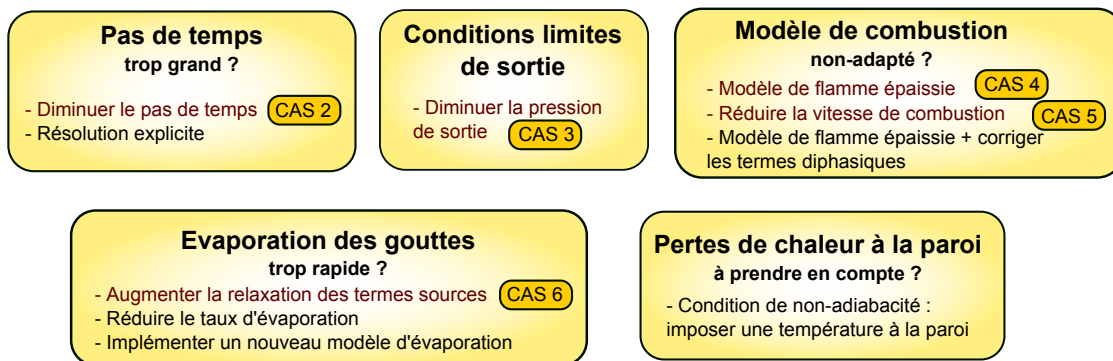


FIGURE 9.12 – Stratégie numérique pour l'allumage

Tout d'abord précisons les causes possibles d'échec de l'allumage :

1. **Les échelles temporelles ne sont pas respectées** : la question qui se pose est de savoir si tous les phénomènes sont correctement décrits. On pourra notamment penser à l'acoustique, qui pourrait interagir avec la flamme, ou à la combustion qui peut induire des temps extrêmement raides en fonction de l'écoulement. Pour vérifier la convergence en temps, le pas de temps est réduit à  $\Delta t = 5 \cdot 10^{-7}$  s (**CAS 2**).
2. **La condition limite de sortie ne permet pas d'évacuer les gaz** : la condition limite à la sortie de la trompe est de type non-réfléchissante, à pression imposée. Le débit massique de sortie n'augmentant pas suffisamment vite, on essaie de forcer l'échappement des gaz brûlés en abaissant la pression de sortie de  $P = 101325$  Pa à  $P = 85000$  Pa (**CAS 3**). Une modification de la géométrie serait également un test envisageable afin d'augmenter la section de sortie. Cela n'a pas été fait car, d'une part, les modifications nécessaires étaient plus lourdes et, d'autre part, on perd la géométrie réelle de la configuration.
3. **Le modèle de combustion n'est pas adapté** : l'étude paramétrique d'une flamme plane diphasique, dans le chapitre 3, a montré que l'utilisation d'une cinétique simplifiée pouvait surestimer la vitesse de flamme dans le cas laminaire. A cela s'ajoute la difficulté de prendre en compte l'interaction entre la flamme et la turbulence, ce qui est d'autant plus compliqué dans le cas de la combustion diphasique. Deux cas tests sont donc simulés. Le **CAS 4** utilisera un modèle de flamme épaissie dynamique. Les termes de traînée et d'évaporation des gouttes n'étant pas corrigés, il est possible, d'après Boileau [16] et Senoner [107] que la vitesse de flamme soit alors surestimée (voir partie 2.2.2.2), ce qui accélérerait encore la dynamique de l'allumage. Un second calcul est effectué (**CAS 5**), sans le modèle de flamme épaissie, dans lequel la constante préexponentielle  $A_1$  de la réaction du  $C_{10}H_{20}$  est divisée par deux. Ce test a pour vocation d'examiner le comportement de l'allumage si la vitesse de flamme diminue.
4. **L'évaporation des gouttes est trop rapide** : pour une richesse totale donnée, la présence de goutte peut, selon leur diamètre, augmenter ou diminuer la vitesse de flamme par rapport au cas monophasique. Le calcul de la dynamique d'évaporation est donc un point clé. Or, celle-ci peut être mal évaluée pour plusieurs raisons. En effet, les observations expérimentales montrent qu'un film ruisselle sur les parois. La simulation numérique de l'écoulement diphasique a été réalisée sans le solveur FILM de CEDRE (alors en développement). Une majorité de gouttes rebondit en longeant la paroi : il y a donc une forte concentration de gouttes plutôt qu'une nappe de carburant. Hors la dynamique d'évaporation de gouttes est plus rapide que celle d'un film ruisselant. Il est donc possible que le changement de phase liquide-vapeur ait été surévalué. Par ailleurs, Réveillon et Vervisch [99] ont rappelé les différents régimes de combustion diphasique : les gouttes peuvent brûler seules, ou en groupe. Le modèle d'évaporation implémenté dans le solveur SPARTE est un modèle d'évaporation d'une goutte isolée. Il est donc possible que l'évaporation soit surestimée. Implémenter un nouveau modèle d'évaporation, adapté à la combustion diphasique, pourrait s'avérer nécessaire. Le **CAS 6** est donc simulé : le coefficient de relaxation du solveur SPARTE (voir la partie 1.4.4) est diminué de 0.5 à 0.01. A noter qu'il aurait également été possible de réduire artificiellement le taux d'évaporation des gouttes afin de voir l'impact sur l'allumage.
5. **Les pertes de chaleur à la paroi doivent être prises en compte** : la combustion

dégage de la chaleur, et la température des parois de la chambre augmente. Une condition aux limites de type paroi adiabatique ne permet pas d'évacuer une partie de l'énergie dégagée par la combustion. Cette énergie reste, et entretient la combustion. Cette piste n'a pas été prise en compte.

### 9.4.2 Cas 2 : Pas de temps

Le pas de temps est divisé par deux et vaut  $\Delta t = 5.10^{-7}$  s. Le développement du noyau et la propagation de la flamme obtenus sont très proches de ce qui a été présenté dans la partie 9.3. L'évolution temporelle de la pression maximale dans la chambre, présentée par la figure 9.13, est quasi-similaire. A partir de  $t = t_0 + 7$  ms, la pression maximale augmente de façon exponentielle. L'évolution présentant néanmoins un léger retard, le même pas de temps  $\Delta t = 5.10^{-7}$  s sera utilisé pour les cas 3 à 6.

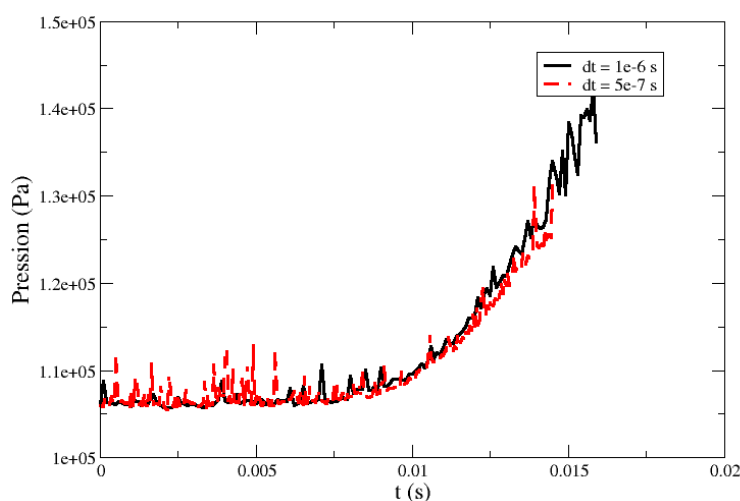


FIGURE 9.13 – Evolution de la pression maximale dans la chambre de combustion

A noter que quelques tests ont été réalisés afin de juger de la faisabilité de la simulation numérique avec une intégration explicite. Le pas de temps nécessaire est cependant très bas :  $\Delta t = 3 \cdot 10^{-8}$  s, aussi les calculs n'ont-ils pas été poursuivis.

### 9.4.3 Cas 3 : Conditions limites de sortie

Afin d'augmenter le débit massique à la sortie de la trompe, la pression de sortie est diminuée à  $P = 85\,000$  Pa. Les évolutions temporelles des débits et de la pression moyenne ne sont quasiment pas affectées par le changement de condition aux limites.

Si l'évacuation des gaz brûlés pose réellement problème, une modification de la géométrie de la trompe pourrait être essayée. On pourrait par exemple *couper* la partie convergente, ce qui augmenterait la section de sortie.

### 9.4.4 Cas 4 et 5 : Modèle de combustion

**Cas 4 : Modèle de flamme épaissie** Au modèle de cinétique chimique PEA, on ajoute le modèle de flamme épaissie dynamique. Cela augmente l'épaisseur du front de flamme, afin de modéliser le plissement de la flamme par la turbulence. Malheureusement, le modèle

est discutable en combustion diphasique (voir partie 1.2.5.3). Le modèle est activé à partir de  $t = t_0 + 3$  ms, une fois que le noyau a atteint une taille suffisante et qu'il s'est éloigné de la paroi afin d'éviter tout chevauchement dû à l'épaississement.

L'activation du modèle de flamme épaissie n'a pas d'influence sur la remontée de l'écoulement. La figure 9.14 présente l'évolution temporelle de la flamme, matérialisée par une iso-surface de température  $T_g = 1500$  K et colorée par la richesse effective. La flamme se développe dans le même coin de la chambre que le cas 1. Néanmoins, son développement a l'air d'être moins affecté par le caractère giratoire de l'écoulement environnant. Utiliser un modèle de flamme épaissie modifie l'interaction avec l'écoulement porteur.

La figure 9.15 montre les champs de température, taux de réaction du carburant, et épaississement  $F$  de la flamme à l'instant  $t = t_0 + 10$  ms. L'écoulement s'est alors déjà inversé. Si l'épaississement est faible en sortie de diffuseur où le maillage est fin, il atteint jusqu'à  $F = 30$  plus loin dans la chambre. On notera également que le champ de température est beaucoup plus lissé, comparé au calcul sans épaississement.

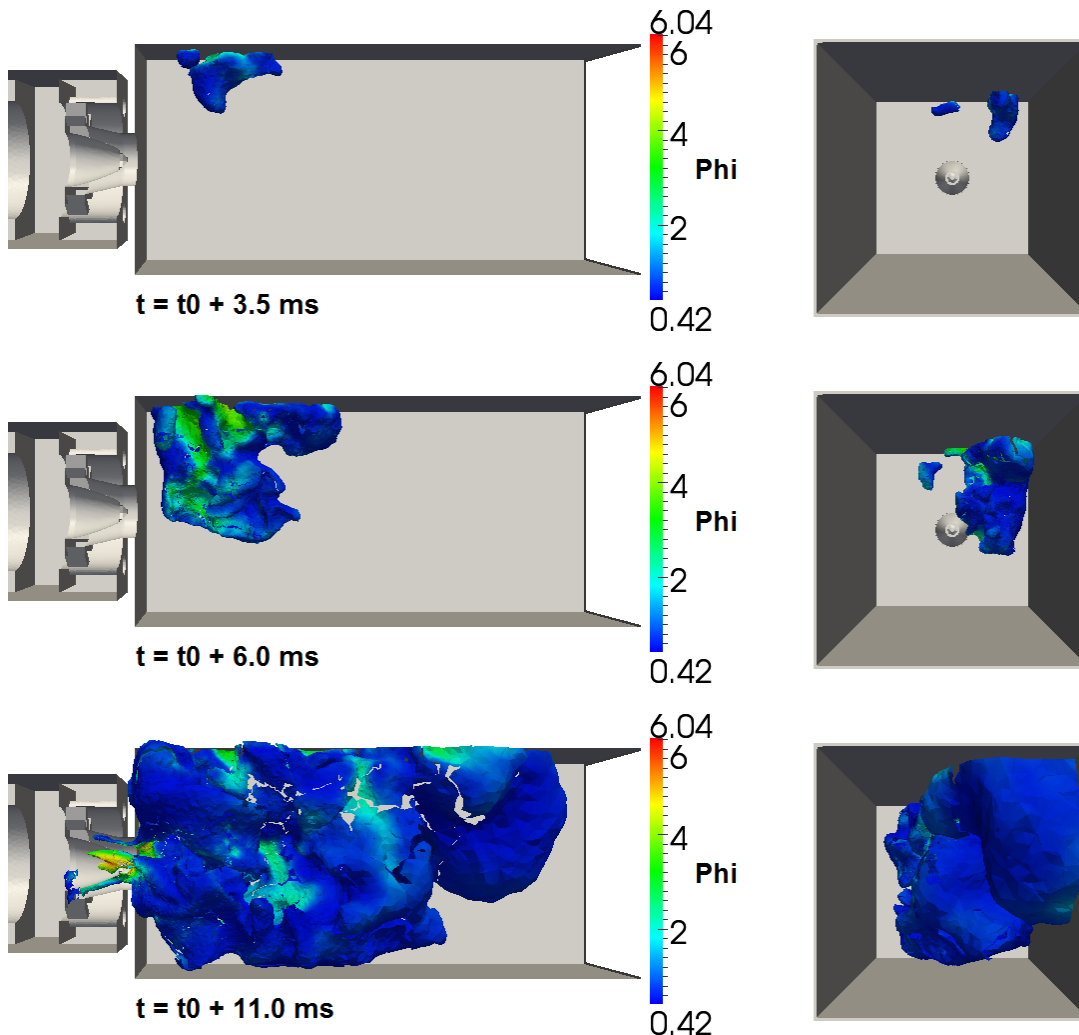


FIGURE 9.14 – Evolution temporelle de la flamme, matérialisée par une iso-surface  $T = 1500$  K, colorée par la richesse effective.

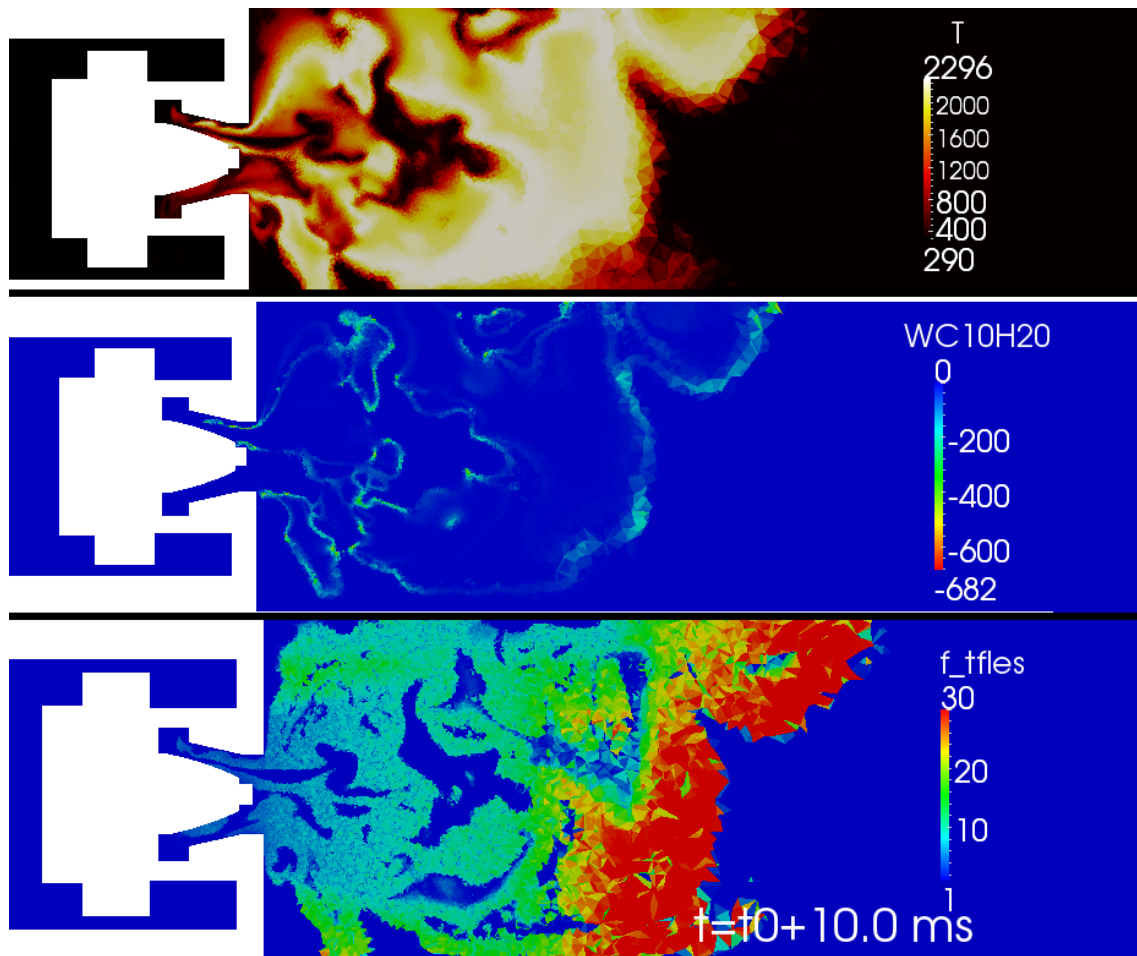


FIGURE 9.15 – Champs de température, taux de réaction du carburant, épaissement de la flamme



**Cas 5 : Réduction de la vitesse de flamme** Le modèle de flamme épaissie ne résout pas le problème de montée en pression et d'inversement de l'écoulement. Son utilisation pour un écoulement diphasique, sans correction ni sur la traînée, ni sur le terme d'évaporation, en est peut-être la cause. La combustion diphasique dépend de l'évaporation des gouttes, et des réactions chimiques. Une simulation est donc faite en divisant par 2 la constante préexponentielle de la réaction de la vapeur de carburant. La vitesse de flamme va donc diminuer. Ce calcul est réalisé à titre de test afin de voir l'influence de la chimie sur le déroulement de l'allumage.

La figure 9.16 compare l'évolution de la pression maximale dans la chambre. Bien que la montée en pression soit plus lente, celle-ci augmente toujours trop vite par rapport aux observations expérimentales. Cependant, la cinétique chimique a une influence beaucoup plus importante sur le développement de la flamme dans la chambre que les autres paramètres, et constitue donc une voie d'exploration afin de simuler correctement l'allumage.

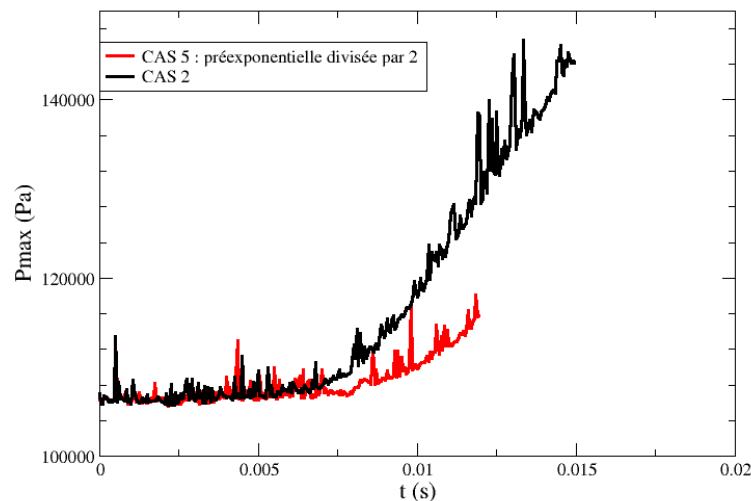


FIGURE 9.16 – Evolution de la pression maximale dans la chambre.

#### 9.4.5 Cas 6 : Evaporation des gouttes

Les résultats précédents montrent que la cinétique permet de réduire l'emballement de l'allumage, mais ne l'évite pas. On s'intéresse alors à l'autre phénomène régissant la combustion diphasique : l'évaporation des gouttes. La dynamique d'évaporation des gouttes peut être mal représentée dans notre écoulement de deux manières :

- le modèle d'évaporation pour goutte isolée ne prend pas en compte la combustion de groupe de gouttelettes,
- au lieu d'avoir du film ruisselant à la paroi, des gouttes sont présentes. Le taux d'évaporation est donc surévalué.

Comme la première hypothèse nécessite l'implémentation d'un nouveau modèle d'évaporation, seule la seconde est étudiée ici. Cela peut se faire de deux façons :

- en réduisant le coefficient de relaxation de l'évaporation ;
- en divisant le taux d'évaporation.

Diviser le taux d'évaporation serait un test au même titre que celui qui a été fait pour la cinétique. La réduction du coefficient de relaxation, défini dans la partie 8.1.3, a pour effet de coupler les termes sources de la phase dispersée vers la phase continue de manière moins brutale, mais ne réduit pas la quantité de vapeur produite. Etant données les conditions fortement instationnaires et les hautes températures rencontrées par les gouttes, l'effet escompté est la diminution de l'évaporation là où il y a une forte concentration de gouttes.

La figure 9.17 présente la pression maximale dans la chambre, et montre que la modification apportée a bien peu d'effet.

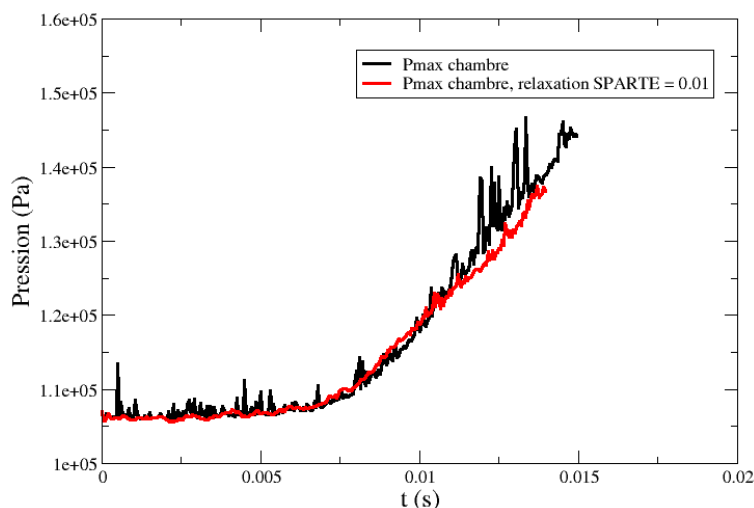


FIGURE 9.17 – Evolution de la pression maximale dans la chambre de combustion

Les termes sources de la phase dispersée, lorsque la relaxation SPARTE est modifiée, sont comparés aux résultats du cas 2 sur la figure 9.18. Bien que la flamme ne soit pas exactement similaire, son développement et sa propagation ne sont globalement pas affectés. Par ailleurs, l'ordre de grandeur du taux d'évaporation reste inchangé.

Modifier le coefficient de relaxation du solveur SPARTE ne suffit pas à réduire les délais ni de l'évaporation des gouttes, ni de l'allumage. Ce paramètre numérique n'est pas efficace. Un test intéressant consisterait alors à diviser le terme source d'évaporation par 2 ou par 3. Il serait alors possible de voir si la modélisation de l'évaporation des gouttes est la seule raison menant à un allumage trop rapide et, à défaut, d'autres phénomènes physiques déterminants pourraient être mis en lumière.

## 9.5 Etude du comportement de l'allumage

La partie 8.3.2 a montré que la quantité de masse liquide, ainsi que la taille des gouttes, peuvent être localement périodiques. Une nouvelle simulation est réalisée afin d'observer les changements dans le processus d'allumage lorsque le dépôt d'énergie est effectué par une autre bougie. Le calcul est initialisé au même instant que le cas présenté en partie 9.4, mais avec la bougie située à  $z = 116$  mm.

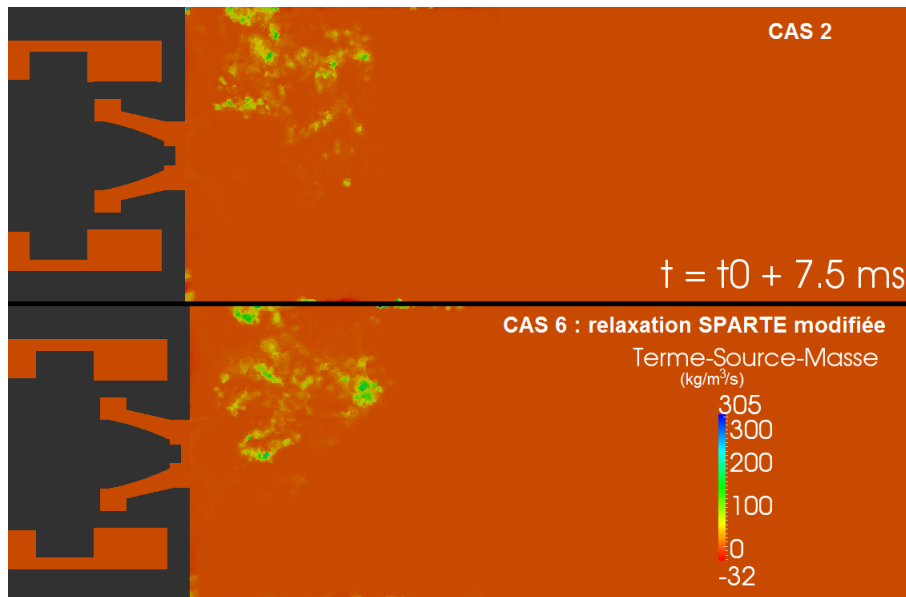


FIGURE 9.18 – Champs de terme source de masse de la phase dispersée, effet de la modification de la relaxation SPARTE.

### 9.5.1 Allumage à la bougie $z = 116$ mm

Un allumage est réalisé à partir de la bougie située à l'abscisse  $z = 116$  mm. Les conditions initiales sont celles décrites par la partie 9.2, et les modèles utilisés sont ceux de la partie 9.1. Le pas de temps est  $\Delta t = 5 \cdot 10^{-7}$  s. Les observations expérimentales ont montré que l'allumage complet de la chambre est difficile à réaliser à partir de cette bougie. La vitesse axiale de l'écoulement porteur a en effet tendance à convecter la flamme vers l'aval, et celle-ci se fait souffler.

Les résultats présentés sur la figure 9.19 montrent l'évolution temporelle du champ de température et de la flamme, matérialisée par une iso-surface  $T = 1500$  K et colorée par la richesse effective. Dès les premiers instants le noyau est convecté vers l'aval. La flamme se développe alors dans cette direction, tout en suivant la giration de l'écoulement. La partie amont de la flamme se développe plus lentement et arrive finalement à remonter l'écoulement. La figure 9.20 présente les champs de vitesse axiale à deux instants. A l'instant  $t = t_0 + 15,5$  ms, la flamme produit un fort déplacement des gaz vers l'aval mais l'écoulement sortant du diffuseur semble n'être que très peu affectée par le développement de la flamme.

Bien que le maillage soit peu raffiné à cet endroit de la chambre, cette simulation nous permet d'observer la remontée de la flamme vers l'injecteur, alors que l'écoulement est tel que l'on aurait pu s'attendre à un soufflage. Si ce processus est intéressant à observer, les résultats doivent être considérés en regard des problèmes numériques constatés. En effet, bien que le développement de la flamme soit moins rapide, la croissance de la pression maximale dans la chambre de combustion est à nouveau trop rapide comparée aux observations expérimentales (voir Fig. 9.21), et le débit en sortie n'augmente pas autant que le débit à l'interface chambre-trompe (voir Fig. 9.22).

Enfin, la dynamique de la flamme est trop rapide sans même que celle-ci atteigne le fond amont de chambre, où sont présentes de nombreuses gouttes. Ainsi, si l'on peut supposer, à partir des simulations réalisées pour la bougie à  $z = 56$  mm, que les modèles

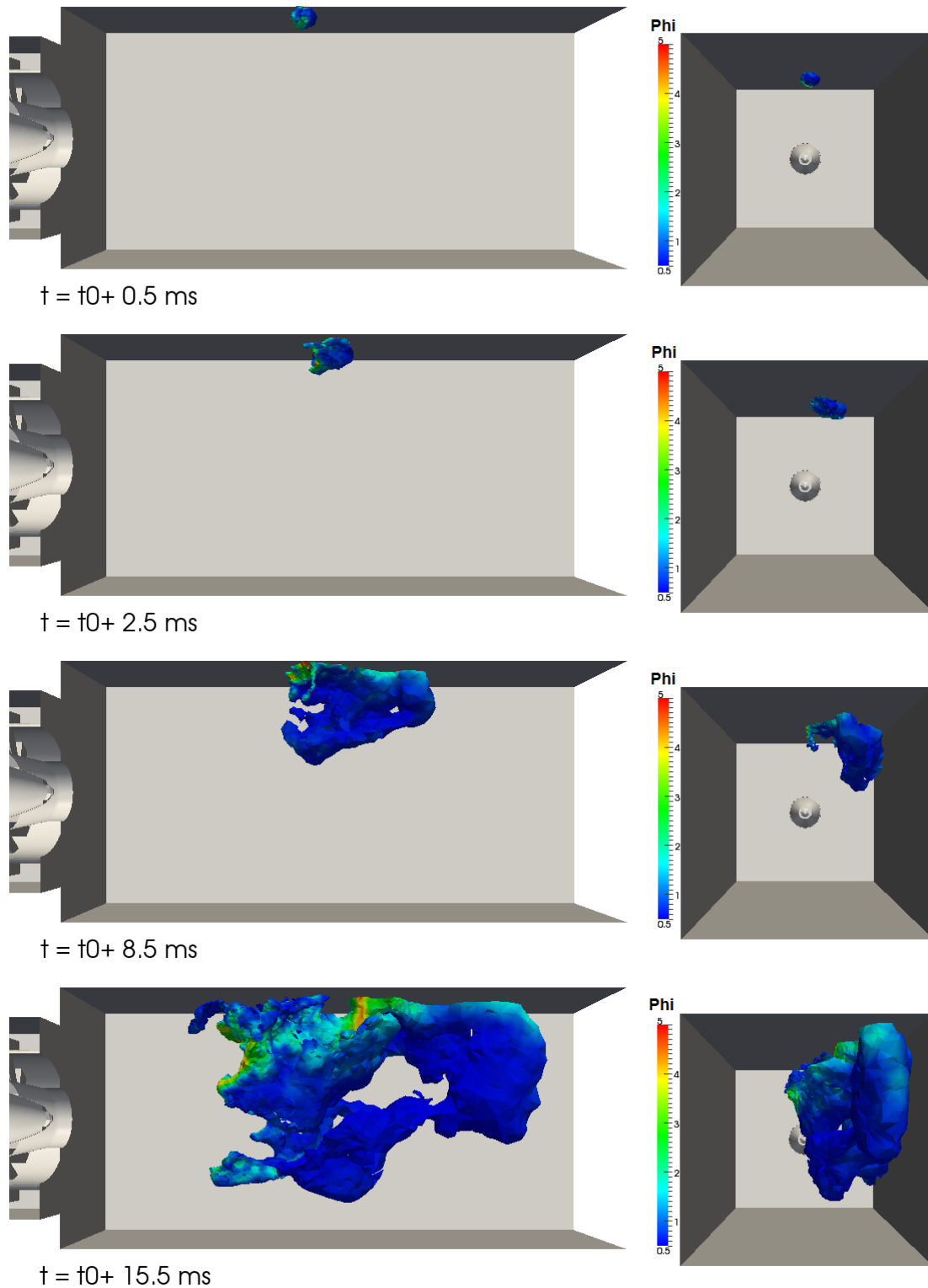


FIGURE 9.19 – Evolution temporelle de la flamme initialisée à la bougie  $z = 116$  mm, matérialisée par une iso-surface  $T = 1500$  K, colorée par la richesse effective.

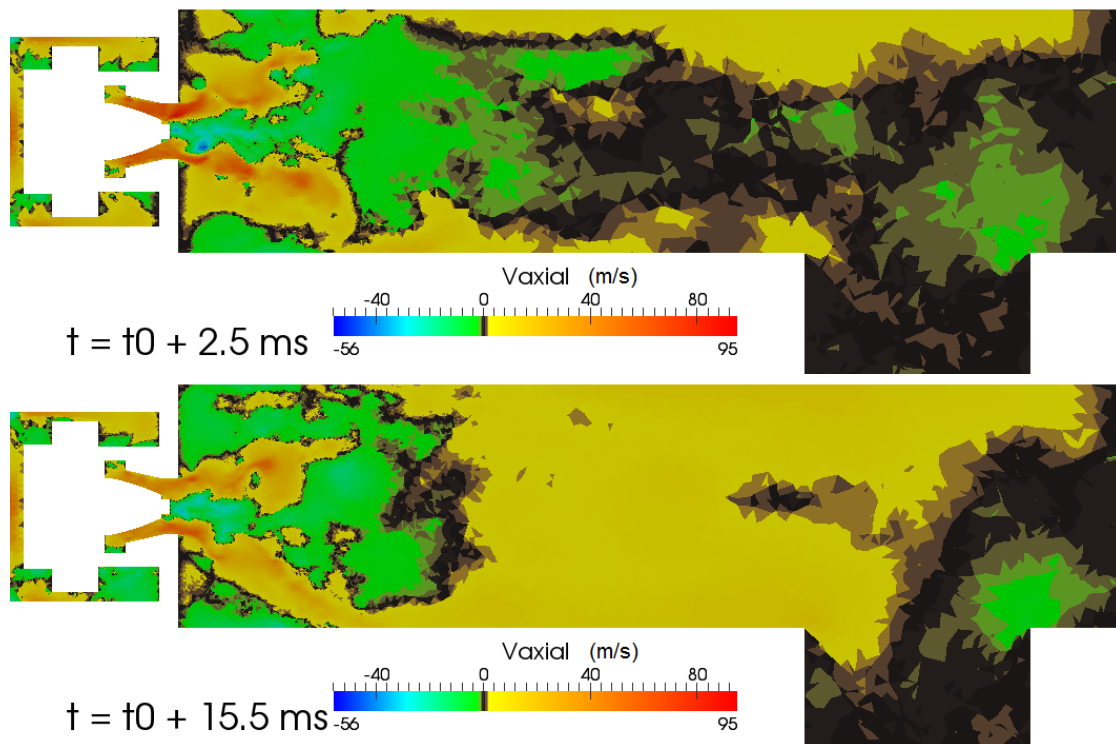
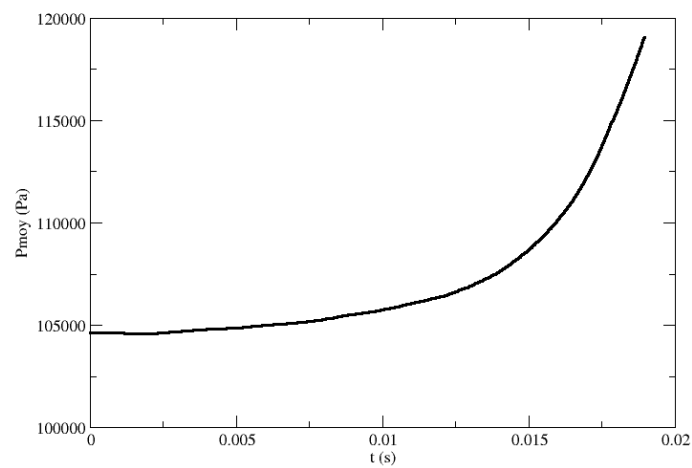


FIGURE 9.20 – Champs de vitesse axiale instantanée.

d'évaporation des gouttes ne sont pas adaptés au régime de l'allumage, cela ne semble pas être la seule raison.

FIGURE 9.21 – Evolution temporelle de la pression maximale dans la chambre de combustion, pour un allumage à la bougie à  $z = 116 \text{ mm}$ .

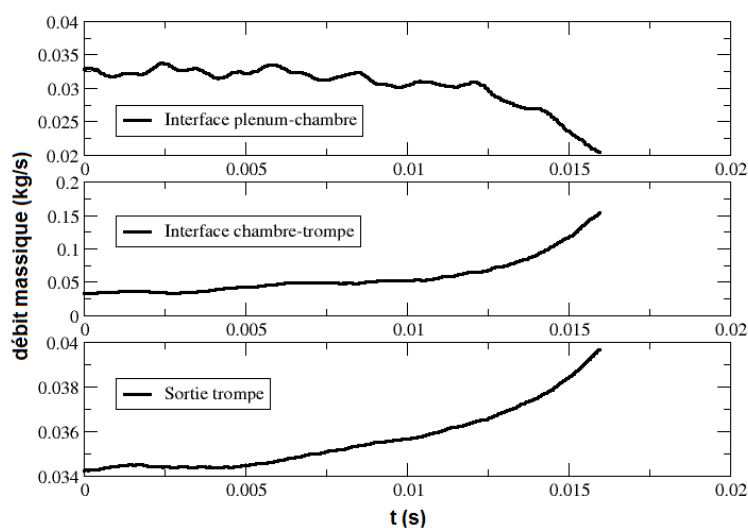


FIGURE 9.22 – Evolution temporelle des débits dans la chambre du MERCATO, pour un allumage à la bougie  $z = 116$  mm.

## 9.6 Conclusion

Des simulations de l'allumage du MERCATO ont été réalisées. A partir d'un champ diphasique instationnaire, le modèle de noyau d'allumage a été appliqué afin de définir les conditions initiales du calcul. La propagation de la flamme est ensuite simulée par approche LES. La flamme se développe d'abord lentement en suivant le sens de giration de l'écoulement, puis remonte dans la zone de recirculation latérale. Les résultats obtenus montrent que les gaz produits par l'évaporation des gouttes et la combustion sont peu évacués du domaine. L'augmentation de la pression calculée est alors plus forte et plus rapide que celle observée expérimentalement. L'écoulement s'inverse alors, et la flamme remonte dans l'injecteur.

Plusieurs hypothèses ont été émises afin de déterminer l'origine de ce comportement : modèle de combustion mal adapté, évaporation trop rapide, conditions limites empêchant la sortie des gaz... Des simulations numériques supplémentaires ont donc été réalisées. Les très fortes densités de gouttes qui apparaissent localement peuvent laisser penser que le modèle de goutte isolée associé à un couplage gaz-gouttes de type *two-way coupling* atteint ses limites. En effet, si la fraction volumique est  $\alpha_p > 1 \cdot 10^{-3}$ , il faut adopter un couplage prenant en compte les interactions entre les gouttes (*four-way coupling*). Autrement, l'évaporation des gouttes est surestimée. L'influence de l'évaporation est étudiée via la relaxation du calcul lors le couplage entre le gaz et les gouttes. Cela a montré que cet effet n'avait que peu d'influence sur la montée en pression. La cinétique chimique est également remise en cause. Un cas-test est réalisé avec une cinétique dont la constante pré-exponentielle a été divisée par 2. La montée en pression est moins fulgurante, ce qui met en évidence l'influence de la cinétique, mais toujours trop rapide.

La simulation de l'allumage de la chambre à partir de la bougie  $z = 116$  mm, peu favorable à la réussite de l'allumage, aboutit au même problème de montée en pression. Bien que la flamme se propage en partie via les parois, elle n'avait pourtant pas atteint les zones où la densité de gouttes est maximale, en fond de chambre. Ce résultat confirme que la modélisation de l'évaporation des gouttes n'est pas le seul phénomène posant problème

lors de l'allumage et que l'amélioration de la modélisation de la combustion turbulente est aussi un enjeu majeur pour pouvoir réaliser ce type de simulation.





# Conclusion et perspectives

La contribution de cette thèse à la thématique de l'allumage et de la combustion diphasique de gouttes multicomposant dans les foyers aéronautiques s'articule autour de deux grands axes. Le premier est consacré à l'étude de l'effet du caractère multicomposant des gouttes sur la structure et la propagation d'une flamme plane laminaire diphasique. Le deuxième axe concerne la modélisation de l'allumage diphasique local pour la simulation numérique instationnaire de l'allumage complet d'une chambre de combustion. Cette conclusion propose une synthèse des contributions apportées par la thèse sur chacune de ces problématiques ainsi que des perspectives pour les études à venir.

## Influence de l'évaporation multicomposant des gouttes sur la combustion

Afin de caractériser l'effet de l'évaporation multicomposant sur la combustion, une première étape a consisté à faire une étude paramétrique de l'impact de l'aspect diphasique sur la combustion avec des gouttes monodisperses et une cinétique réduite, tandis qu'une deuxième étape a considéré des gouttes multicomposant.

Les simulations de la combustion de gouttes de n-décane ont montré qu'à même richesse globale, la vapeur de carburant disponible en diphasique est moindre qu'en monophasique. En combustion pauvre, cela diminue la vitesse de propagation de la flamme et augmente son épaisseur. En combustion riche, les vitesses de flamme diphasiques peuvent être supérieures à la vitesse de flamme monophasique à la même richesse totale. L'évolution de la vitesse de flamme diphasique en fonction de la richesse totale est retrouvée par rapport à la littérature. La pertinence du paramètre de richesse effective dans le front de flamme est mise en évidence : pour une cinétique réduite, la vitesse de flamme diphasique correspond à la vitesse de flamme monophasique à cette même richesse effective.

La propagation d'une flamme plane laminaire le long d'un train de gouttes multicomposant a ensuite été simulée. Les effets dûs à l'évaporation multicomposant sont séparés des effets attribuables à la cinétique de chacune des espèces. Pour cela, les composants liquides ont des propriétés thermophysiques différentes, ce qui signifie que l'évaporation est effectivement séquentielle, mais une fois sous forme vapeur les composants du carburant sont supposés avoir les mêmes propriétés. Les deux composants choisis sont le n-décane, l'un des composants majoritaire du kérosène, et le n-hexadécane, l'un des n-alcanes composant le kérosène ayant une température normale d'ébullition des plus élevées. Afin de simuler la combustion multicomposant, deux cinétiques chimiques multicomposant réduites sont comparées. La première a été adaptée dans le code de calcul CEDRE afin de considérer les deux composants du carburant comme une pseudo-espèce. Les termes sources sont alors répartis en fonction de la fraction massique locale des espèces. La seconde cinétique ré-

duite multicomposant est proposée pour que chaque espèce puisse réagir indépendamment avec l'oxydant. Pour cela, le taux de réaction évolue linéairement avec la concentration en carburant. Les deux mécanismes (l'approche d'Aggarwal et l'approche à réactions découplées) présentent des caractéristiques différentes : le premier permet la simulation de mélanges globalement pauvres ou riches grâce à des fonctions de correction des termes sources, mais ne peut être utilisé que pour des composants proches (par exemple : même famille chimique). Le second mécanisme permet de décrire la réaction de composants très différents entre eux mais ne peut être utilisé pour des mélanges riches. Néanmoins, pour le cas de combustion pauvre étudié pour diverses compositions, les deux cinétiques donnent des résultats équivalents.

Une étude paramétrique faisant varier la composition des gouttes est alors réalisée. Les résultats mettent en évidence une diminution de la vitesse de flamme (jusqu'à 20%) lorsque la goutte est majoritairement composée du carburant le moins volatil. Cela aura un impact sur la propagation d'une flamme lors de l'allumage d'une chambre de combustion. Considérer la cinétique chimique réelle du n-hexadécane devrait accentuer cet effet.

Par ailleurs, les simulations en combustion riche montrent que les composants les plus volatils, et donc les premiers à s'évaporer, sont consommés en priorité par la flamme. Le carburant le moins volatil se retrouve alors dans les gaz chauds. Cela montre que l'évaporation séquentielle des composants peut avoir des conséquences sur la composition des gaz chauds et donc sur les émissions polluantes.

La représentation de la chimie par un mécanisme détaillé, ou par tabulation, pour chaque composant constitue la prochaine étape de ce travail. Cela permettrait de définir les cas où les effets dus à l'évaporation multicomposant sont amplifiés, ou au contraire inhibés, par les effets liés à la cinétique. Disposer de résultats expérimentaux pour la combustion multicomposant permettrait également de valider les résultats. A long terme il serait également intéressant de définir une cinétique chimique réduite à thermodynamique continue, à l'image des modèles d'évaporation multicomposant auxquelles elle serait couplée, pour réaliser une étude plus fine de l'influence du caractère multicomposant des carburants. Un dernier axe de travail porte sur l'impact de l'évaporation multicomposant sur l'allumage local d'un noyau et sur l'allumage plus global d'une chambre de combustion.

## Modélisation de l'allumage diphasique d'une chambre de combustion

La modélisation de l'allumage diphasique d'une chambre de combustion est la seconde thématique abordée dans le cadre de cette thèse. L'étude est réalisée en trois étapes. Tout d'abord, l'écoulement diphasique au sein d'une chambre de combustion mono-secteur est simulé et analysé. Un modèle de cartographie d'allumage, utilisant entre autres un modèle de noyau d'allumage local, est ensuite appliqué pour déterminer les probabilités d'allumage au sein de la chambre. Enfin, le modèle de noyau d'allumage local est utilisé pour initialiser le calcul de l'allumage complet d'une chambre.

L'écoulement diphasique au sein de la chambre MERCATO est simulé par une approche LES, grâce au code de calcul CEDRE. L'injection est réalisée à partir de données expérimentales et le plan d'injection numérique est placé en fond de chambre afin que la dispersion des gouttes par l'instabilité hydrodynamique PVC soit prise en compte. Les champs moyens monophasiques et diphasiques sont comparés aux profils expérimentaux disponibles et les résultats sont satisfaisants. En particulier, l'agitation turbulente est bien

reproduite. L'utilisation d'une approche LES permet également d'analyser le comportement instationnaire de l'écoulement. Ainsi, la fréquence caractéristique du PVC est bien approchée et l'étude de son interaction avec la phase dispersée montre que localement, la distribution de gouttes peut varier périodiquement dans certaines zones de l'écoulement. En revanche, en dépit des observations expérimentales, la simulation ne permet pas de retrouver cette variation dans la région à proximité des bougies. Néanmoins, si un noyau d'allumage est placé près des bougies, sa convection et son grossissement seront liés à l'apport de gouttes dans le reste de la chambre, et donc à la dynamique du PVC. La mise en évidence de l'influence de cette structure sur la distribution de la phase dispersée laisse penser que la génération d'étincelles, phasée avec ce phénomène physique, pourrait permettre d'augmenter les probabilités d'allumage.

Les probabilités d'allumage traduisent la capacité à allumer la chambre de combustion à partir d'un point. Un modèle de cartographie d'allumage, développé par Linassier [79], mettant en œuvre un modèle de noyau d'allumage développé par Garcia-Rosa [48] puis Linassier [79], est appliqué à une centaine de champs instantanés. Les critères d'analyse du modèle de cartographie sont les suivantes : inflammation du mélange, expansion du noyau et possibilité que la flamme se propage en amont de l'écoulement. Les résultats montrent que l'allumage est particulièrement favorable à la paroi, près des bougies. La zone de recirculation centrale est quant à elle peu propice à la réussite d'un allumage, à cause de la faible quantité de carburant disponible.

Le modèle de noyau d'allumage sert également à initialiser la simulation numérique instationnaire de l'allumage complet de la chambre. L'énergie est déposée au niveau de la bougie  $z = 56$  mm. La simulation de l'allumage montre que le noyau est convecté puis se développe en suivant la giration de l'écoulement. Cependant, la propagation de la flamme au reste de la chambre est beaucoup trop rapide, comparée aux observations expérimentales. L'importante quantité de gouttes accumulées dans les zones de recirculation latérales s'évapore. La pression dans la chambre augmente cinq fois plus que prévu, en une dizaine de millisecondes seulement. Cela provoque un retournement de l'écoulement et la flamme remonte dans l'injecteur. Parmi les pistes étudiées pour expliquer ce résultat, il ressort que les termes sources liés à la chimie sont sans doute surévalués. La réduction de la vitesse de flamme par un artifice numérique permet en effet de ralentir la dynamique de l'allumage. L'utilisation d'une cinétique chimique adaptée à la combustion diphasique turbulente devrait améliorer les résultats. Par ailleurs, l'adaptation du modèle de flamme épaissie à la combustion diphasique via la correction des termes d'évaporation et de traînée des gouttes constitue une piste intéressante. Enfin, la modélisation de l'évaporation mériterait d'être explorée. Le modèle d'évaporation pour une goutte isolée surestime les taux d'évaporation et il faudrait donc corriger ces termes en fonction de la fraction volumique locale, par exemple. Enfin, le dépôt des gouttes et la formation d'un film à la paroi mériteraient d'être pris en compte dans le calcul en raison du temps d'évaporation plus important du carburant dans ces zones.



# Table des figures

1.1	Architecture du code CFD CEDRE. . . . .	20
1.2	Vitesse de flamme en fonction de la richesse du prémélange gazeux, d'après Dorey [39]. . . . .	35
1.3	Classification des différents régimes d'interaction goutte/paroi, d'après Garcia-Rosa [49]. . . . .	40
2.1	Schéma des différents types de flammes laminaires diphasiques. . . . .	46
2.2	Schéma d'une flamme laminaire 1D diphasique à saturation. . . . .	47
2.3	a) Etude de l'influence de la part de carburant déjà gazeux sur la vitesse de flamme diphasique pour du diesel, comparaison des valeurs théoriques aux valeurs expérimentales, d'après Ballal et Lefebvre [11]. b) Application de la formule de Ballal et Lefebvre pour $\Omega = 0,117$ : vitesse de flamme diphasique en fonction de la richesse, pour plusieurs diamètres de gouttes de n-décane. . . . .	49
2.4	Evolution temporelle du taux de réaction maximal de la flamme diphasique à richesse totale $\Phi_0 = 1,48$ , d'après Cannevière [24]. . . . .	50
2.5	a) Vitesse de flamme diphasique pour du n-heptane, influence de la longueur primaire d'évaporation, b) Richesse effective dans le front de flamme pour du n-décane, en fonction du diamètre initial des gouttes, pour différentes richesses et longueurs d'évaporation primaire, c) Vitesse de flamme en fonction du diamètre initial des gouttes, pour du n-décane. Comparaison à la formule théorique de Ballal et Lefebvre et à des valeurs expérimentales, d'après Neophytou [88]. d) Vitesse de flamme diphasique en fonction de la richesse totale et du diamètre des gouttes, pour du n-décane et une longueur d'évaporation primaire $l = 5$ mm. . . . .	52
2.6	Vitesse de flamme en fonction du facteur d'épaississement F, pour un modèle de flamme épaissie. Comparaison pour différentes finesses de maillage des modèles : épaississement + correction de l'évaporation et de la trainée , épaississement + correction de l'évaporation, épaississement sans correction sur les termes diphasiques, d'après Senoner[107]. . . . .	53
2.7	Approximation de la vitesse de flamme laminaire pour un mélange monophasique bicomposant : 50% iso-octane, 50% n-heptane, d'après Byun [23]. . . . .	54
2.8	Vitesse de flamme laminaire pour l'iso-octane, le n-heptane et divers mélanges, d'après Byun [23]. . . . .	54
2.9	Délai d'autoallumage normalisé par le pas de temps ( $\Delta t = 5 \mu s$ ) en fonction de la fraction massique de n-hexane ou de n-decane dans les gouttes, de diamètre $d = 100 \mu m$ , d'après Aggarwal [3]. . . . .	55

2.10	Comparaison des modèles de diffusion pour l'évaporation d'une goutte de n-décane, impact sur l'évolution temporelle du diamètre (a), de la température de surface (b) et le débit des gouttes (c), pour différents modèles : 1/ Résolution complète de l'écoulement et de la thermique, 2/ Modèle à diffusion infinie, 3/ Modèle à diffusion limitée, 4/ Modèle à diffusion effective, d'après Abramzon et Sirignano [2]. . . . .	56
2.11	Comparaison des modèles de diffusion dans la goutte. Effets sur le délai d'auto-allumage d'un nuage de gouttes en fonction de la fraction massique liquide initiale de n-hexane (mélange n-hexane et n-décane), d'après Doué [40].	57
2.12	Vitesse de flamme laminaire en fonction de la richesse à température $T = 300$ K. Comparaison des cinétiques de Franzelli (—, -.-, - -), de Luche (◆, ●, ▲), et de Dagaut (◇, ○, △), pour des pressions respectives de $P = 1, 3, 12$ atm, d'après Franzelli [46]. . . . .	58
2.13	Délai d'auto-allumage en fonction de l'inverse de la température, pour une flamme à la stœchiométrie à pression $P = 10$ atm. Comparaison du mécanisme de Franzelli (■) aux valeurs expérimentales de Dagaut (#), d'après Franzelli [46]. . . . .	58
3.1	Maillage 1D pour la simulation de la flamme plane laminaire diphasique monocomposant. . . . .	65
3.2	Profils du taux d'évaporation à $\Phi_0 = 0,97$ , pour différents diamètres de gouttes. . . . .	68
3.3	Profils de fraction massique gazeuse de carburant et de taux de dégagement de chaleur adimensionné par la valeur maximale obtenue pour $d = 5 \mu\text{m}$ . . . . .	68
3.4	Profils de température du gaz à $\Phi_0 = 0,97$ , pour différents diamètres de gouttes. . . . .	69
3.5	Profil de flamme . . . . .	70
3.6	Profils de richesse effective, à $\Phi_0 = 1,47$ , pour différents diamètres de gouttes.	70
3.7	Profils de taux de réaction et de fraction massique du n-décane pour plusieurs richesses totales, à $d = 5 \mu\text{m}$ . . . . .	71
3.8	Profils de taux de réaction et de fraction massique du n-décane pour plusieurs richesses totales, à $d = 50 \mu\text{m}$ . . . . .	72
3.9	Évolution de la vitesse de flamme en fonction de la richesse totale, pour différents diamètres de gouttes initiaux. Traits pleins : notre étude, Traits pointillés : Neophytou. . . . .	73
3.10	Évolution de la vitesse de flamme adimensionnée en fonction du diamètre des gouttes, pour une richesse totale $\Phi_0 = 0,97$ . . . . .	75
3.11	Évolution de la vitesse de flamme en fonction de la richesse effective, pour différentes richesses totales. . . . .	75
3.12	Évolution de la richesse effective relative, vue au point où le dégagement de chaleur est maximal, en fonction de la richesse totale du mélange. . . . .	76
4.1	Vitesse de flamme laminaire pour $T_0 = 300$ K et $T_0 = 473$ K . . . . .	86
4.2	Schéma modélisant les propriétés des composants au sein de la goutte, et dans le gaz . . . . .	88

4.3	Profil du taux de dégagement de chaleur : a) comparaison entre les deux cinétiques globales multicomposant, pour des gouttes de taille $d = 100 \mu\text{m}$ , composition : 50% n-décane, 50% n-hexadécane, noir : réactions découplées, rouge : modèle d'Aggarwal; b) comparaison aux taux de consommation adimensionnés des deux composants du carburant, pointillés noirs : profil de taux de dégagement de chaleur, trait bleu : n-décane, trait rouge : n-hexadécane. . . . .	90
4.4	Vitesse de flamme diphasique en fonction de la fraction massique de n-hexadécane dans les gouttes, pour plusieurs diamètres, à richesse totale $\Phi_0 = 0,82$ . Pointillés : réactions découplées, croix : approche Aggarwal. . . . .	91
4.5	Profils de température des gouttes, à $\Phi_0 = 0,82$ et $d = 100 \mu\text{m}$ . . . . .	92
4.6	Profils de diamètre de gouttes, à $\Phi_0 = 0,82$ et $d = 100 \mu\text{m}$ . . . . .	92
4.7	Profils de taux de dégagement de chaleur, à $\Phi_0 = 0,82$ et $d = 100 \mu\text{m}$ . . . . .	93
4.8	Profils de vitesse relative entre le gaz et les gouttes, adimensionnée par la vitesse des gaz brûlés à l'infini aval, à $\Phi_0 = 0,82$ et $d = 50 \mu\text{m}$ . Le palier est dû à l'évaporation totale des gouttes, auxquelles une vitesse nulle est alors affectée. . . . .	94
4.9	Vitesse de flamme en fonction de la fraction massique liquide de n-hexadécane, pour plusieurs diamètres (traits pleins : $d = 25 \mu\text{m}$ , pointillés : $d = 50 \mu\text{m}$ , tirets : $d = 100 \mu\text{m}$ , et richesses globales (noir : $\Phi_0 = 1,47$ , rouge : $\Phi_0 = 1,93$ ) . . . . .	95
4.10	Vitesse de flamme en fonction de la richesse effective dans le front de flamme, pour plusieurs diamètres, richesses et compositions. $\Phi_{eff}$ est pris au point où : a) le taux de dégagement de chaleur est maximal, b) le taux de consommation du n-décane est maximal. . . . .	96
4.11	Profils de taux de dégagement de chaleur (a) et de taux de consommation du n-décane et du n-hexadécane (b), pour une richesse totale $\Phi_0 = 1,93$ , des gouttes de diamètre initial $d = 100 \mu\text{m}$ composées à 25 % de n-décane et à 75% de n-hexadécane. Les pointillés marquent l'abscisse où la richesse effective locale est prise pour la figure 4.10 a) et b). . . . .	97
4.12	Évolution du Damköhler d'évaporation en fonction du diamètre initial des gouttes et de leur composition, à $\Phi_0 = 0,82$ . . . . .	97
4.13	Profils de fraction massique de carburant pour une composition initiale 75% n-décane + 25% n-hexadécane, à richesses totales $\Phi_0 = 1,47$ et $\Phi_0 = 1,93$ , pour un diamètre $d = 50 \mu\text{m}$ . . . . .	98
4.14	Pourcentage de n-hexadécane parmi les espèces de carburant des gaz chauds à l'infini aval, en fonction de la fraction massique initiale de n-hexadécane dans les gouttes, pour deux richesses totales (noir : $\Phi_0 = 1,47$ , rouge : $\Phi_0 = 1,93$ ) . . . . .	99
4.15	Composition du carburant dans un cas où tout le n-décane brûle. . . . .	99
4.16	Composition du carburant dans un cas où il reste du n-décane dans les gaz chauds. . . . .	100
5.1	Bougie à arc schématisée, visualisation des phases de l'allumage d'après Kawahara et al. [64] . . . . .	108
5.2	Influence de la composition et du diamètre des gouttes sur l'énergie minimum d'allumage (MIE) : comparaison des études expérimentales et des corrélations de Ballal et Lefebvre [11] . . . . .	111

5.3	Influence des nombres de Karlovitz $Ka$ et de Péclet sur l'énergie minimum d'allumage pour un écoulement turbulent air/méthane, d'après Shy et al. [109]. A gauche : MIE entraînant 50% de réussite, à droite : MIE normalisé. . . . .	112
5.4	Influence du diamètre des gouttes et de la richesse liquide sur l'énergie minimum d'allumage pour un brouillard de gouttelettes de n-décane, d'après Aggarwal [5]. . . . .	113
5.5	Simulations DNS de l'allumage d'un lit fluidisé, évolution temporelle de l'isosurface de température $T = \frac{T_{ad}}{2}$ (rouge) et de l'isosurface de richesse gazeuse $\phi_g = 1$ (bleue) ( $t = t_{sp}, 2t_{sp}, 3t_{sp}, 4t_{sp}$ , où $t_{sp}$ est la durée du dépôt d'énergie), d'après Neophytou et al. [89]. . . . .	114
5.6	Schéma des 3 phases de l'allumage d'après le modèle LI-CFM de Boudier [20]	116
5.7	Schématisation des traceurs émis et des bilans effectués par le modèle d'allumage DPIK, d'après Tan et Reitz [116]. . . . .	117
5.8	Maillage de la configuration étudiée par le modèle AKTIM de Duclos et Colin [41]. . . . .	118
5.9	Observation de la formation du noyau d'allumage après décharge de la bougie dans la configuration du MERCATO, d'après García-Rosa [48]. . . . .	120
5.10	Domaines de calcul, conditions initiales et limites pour la simulation du noyau d'allumage, d'après Linassier [79]. . . . .	123
5.11	Rayon $r_1$ et température $T_1$ du noyau après décharge, pour différentes énergies $E_{spk}$ déposées en conditions ambiantes, d'après García-Rosa. . . . .	124
5.12	Schéma du banc d'essai pour l'étude de la probabilité d'allumage d'un spray de n-heptane par Marchione [83], et carte de probabilité d'allumage obtenue	127
5.13	a) Schéma de la configuration étudiée par Ahmed [7], Richardson [101] et Neophytou [88]; b) Schéma du système d'injection bluff-body. . . . .	128
5.14	Processus de prédiction de l'allumage : évolution des traceurs lagrangiens (bleu : non allumé, vert : traceur en mouvement, rouge : $Ka > Ka_{crit}$ ) à différents instants (0 ms, 3 ms, 6 ms), d'après Neophytou [90]. . . . .	128
5.15	Comparaison des résultats de probabilité d'allumage d'un brûleur bluff-body : a) étude expérimentale de Ahmed et al. [7], b) Etude de Richardson [101], sur une moitié du brûleur, c) étude de Neophytou [89], concentrée sur la zone de recirculation centrale. . . . .	129
5.16	Probabilité d'allumage du MERCATO, pour une énergie déposée $E_{dep} = 100 mJ$ , d'après Eyssartier et al. [44]. Les flèches désignent les résultats expérimentaux de Lecourt [73] (flèches blanches : allumage possible, flèches noires : pas d'allumage). . . . .	130
5.17	Exemple de calcul du critère de la propagation de flamme . . . . .	131
5.18	Exemple de calcul du critère de la propagation de flamme . . . . .	132
5.19	Carte d'allumage de la chambre à partir de différentes positions pour le dépôt de l'énergie, à partir d'un calcul RANS. Sphères blanches : l'allumage est possible d'après le modèle numérique, lignes jaunes : allumage favorable d'après les expérimentations, lignes rouges : pas d'allumage constaté expérimentalement, d'après Linassier . . . . .	133
6.1	Diagramme de groupes de combustion, d'après Chigier [29] et Kuo [68]. . . . .	137
6.2	Régimes de combustion d'après la classification de Chiu, extrait de Réveillon et Vervisch [99]. . . . .	137



6.3	Régimes de combustion diphasique, d'après Réveillon et Vervisch [99]. Trait continu : flamme de prémélange, traits pointillés : flamme de diffusion. . . . .	138
6.4	Température de flamme diphasique dans l'espace de richesse de mélange $\Phi$ , pour une chimie infiniment rapide (courbe d'équilibre) et en prenant en compte la courbe de saturation de Clausius-Clapeyron. . . . .	140
6.5	Température en fonction de la fraction de mélange, pour un mélange diphasique, d'après Réveillon et Vervisch [99] . . . . .	140
7.1	Photo du dispositif expérimental : banc d'essai MERCATO. . . . .	142
7.2	Représentation de la maquette monosecteur dans le banc d'essai MERCATO. . . . .	143
7.3	Limites pauvre d'allumage en fonction de la position de la bougie et de la pénétration des électrodes dans l'écoulement, pour le <i>point de référence</i> , d'après Lecourt [72]. . . . .	144
7.4	Visualisation tomographique moyennée, pour un brouillard non-réactif (section longitudinale, $f_{acqu} = 1kHz$ ), d'après Linassier [79]. Signal de luminosité proportionnel au diamètre au carré. . . . .	146
7.5	Visualisation tomographique des différentes phases de l'allumage complet du foyer, section transversale 6 mm, $f_{acqu} = 1 kHz$ , d'après Linassier [79]. . . . .	147
7.6	Statistiques d'allumage du foyer monosecteur du MERCATO à partir de la bougie d'abscisse $z = 56$ mm, d'après Lang [70]. . . . .	148
7.7	Evolution temporelle de la pression (bleu) et de la perte de pression (rouge) dans la chambre du MERCATO au cours de l'allumage. . . . .	148
7.8	Synthèse des étapes du modèle d'atomisation FIM-UR. . . . .	150
7.9	Mesure PDI brutes par classe de gouttes pour une demi-traversée de la veine, section $z = 6mm$ : point de référence, non réactif non confiné, d'après Linassier [79]. . . . .	153
7.10	Evolution temporelle du taux de consommation total de carburant dans le foyer, pour plusieurs instants initiaux d'allumage $t_0$ , d'après Eyssartier. . . . .	155
7.11	Comparaison du développement et de la propagation de la flamme dans le MERCATO : simulation RANS (isocontour de température $T = 1300 K$ ) et visualisation par tomographie laser, d'après Linassier [79]. . . . .	156
8.1	Maillage du MERCATO, zoom. Les traits rouges figurent les plans de mesures de la phase gazeuse et la position des bougies. . . . .	161
8.2	Maillage du MERCATO. . . . .	162
8.3	Décalage du plan d'injection de $z = 6$ mm à $z = 0$ mm et modification des vitesses . . . . .	168
8.4	Champ moyen de vitesse axiale et isolignes de vitesse $V_{axial} = 0 m/s$ . . . . .	169
8.5	Champ moyen de vitesse axiale et isolignes de vitesse $V_{axial} = 0 m/s$ , à $z = 6$ mm et $z = 26$ mm. . . . .	169
8.6	Iso-surface de vitesse axiale moyenne nulle $V_{axial} = 0 m/s$ . . . . .	170
8.7	Fond de chambre du MERCATO après plusieurs séances de mesures. Photo R. Lecourt. . . . .	170
8.8	Lignes de courant de l'écoulement moyen monophasique, colorées par la vitesse axiale. . . . .	171
8.9	Vitesse moyenne axiale adimensionnée (— : LES, - - : RANS, $\square$ : LDA). . . . .	172
8.10	Vitesse moyenne radiale adimensionnée (— : LES, - - : RANS, $\square$ : LDA). . . . .	173

8.11	Vitesse moyenne tangentielle adimensionnée ((- : LES, -- : RANS, □ : LDA). . . . .	173
8.12	Vitesse fluctuante moyenne axiale adimensionnée (- : LES, -- : RANS, □ : LDA). . . . .	174
8.13	Vitesse fluctuante moyenne radiale adimensionnée (- : LES, -- : RANS, □ : LDA). . . . .	174
8.14	Vitesse fluctuante moyenne tangentielle adimensionnée (- : LES, -- : RANS, □ : LDA). . . . .	175
8.15	Vitesse axiale de la phase dispersée (- : LES, -- : RANS, □ et △ : PDI). . . . .	176
8.16	Vitesse radiale de la phase dispersée (- : LES, -- : RANS, △ : PDI). . . . .	176
8.17	Vitesse tangentielle de la phase dispersée (- : LES, -- : RANS, □ : PDI). . . . .	177
8.18	Diamètre moyen de Sauter $D_{32}$ (- : LES, -- : RANS, □ et △ : PDI). . . . .	177
8.19	Flux volumique de la phase dispersée (- : LES, -- : RANS, □ et △ : PDI). . . . .	178
8.20	Champ moyen de richesse liquide. . . . .	179
8.21	Champ moyen de fraction volumique. . . . .	179
8.22	Vortex de précession (PVC) matérialisé par une iso-surface de pression $P = 103\,000$ Pa. . . . .	180
8.23	Position des capteurs CHARME dans la chambre du MERCATO. . . . .	181
8.24	Comparaison du spectre obtenu par simulation LES monophasique, au spectre pour l'écoulement monophasique obtenu expérimentalement par Lecourt. . . . .	181
8.25	Tranche transversale (à $z = 6$ mm) de la répartition de la phase dispersée colorée par la vitesse axiale des gouttes. La taille des sphères est proportionnelle à la taille des gouttes. Isolignes de vitesse axiale gazeuse nulle. . . . .	182
8.26	Tranches longitudinales et transversales (à $z = 26$ mm) de la répartition de la phase dispersée, colorée par la vitesse axiale des gouttes. La taille des sphères est représentative de la taille des gouttes. Le PVC est représenté par une iso-surface de pression $P = 103\,000$ Pa. . . . .	183
8.27	Evolution temporelle du diamètre moyen de Sauter $D_{32}$ sur l'axe de la chambre à $x = 0$ mm . . . . .	184
8.28	Evolution temporelle du diamètre moyen de Sauter $D_{32}$ à $x = 20$ mm . . . . .	185
8.29	Evolution temporelle du diamètre moyen de Sauter $D_{32}$ près des bougies à $x = 50$ mm . . . . .	185
8.30	Spectre du signal de fraction massique de carburant $Y_F$ . . . . .	186
8.31	Champ instationnaire des positions favorables à l'allumage. Comparaison aux données expérimentales de Lecourt [73] (jaune : allumage très probable, orange : allumage parfois observé, rouge : pas d'allumage). . . . .	187
8.32	Champ instationnaire des positions favorables à l'allumage, 3,6 ms plus tard. Comparaison aux données expérimentales de Lecourt [73] (jaune : allumage très probable, orange : allumage parfois observé, rouge : pas d'allumage). . . . .	188
8.33	Champ instantané de noyaux d'allumage satisfaisant le critère de limite d'inflammabilité. . . . .	188
8.34	Champ instantané de noyaux d'allumage satisfaisant le critère de limite d'inflammabilité et la température finale du noyau. . . . .	189
8.35	Carte de probabilité d'allumage ( $P_{ign} > 30\%$ ). Comparaison aux données expérimentales de Lecourt [73] (jaune : allumage très probable, orange : allumage parfois observé, rouge : pas d'allumage). . . . .	189

9.1	Evolution temporelle du profil de température dans le noyau. . . . .	195
9.2	Isocontour de pression $P = 103\,000$ Pa matérialisant l'instabilité PVC, à l'instant $t_0$ . Bougies à $z = 56$ mm et $z = 116$ mm. . . . .	195
9.3	Evolution temporelle de la flamme, matérialisée par une iso-surface $T = 1500$ K, colorée par le taux de réaction du carburant. . . . .	197
9.4	Champs instantanés ( $t = t_0 + 2,5$ ms) de température, richesse effective et concentration volumique des gouttes. . . . .	198
9.5	Champs instantanés ( $t = t_0 + 6,5$ ms) de température, richesse effective et concentration volumique des gouttes. . . . .	198
9.6	Champs instantanés ( $t = t_0 + 12,5$ ms) de température, richesse effective et concentration volumique des gouttes. . . . .	199
9.7	Champs de vitesse axiale du gaz. . . . .	200
9.8	Diagrammes de répartition de la température locale en fonction de la richesse effective locale, à divers instants. Ligne rouge : courbe de saturation, Ligne verte : courbe d'équilibre. . . . .	201
9.9	Diagrammes de répartition du taux de réaction du $C_{10}H_{20}$ en fonction de la richesse effective locale, à divers instants. . . . .	202
9.10	Evolution temporelle de la pression moyenne dans la chambre de combustion	203
9.11	Evolution temporelle des débits . . . . .	204
9.12	Stratégie numérique pour l'allumage . . . . .	204
9.13	Evolution de la pression maximale dans la chambre de combustion . . . . .	206
9.14	Evolution temporelle de la flamme, matérialisée par une iso-surface $T = 1500$ K, colorée par la richesse effective. . . . .	207
9.15	Champs de température, taux de réaction du carburant, épaissement de la flamme . . . . .	208
9.16	Evolution de la pression maximale dans la chambre. . . . .	209
9.17	Evolution de la pression maximale dans la chambre de combustion . . . . .	210
9.18	Champs de terme source de masse de la phase dispersée, effet de la modification de la relaxation SPARTE. . . . .	211
9.19	Evolution temporelle de la flamme initialisée à la bougie $z = 116$ mm, matérialisée par une iso-surface $T = 1500$ K, colorée par la richesse effective. . . . .	212
9.20	Champs de vitesse axiale instantanée. . . . .	213
9.21	Evolution temporelle de la pression maximal dans la chambre de combustion, pour un allumage à la bougie $z = 116$ mm. . . . .	213
9.22	Evolution temporelle des débits dans la chambre du MERCATO, pour un allumage à la bougie $z = 116$ mm. . . . .	214



# Liste des tableaux

1.1	Composition de la pseudo-espèce modélisant le kérosène. . . . .	34
3.1	Conditions initiales de la phase gazeuse . . . . .	65
3.2	Conditions initiales de la phase liquide . . . . .	66
3.3	Modèle de combustion . . . . .	66
3.4	Modèles de la phase liquide . . . . .	67
4.1	Coefficients de la cinétique chimique multicomposant . . . . .	86
4.2	Propriétés des cinétiques multicomposant . . . . .	87
4.3	Températures normales d'ébullition de composants du kérosène . . . . .	89
4.4	Paramètres de la phase liquide . . . . .	89
4.5	Délais d'évaporation en fonction de la composition de la goutte, de taille $d = 50 \mu\text{m}$ . . . . .	93
5.1	Conditions initiales du calcul de noyau d'allumage. . . . .	125
7.1	Conditions opératoires du Point de référence . . . . .	144
7.2	Synthèse des essais réalisés sur la chambre monosecteur du MERCATO, par García-Rosa, Linassier et, dans le cadre du programme TIMECOP, par Lecourt. . . . .	145
8.1	Maillage du MERCATO. . . . .	161
8.2	Conditions aux limites pour la phase gazeuse. . . . .	162
8.3	Conditions aux limites de la phase dispersée. . . . .	162
8.4	Modèles pour SPARTE . . . . .	163
8.5	Modèles pour CHARME . . . . .	164
8.6	Intégration temporelle . . . . .	165
8.7	Abscisses et hauteurs de la position des capteurs numériques pour la phase dispersée. . . . .	184
9.1	Conditions initiales à proximité de la bougie . . . . .	195



# Bibliographie

- [1] R. G. Abdel-Gayed and D. Bradley. *Combustion and Flame*, 62 :61–68, 1985.
- [2] B. Abramzon and W. A. Sirignano. Droplet vaporization model for spray combustion calculations. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 32 :1605–1618, 1989.
- [3] S.K. Aggarwal. Ignition behavior of a multicomponent fuel spray. *Combustion and Flame*, 76 :5–15, 1989.
- [4] Suresh K. Aggarwal. Chemical-kinetics modeling for the ignition of idealized sprays. *Combustion and Flame*, 69 :291–302, 1987.
- [5] Suresh K. Aggarwal. A review of spray ignition phenomena : present status and future research. *Progress in Energy and Combustion Science*, 24 :565–600, 1998.
- [6] S. Ahmed. *Spark Ignition of Turbulent Non-premixed Flames*. PhD thesis, University of Cambridge, 2006.
- [7] S.F. Ahmed, R. Balachandran, and E. Mastorakos. Spark ignition of turbulent nonpremixed bluff-body flames. *Combustion and Flame*, 151 :366–385, 2007.
- [8] O. Akindele, D. Bradley, P. Mak, and M. McMahon. Spark ignition of turbulent gases. *Combustion and Flame*, 47 :129–155, 1982.
- [9] F. Atzler, F. Demoulin, M. Lawes, and Y. Lee. Oscillations in the flame speed of globally homogeneous two phase mixtures. *18th International Colloquium on the Dynamics of Explosions and Reactive Systems*, 29, 2001.
- [10] D. R. Ballal and A. H. Lefebvre. A general model of spark ignition for gaseous and liquid fuel-air mixtures. *Symposium (International) on Combustion*, 18-1 :1737–1746, 1981.
- [11] D.R. Ballal and A.H. Lefebvre. Flame propagation in heterogeneous mixtures of fuel droplets, fuel vapor and air. In *Proceedings of the combustion institute 18*, 1981.
- [12] N. Bertier. *Simulation des Grandes Echelles en Aérothermique sur des Maillages Non-Structurés Généraux*. PhD thesis, Université Paris VI, 2006.
- [13] N. Bertier and L. H. Dorey. Mécanisme réactionnel avec pea pour la combustion du kérosène dans l’air. Technical report, ONERA, 2010.
- [14] C. Biernacki, G. Celeux, and F. Langrognet. Model-based cluster and discriminant analysis with the mixmod software. *Computational Statistics and Data Analysis*, 51/2 :587–600, 2006.
- [15] V. Bodoc. *Multicomponent droplet vaporization*. PhD thesis, Université de Toulouse, 2011.
- [16] M. Boileau. *Simulation aux grandes échelles de l’allumage diphasique des foyers aéronautiques*. PhD thesis, Université de Toulouse, 2007.

- [17] R. Borghi. *Background on droplets and sprays. In Combustion and Turbulence in Two-phase Flows, Lecture series.* Von Karman Institute for Fluid Dynamics, 1996.
- [18] R. Borghi. *The links between turbulent combustion and spray combustion and their modelling. In Transport Phenomena in Combustion.* Taylor and Francis, 1996.
- [19] R. Borghi. *Modélisation et Théorie des Flammes.* Technip, 2000.
- [20] P. Boudier, S. Henriot, T. Poinso, and T. Baritaud. A model for turbulent flame ignition and propagation in spark ignition engines. In *Proceedings of the Combustion Institute 24*, pages 503–510, 1992.
- [21] A. Bruyat, C. Laurent, and O. Rouzaud. Direct quadrature method of moments for multicomponent droplet spray vaporization. In *ICMF 2010*, May 30 - June 4, 2010.
- [22] T. D. Butler and P. J. O'Rourke. A numerical method for two-dimensional unsteady reacting flows. In *In 16th Symp. (Int.) Combust*, 1976.
- [23] J.J. Byun. *Laminar Burning Velocities and Laminar Flame Speeds of Multi-Component Fuel Blends at Elevated Temperatures and Pressures.* PhD thesis, The University of Texas at Austin, 2011.
- [24] K. Cannevière. *Simulation Numérique Directe de la combustion turbulente diphasique : Application à l'étude de la propagation et de la structure des flammes.* PhD thesis, INSA Rouen, 2003.
- [25] CEDRE. Manuel utilisateur de la chaîne CEDRE. Technical report, Onera, 2009.
- [26] M. Champion, B. Deshaies, and K. Kinoshita. Spherical flame initiation : Theory versus experiments for lean propane-air mixtures. *Combustion and Flame*, 65 :319–337, 1986.
- [27] S.H. Chang. *Transport Phenomena in Combustion.* Taylor and Francis, 1996.
- [28] P. Chassaing. *Turbulence en mécanique des fluides.* Cepaduès, 2000.
- [29] N. Chigier. Group combustion models and laser diagnostic methods in sprays : a review. *Combustion and Flame*, 51 :127–139, 1983.
- [30] H. Chiu and T. Liu. Group combustion of liquid droplets. *Combustion science and technology*, 17 :127–131, 1977.
- [31] H. H. Chiu and E. J. Croke. Group combustion of liquid fuel sprays. In *Energy Technology Lab 81-2, University of Illinois, Chicago*, 1981.
- [32] H. H. Chiu, H. Y. Kim, and E. J. Croke. Internal group combustion of liquid droplets. In *Proceedings of the Combustion Institute*, 1982.
- [33] O. Colin, F. Ducros, D. Veynante, and T. Poinso. A thickened flame model for large eddy simulations of turbulent premixed combustion. *Physics of Fluids*, 12 :1843–1863, 2000.
- [34] G.E. Cossali. An integral model for gas entrainment into full cone sprays. *Journal of Fluid Mechanics*, 439 :353–366, 2001.
- [35] P. Dagaut and M. Cathonnet. The ignition, oxidation, and combustion of kerosene : A review of experimental and kinetic modeling. *Progress in Energy and Combustion Science*, 32 :48–92, 2006.
- [36] R. Dahms, M. C. Drake, T. D. 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 :2229–2244, 2011.



- [37] R. Ben Dakhli. *Combustion stationnaire et instationnaire de mélanges diphasiques*. PhD thesis, Ecole Centrale Paris, 2001.
- [38] G. Z. Damköhler. The effect of turbulence on the flame velocity in gas mixtures. *Elektrochemie*, 46 :601–652, 1940.
- [39] L.H. Dorey. *Modélisation des phénomènes couples combustion-formation des suies-transferts radiatifs dans les chambres de combustion de turbine à gaz*. PhD thesis, Ecole Centrale de Paris, 2012.
- [40] N. Doué. *Modélisation de l'évaporation de gouttes multi-composant*. PhD thesis, Université de Toulouse, 2005.
- [41] J.-M. Duclos and O. Colin. Arc and kernel tracking ignition model for 3d spark-ignition engine calculations. *COMODIA*, pages 343–350, 2001.
- [42] V. Ebrahimian and C. Habchi. Towards a predictive evaporation model for multi-component hydrocarbon droplets at all pressure conditions. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 54 :3552–3565, 2011.
- [43] K. Eisazadeh-Far, F. Parsinejad, H. Metghalchi, and J. C. Keck. On flame kernel formation and propagation in premixed gases. *Combustion and Flame*, 157 :2211–2221, 2010.
- [44] A. Eyssartier. *LES of two-phase reacting flows : Stationary and transient operating conditions*. PhD thesis, Université de Toulouse, 2012.
- [45] E. Fernandez-Tarrazo, A. L. Sanchez, A. Linan, and F. A. Williams. A simple one-step chemistry model for partially premixed hydrocarbon combustion. *Combustion and Flame*, 147 :32–38, 2006.
- [46] B. Franzelli, E. Riber, M. Sanjosé, and T. Poinso. A two-step chemical scheme for kerosene-air premixed flames. *Combustion and Flame*, 157 :1364–1373, 2010.
- [47] G. Freeman and A. Lefebvre. Spontaneous ignition characteristics of gaseous hydrocarbon-air mixtures. *Combustion and Flame*, 58 :153–162, 1984.
- [48] N. García-Rosa. *Phénomènes d'allumage d'un foyer de turbomachine en conditions de haute altitude*. PhD thesis, Université de Toulouse, 2008.
- [49] N. García-Rosa, P. Villedieu, and G. Lavergne. A new droplet-wall interaction model. In *Proceedings of the ICLASS, Kyoto*, 2006.
- [50] M. Gorokhovski. The stochastic lagrangian model of drop breakup in the computation of liquid sprays. *Atomization and Sprays*, 11 :505–519, 2001.
- [51] M. Gorokhovski and M. Herrmann. Modelling primary atomization. *Annual Review of Fluid Mechanics*, 40 :343–366, 2008.
- [52] S. Goyer. Allumage de chambre de combustion de turbomachine et caractérisation de la phase gazeuse en combustion. Master's thesis, CNAM, 2012.
- [53] J. B. Greenberg. Finite-rate evaporation and droplet drag effects in spherical flame front propagation through a liquid fuel mist. *Combustion and Flame*, 148 :187–197, 2007.
- [54] X.J. Gu, M.Z. Haq, M. Lawes, and R. Woolley. Laminar burning velocity and markstein lengths of methane-air mixtures. *Combustion and flame*, 121 :41–58, 2000.
- [55] F. Haider. *Discrétisation en maillage non structuré général et applications LES*. PhD thesis, Université Pierre et Marie Curie (Paris VI), 2009.

- [56] W. L. H. Hallett. A simple model for the vaporization of droplets with large numbers of components. *Combustion and Flame*, 121 :334–344, 2000.
- [57] S. Hayashi and S. Kumagai. Flame propagation in fuel droplet-vapor-air mixtures. In *Proceedings of the Combustion Institute*, page 445–452, 1974.
- [58] S. Hayashi, S. Kumagai, and T. Sakai. Propagation velocity and structure of flames in droplet-vapor-air mixtures. *Combust. Sci. Tech.*, 15 :169–177, 1976.
- [59] D. C. Horning. A study of the high temperature auto-ignition and thermal decomposition of hydrocarbons. Technical report, Stanford University, 2001.
- [60] C. C. Huang, S. S. Shy, C. C. Liu, and Y. Y. Yan. Autoignition of surrogate fuels at elevated temperatures and pressures. In *Proceedings of the Combustion Institute 31*, pages 1401–1409, 2007.
- [61] G.L. Hubbard, V.E. Denny, and A.F. Mills. Droplet evaporation : Effects of transients and variable properties. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 18 :1003–1008, 1975.
- [62] B. Karlovitz, D. Denniston, D. Knapschaefer, and F. Wells. Studies on turbulent flames. In *Symp. (Int.) on Combustion*, pages 613–620, 1953.
- [63] A. Kaufmann. *Vers la simulation des grandes échelles en formulation Euler/Euler des écoulements réactifs diphasiques*. PhD thesis, INP Toulouse, 2004.
- [64] N. Kawahara, E. Tomita, S. Takemoto, and Y. Ikeda. Fuel concentration measurement of premixed mixture using spark-induced breakdown spectroscopy. *Spectrochimica Acta Part B*, 64 :1085–1092, 2009.
- [65] A.R. Kerstein and C.K. Law. Percolation in combustion sprays i : Transition from cluster combustion to percolate combustion in non-premixed sprays. In *Proceedings of the Combustion Institute*, 1982.
- [66] Y. Ko, R. W. Anderson, and S. Arpacı. Spark ignition of propane-air mixtures near the minimum ignition energy : Part i. an axperimental study. *Combustion and Flame*, 83 :75–87, 1991.
- [67] K. Kumar and C. J. Sung. Laminar flame speeds and extinction limits of preheated n-decane/O<sub>2</sub>/N<sub>2</sub> and n-dodecane/O<sub>2</sub>N<sub>2</sub> mixtures. *Combustion and Flame*, 151, 2007.
- [68] K.K. Kuo. *Principles of Combustion*. John Wiley Sons Inc., 2004.
- [69] N. Lamarque. *Schémas numériques et conditions limites pour la simulation aux grandes échelles de la combustion diphasique dans les foyers d'hélicoptère*. PhD thesis, Université de Toulouse, 2007.
- [70] A. Lang, R. Lecourt, and F. Guliani. Statistic investigation of ignition and additional characterisation of the two-phase flow. In *Proceedings of ASME Turbo Expo 2010*, 2010.
- [71] C. Laurent. *Contribution au développement et à la validation des modèles d'évaporation multi-composant*. PhD thesis, Université de Toulouse, 2008.
- [72] R. Lecourt. Timecop-ae d221a, report on ignition and blow-out results at ambient conditions. Technical report, ONERA, 2008.
- [73] R. Lecourt. Rt 1 calas. Technical report, ONERA, 2009.
- [74] R. Lecourt, G. Linassier, and G. Lavergne. Detailed characterisation of a swirled air/kerosene spray in reactive and non-reactive conditions downstream from an actual turbojet injection system. In *Proceedings of ASME Turbo Expo 2011*, 2011.

- [75] J.P. Legier, T. Poinso, and D. Veynante. Dynamically thickened flame model for premixed and non-premixed turbulent combustion. In *Proc. of the Summer Program, Center for Turbulence Research*, page 157–168, 2000.
- [76] M. Lesieur. *Turbulence in fluids. Fluid mechanics and its applications*. Springer, 2008.
- [77] T.H. Lin, C. K. Law, and S. H. Chung. Theory of laminar flame propagation in off-stoichiometric dilute sprays. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 31 :1023–1034, 1988.
- [78] T.H. Lin and Y.Y. Sheu. Theory of laminar flame propagation in near stoichiometric dilute spray. *Combustion and Flame*, 84 :333–342, 1991.
- [79] G. Linassier. *Etude expérimentale et numérique de l’allumage des turboréacteurs en conditions de haute altitude*. PhD thesis, Université de Toulouse, 2012.
- [80] O. Lucca-Negro and T. O’Doherty. Vortex breakdown : a review. *Progress in Energy and Combustion Science*, 27 :431–481, 2001.
- [81] J. Luche. *Obtention de modèles cinétiques réduits de combustion, Application à un mécanisme du kérosène*. PhD thesis, Université d’Orléans, 2003.
- [82] R. Maly and M. Voguel. Initiation and propagation of flame fronts in lean ch<sub>4</sub>-air mixtures by the three modes of the ignition spark. In *Proceedings of the Combustion Institute*, 1979.
- [83] T. Marchione, S.F. Ahmed, and E. Mastorakos. Ignition of turbulent swirling n-heptane spray flames using single and multiple sparks. *Combustion and Flame*, 156 :166–180, 2009.
- [84] F. R. Menter. Zonal two-equation k-omega turbulence models for aerodynamic flows. *AIAA Paper*, 1993.
- [85] 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.
- [86] G.D. Myers and A.H. Lefebvre. Flame propagation in heterogeneous mixtures of fuel drops and air. Technical report, NASA CR-1 746.44, 1984.
- [87] N. Najid. Techniques de mesures avancées appliquées à la caractérisation de brouillard en aval des systèmes d’injection de turbomachines. Master’s thesis, CNAM, 2011.
- [88] A. Neophytou and E. Mastorakos. Simulations of laminar flame propagation in droplet mists. *Combustion and Flame*, 156 :1627–1640, 2009.
- [89] A. Neophytou, E. Mastorakos, and R.S. Cant. Dns of spark ignition and edge flame propagation in turbulent droplet-laden mixing layers. *Combustion and Flame*, 157 :1071–1086, 2010.
- [90] A. Neophytou, E. Mastorakos, and R.S. Cant. Complex chemistry simulations of spark ignition in turbulent sprays. In *Proceedings of the Combustion Institute 33*, pages 2135–2142, 2011.
- [91] C. Nje Nje. *Etude numérique de l’évaporation instationnaire d’un nuage de gouttes multicomposant*. PhD thesis, Université de Rouen, 2000.
- [92] N. Ouarti. *Modélisation de l’allumage d’un brouillard de carburant dans un foyer de turbomachine*. PhD thesis, Université de Toulouse, 2004.

- [93] N. Patel and S. Menon. Simulation of spray turbulence flame interactions in a lean direct injection combustor. *Combustion and Flame*, 153 :228–257, 2005.
- [94] S. Pischinger and J. B. Heywood. A model for flame kernel development in a spark-ignition engine. In *Symposium (international) on Combustion*, 1990.
- [95] T. Poinso and D. Veynante. *Theoretical and Numerical Combustion*,. R.T. Edwards, 2nd edition, 2005.
- [96] S. Pope. *Turbulent flows*. Cambridge University Press, 2000.
- [97] V. Quintilla. *Étude du rallumage à haute altitude des chambres de combustion de turboréacteurs*. PhD thesis, Université de Toulouse, 2002.
- [98] W. E. Ranz and W. R. Marshall. Evaporation from drops. *Evaporation from drops. Chemical Engineering and Processing*, 48 :173–180, 1952.
- [99] J. Reveillon and L. Vervisch. Analysis of weakly turbulent dilute-spray flames and spray combustion regimes. *Journal of Fluid Mechanics*, 537 :317–347, 2005.
- [100] S. Richard, O. Colin, O. Vermorel, A. Benkenida, C. Angelberger, and D. Veynante. Towards large eddy simulation of combustion in spark ignition engines. In *Proceedings of the combustion institute 31*, 2007.
- [101] E. S. Richardson. *Ignition Modeling for Turbulent Non-Premixed Flows*. PhD thesis, University of Cambridge, 2007.
- [102] O. Rouzaud. Evaporation multicomposant et établissement des propriétés thermophysiques. Technical report, Onera, 2010.
- [103] B. Sainte-Rose. *Simulations numériques d'écoulements réactifs massivement décollés par une approche hybride RANS/LES*. PhD thesis, École Centrale Paris, 2010.
- [104] Marlène Sanjosé. *Évaluation de la méthode Euler-Euler pour la simulation aux grandes échelles des chambres à carburant liquide*. PhD thesis, Université de Toulouse, 2009.
- [105] S.S. Sazhin. Advanced models of fuel droplet heating and evaporation. *Progress in Energy and Combustion Science*, 32 :162–214, 2006.
- [106] G. Selva. *Méthodes itératives pour l'intégration implicite des équations de l'aérothermochimie sur des maillages non-structurés*. PhD thesis, Ecole Centrale Paris, 1998.
- [107] J.-M. Senoner. *Simulation aux Grandes Échelles de l'écoulement diphasique dans un brûleur aéronautique par une approche Euler-Lagrange*. PhD thesis, Université de Toulouse, 2010.
- [108] E. Sher, J. Ben-Ya'ish, and T. Kravchik. On the birth of spark channels. *Combustion and Flame*, 89 :186–194, 1992.
- [109] S. Shy, C. Liu, and W. Shih. Ignition transition in turbulent premixed combustion. *Combustion and Flame*, 157 :341–350, 2010.
- [110] I. Silverman, J. B. Greenberg, and Y. Tambour. Stoichiometry and polydisperse effects in premixed spray flames. *Combustion and Flame*, 93 :97–118, 1993.
- [111] W. Sirignano. *Fluid dynamics and transport of droplets and sprays*. Cambridge University Press, 1999.
- [112] G. Smith, J. Luquea, C. Parka, J. B. Jeffriesa, and D. R. Crosley. Low pressure flame determinations of rate constants for OH(a) and CH(a) chemiluminescence. *Combustion and Flame*, 131 :59–69, 2002.

- [113] S. Suard, P. Haldenwang, and C. Nicoli. Different spreading regimes of spray flames. *C. R. Mecanique*, 332 :387–396, 2004.
- [114] T. Suzuki and H. H. Chiu. Multi droplet combustion on liquid propellants. In *Ninth International Symposium on Space and Technology and Science*, page 145–154, 1971.
- [115] N. Syred. A review of oscillation mechanisms and the role of the precessing vortex core (PVC) in swirl combustion systems. *Progress in Energy and Combustion Science*, 32 :93–161, 2006.
- [116] Z. Tan and R. D. Reitz. An ignition and combustion model based on the level-set method for spark ignition engine multidimensional modeling. *Combustion and Flame*, 145 :1–15, 2006.
- [117] J. J. Thibert. CFD platforms and coupling. *The ONERA Journal Aerospace Lab*, 2, 2011.
- [118] M. Thiele, S. Selle, U. Riedel, J. Warnatz, and U. Maas. Numerical simulation of spark ignition including ionization. In *Proceedings of the combustion institute*, 2000.
- [119] K. Truffin and O. Colin. TIMECOP-AE D15d, report on the application of the spark ignition model to the mercato aero-engine ignition system. Technical report, IFPEN, 2010.
- [120] Versaevel. *Combustion laminaire diphasique : étude théorique et expérimentale*. PhD thesis, Ecole Centrale Paris, 1996.
- [121] A. P. Wandel, N. Chakraborty, and E. Mastorakos. Direct numerical simulations of turbulent flame expansion in fine sprays. In *Proceedings of the Combustion Institute 32*, pages 2283–2290, 2009.
- [122] J. Weckering, A. Sadiki, J. Janickay, and E. Mastorakos. Investigations of ignition probability of a forced ignited turbulent methane jet using les. In *V European Conference on Computational Fluid Dynamics ECCOMAS CFD 2010*, 2010.
- [123] C.K Westbrook and F.L Dryer. Simplified reaction mechanisms for the oxydation of hydrocarbon fuels in flames. *Combustion Science and Technology*, 27 :31–43, 1981.
- [124] F.A. Williams. *Combustion Theory*. Benjamin Cummings, Menlo Park, CA, 1985.
- [125] J. Yang, C. Yukao, J. Whang, , and S. Wong. Experiments on the ignition of monocomponent and bicomponent fuel droplets in convective flow. *Combustion and Flame*, 123 :266–274, 2000.
- [126] O. Yasar. A new ignition model for spark-ignited engine simulations. *Parallel computing*, 27 :179–200, 2001.

## **Influence de l'évaporation de gouttes multicomposant sur la combustion et des effets diphasiques sur l'allumage d'un foyer aéronautique**

La conception de nouveaux moteurs impose de respecter des normes de sécurité concernant les performances d'allumage et de ré-allumage en conditions critiques. Des campagnes d'essais étant onéreuses, les industriels cherchent donc à disposer d'outils numériques fiables. Afin d'améliorer la simulation des écoulements, le caractère multicomposant du carburant doit être pris en compte. L'objectif de cette thèse est d'étudier l'influence de l'évaporation d'un brouillard de gouttes sur un écoulement réactif. Pour cela, une étude de la propagation d'une flamme laminaire 1D est réalisée à l'aide d'un code de calcul multiphysique (CEDRE). Un train continu de gouttes monodisperse est injecté, les gouttes étant mono ou bicomposant. L'influence de la dynamique d'évaporation sur la combustion est étudiée. Deux cinétiques chimiques réduites multicomposant sont comparées. La composition, le diamètre et la richesse initiale des gouttes ont un impact sur la structure de flamme, la vitesse de flamme et la composition des gaz brûlés. Ensuite, l'effet de l'évaporation est étudié en phase d'allumage pour un brouillard de gouttes polydisperses monocomposant avec un modèle de noyau d'allumage local. L'écoulement instationnaire non-réactif dans un secteur de chambre industriel (MERCATO) est calculé avec une approche LES. Le caractère instationnaire, voire périodique, de la phase dispersée est mis en évidence en certains points de l'écoulement. Les résultats, associés au modèle d'allumage et à des critères, sont utilisés pour réaliser une carte de probabilité d'allumage. Des essais de calcul d'allumage complet de la chambre sont réalisés. Les résultats indiquent une surestimation des termes sources liés à l'évaporation de la phase dispersée et à la combustion.

**Mots-clés** : gouttes, évaporation, multicomposant, combustion, allumage, écoulement diphasique, turbomachines, simulation aux grandes échelles

### **Influence of multicomponent droplets vaporization on combustion and multiphase flow effects on the ignition of a aircraft engine**

The design of new aircraft engines needs in particular to comply with safety standards for the performance of stabilized combustion and ignition or re-ignition under critical conditions. Experimental campaigns are expensive, so numerical tools are needed. To improve the accuracy of the models used to simulate flow, the multicomponent nature of the fuel must be taken into account, whether it is kerosene or alternative fuel. The objective of this thesis is to study the influence of a droplet mist vaporization on a reactive flow. For this, an academic study of the propagation of a 1D laminar flame is performed using a CFD code {CEDRE}. A continuous stream of monodisperse droplets is injected, the droplets being mono or bicomponent. The influence of the dynamics of evaporation on combustion is particularly studied. Two reduced multicomponent chemical kinetics are compared. The composition, the diameter and the initial equivalent ratio of droplets have an impact on the structure of the flame, the flame speed and composition of the burnt gases. A local ignition kernel model is applied to study the influence of vaporization on ignition in the case of monocomponent, polydisperse droplets. Experimental data are available for a monosector combustion chamber (MERCATO) so the non-reactive unsteady flow is simulated with a LES approach. The unsteady, sometimes periodic, nature of the dispersed phase is highlighted in some points of the flow. A ignition model is applied to instantaneous flow fields and criteria are analysed to realise an ignition probability map which validates the approach. Finally, ignition of a combustion chamber is tested. The results point out an overestimation of source terms related to the evaporation of the dispersed phase and combustion.

**Keywords** : droplets, vaporization, multicomponent, combustion, ignition, multiphase flow, aircraft engines, large eddy simulation