

THÈSE

présentée
pour obtenir le titre de
DOCTEUR DE L'INSTITUT NATIONAL POLYTECHNIQUE DE TOULOUSE
École doctorale : Transferts, Dynamique des fluides, énergétique et procédés
Spécialité : Energétique et Transferts
par

Gaëtan DESOUTTER

Sujet de la thèse :

**ETUDE NUMERIQUE DE LA PROPAGATION
D'UNE FLAMME SOUS L'INFLUENCE D'UN FILM LIQUIDE
DE CARBURANT SUR LA PAROI**

Soutenue le 15 juin 2007 devant le jury composé de :

<i>Mmes</i>	<i>Dany ESCUDIE</i>	<i>Président</i>
	<i>Bénédicte CUENOT</i>	<i>Directeur de thèse</i>
<i>MM.</i>	<i>Laurent DUCHAMP DE LAGENESTE</i>	<i>Membre</i>
	<i>Chawki HABCHI</i>	<i>Membre</i>
	<i>Franck NICOUD</i>	<i>Rapporteur</i>
	<i>Frédéric RAVET</i>	<i>Membre</i>
	<i>Julien REVEILLON</i>	<i>Rapporteur</i>

Remerciements

Je tiens à remercier Chawki Habchi pour son accueil chaleureux à l'IFP et en dehors ainsi que son soutien sans faille. J'exprime également ma gratitude à Thierry Poinot et Bénédicte Cuenot pour leurs conseils précieux et leur direction du travail.

J'adresse également un grand merci à toute l'équipe TAE de l'IFP pour sa convivialité et sa disponibilité. Je souhaite plus particulièrement remercier mes amis thésards grâce auxquels j'ai passé trois années très agréables.

Résumé

Au cours de ce travail de thèse, nous avons étudié l'interaction flamme-film liquide à l'aide d'analyses numériques et de nombreux développements théoriques. L'objectif est de maîtriser les mécanismes de base qui entrent en jeu lors de l'interaction de la flamme avec un film liquide, en particulier son évaporation à l'approche de la flamme et son impact sur la structure de cette dernière. Dans un premier temps, nous avons effectué des simulations numériques directes (DNS) de cette interaction en régime laminaire afin de cerner ses mécanismes fondamentaux. L'analyse des résultats a permis de mettre en évidence que l'interaction flamme-paroi avec film liquide est gouvernée par son évaporation contrairement à l'interaction flamme-paroi sèche qui est pilotée par les pertes thermiques dans la paroi. En effet, en régime laminaire la flamme s'éteint à cause des richesses trop élevées qu'elle rencontre et non pas à cause des pertes thermiques. Nous avons également montré que les distances de coïncement sont beaucoup plus grandes que pour l'interaction flamme paroi sèche et que la cinétique chimique a peu d'influence sur l'interaction flamme-film liquide.

Dans une seconde partie, nous avons donc travaillé sur l'étude des mécanismes de l'évaporation d'un film liquide. Pour ce faire, nous avons tout d'abord mis en évidence l'importance des propriétés thermodynamiques (qui évoluent avec la composition du mélange) sur la modélisation de l'évaporation. Par la suite, les modèles de film liquide développés pour effectuer les simulations numériques directes d'interaction flamme-film liquide en régime laminaire ont été validés. Ces modèles ont ainsi pu servir de base pour étudier l'évaporation d'un film liquide en régime turbulent en effectuant des simulations numériques directes tridimensionnelles en canal périodique. Nous avons ainsi mis en évidence le changement de structure de la couche limite turbulente lorsque celle-ci subit l'influence conjuguée de forts gradients de densité et de viscosité et de la vitesse de Stephan engendrée par l'évaporation d'un film liquide. En particulier, il a été montré que l'évaporation souffle la couche limite et réduit ainsi les flux thermiques et la contrainte de cisaillement à la surface du film liquide. Ces observations ont permis de développer de nouvelles lois de paroi valables pour une gamme étendue de vitesse d'évaporation et de gradients de densité et de viscosité.

Dans une troisième partie, un modèle d'évaporation de film liquide mono composant a été développé pour le formalisme RANS (Reynolds Average Navier Stokes) en intégrant au maximum les contraintes liés aux moteurs automobiles. Les équations du modèle sont basées sur les lois de paroi développées puis ajustées avec la DNS. Les phases transitoires de la thermique dans le film liquide sont également prises en compte. Par ailleurs, ce modèle a été implanté dans le code de calcul IFP-C3D en utilisant une méthodologie innovante d'intégration des lois de paroi. Cette méthodologie consiste à garantir la conservation de la masse et de l'énergie présente dans une maille paroi lorsque les profils de fraction massique de fuel et de température fournis par les lois de parois sont intégrés. Enfin, le modèle a été partiellement validé en montrant un très bon accord avec les résultats de DNS.

Dans une quatrième partie, un modèle d'interaction d'une flamme de prémélange avec un film liquide a été développé en calculant une vitesse de consommation moyenne de flamme qui tient à la fois compte des pertes thermiques éventuelles de la flamme dans le film liquide et du profil de richesse dans la couche limite située au-dessus du film liquide.

Enfin, dans la dernière partie, une étude paramétrique d'un moteur essence et d'un moteur diesel a été effectuée avec le code de calcul IFP-C3D. Elle a confirmé que la

température de paroi est un paramètre déterminant sur la formation et l'évaporation du film liquide et donc les émissions d'hydrocarbures imbrûlés (HC). Plus cette température est grande, plus le film liquide s'évapore rapidement. Cela montre qu'il est donc nécessaire de connaître avec précision le champ de température sur la surface interne de la chambre de combustion afin d'assurer une précision optimale des résultats des calculs. Cette étude a également permis de mettre en évidence l'existence d'une flamme de diffusion alimentée par l'évaporation du film liquide lors de la détente. Enfin, la comparaison des courbes de pression entre les calculs et un moteur ayant tourné au banc montre que le modèle d'évaporation de film liquide développé au cours de cette thèse améliore la prédiction des résultats.

Mots clés :

Simulation Numérique Directe (DNS), RANS, Flamme, Film liquide, Paroi, évaporation, lois de paroi, moteurs à combustion interne

Table des matières

Introduction	12
1 Bases de l'interaction flamme paroi	14
1.1 Introduction	14
1.2 Calcul monodimensionnel laminaire	14
1.2.1 Présentation du code de calcul NTMIX3D	14
1.2.2 Configuration et paramètres du calcul	15
1.2.3 Résultats et mécanisme de l'interaction flamme paroi	16
1.3 Approche de l'interaction flamme-paroi en régime turbulent	19
2 Aspects théoriques de l'interaction flamme film liquide	20
2.1 Configuration et hypothèses	20
2.2 Approche qualitative de l'interaction flamme film liquide	21
2.2.1 Scénario envisagé	21
2.2.2 Analyse des grandeurs caractéristiques mises en jeu	21
A - Temps caractéristiques de l'interaction flamme film liquide	22
B - Aspect énergétique de l'interaction flamme film liquide	23
2.3 Modélisation du film liquide	24
2.3.1 Hypothèses conditionnant le modèle de film liquide	24
2.3.2 Conditions de saturation à la surface du film	25
2.3.3 Résolution de l'équation de la chaleur dans le film liquide	27
A - Méthode intégrale	27
B - Résolution de l'équation de la chaleur par différences finies	30
2.3.4 Equations gouvernant la masse surfacique $m(t)$ et l'épaisseur $h(t)$ du film liquide :	31
2.3.5 Systèmes d'équations couplées de la phase liquide :	31
2.3.6 Algorithmes des modèles de film liquide codé dans NTMIX3D	31
A - Algorithme correspondant à la méthode intégrale	31
B - Algorithme correspondant à la méthode par différences finies	36
3 Résultats comparatifs de DNS monodimensionnelles effectuées avec NTMIX3D	38
3.1 Paramètres des différents calculs	39
3.1.1 Chimie	39

3.1.2	Maillage et domaine de calcul	39
3.1.3	Conditions limites	39
3.1.4	Condition initiale	40
3.2	Résultats pour l'évaporation d'un film sans combustion	41
3.3	Résultats pour l'interaction flamme film liquide	45
3.3.1	Déroulement pratique de l'interaction flamme paroi avec film liquide	45
3.3.2	Calcul de référence : Interaction flamme paroi sèche	47
3.3.3	Analyse de l'interaction flamme film liquide	47
3.3.4	Comparaison de l'interaction flamme-paroi sèche et de l'interaction flamme-paroi avec film liquide pour différentes températures de paroi T_p	51
3.3.5	Influence du temps d'existence du film liquide avant l'interaction.	59
4	Influence des propriétés thermodynamiques variables du gaz sur l'évaporation du film liquide.	61
4.1	Le code de calcul NTMIX_CHEMKIN	61
4.2	Le modèle de film liquide dans NTMIX_CHEMKIN	62
4.2.1	Equations du modèle de film liquide de NTMIX_CHEMKIN	63
4.2.2	Algorithme du modèle de film liquide dans NTMIX_CHEMKIN	65
4.3	Comparaison de l'évaporation d'un film liquide en thermochimie simple et en thermochimie complexe	68
5	Validations des modèles de film liquide codés dans NTMIX3D et NTMIX_CHEMKIN pour l'évaporation en configuration monodimensionnelle	75
5.1	Mesures expérimentales de Beverley	75
5.2	Développement analytique.	79
5.3	Comparaison des résultats numériques, analytiques et expérimentaux.	80
5.3.1	Paramètres des différents calculs	80
5.3.2	Résultats et conclusions	82
6	DNS d'évaporation de film liquide dans un canal 3D turbulent	85
6.1	Introduction	85
6.2	Simulation Numérique Directe d'un canal turbulent	86
6.2.1	Outils numériques	86
6.2.2	Configuration	87
6.2.3	Termes sources	88
6.2.4	Modélisation du film liquide	90
6.3	Ecoulement isotherme sans évaporation	91
6.3.1	Description paramétrique	91
6.3.2	Résultats	91
A	Spectre d'énergie cinétique turbulente et fonctions d'auto-corrélation spatiale de vitesse	91
B	Champs moyens	93

	C - Fluctuations	95
6.3.3	Conclusion	97
6.4	Écoulement anisotherme sans évaporation	98
6.4.1	Description paramétrique	98
6.4.2	Résultats	98
	A - Spectre d'énergie cinétique turbulente et fonctions d'auto-corrélation spatiale de vitesse	98
	B - Champs moyens	100
	C - Fluctuations de vitesse	103
6.4.3	Conclusion	108
6.5	Présentation des cas d'écoulements avec évaporation d'un film liquide	108
6.5.1	Description paramétrique	108
6.5.2	Caractérisation des différents cas d'évaporation présentés	111
6.6	Résultats : analyse physique du couplage mutuel entre l'évaporation d'un film liquide et la couche limite turbulente	112
6.6.1	Profils de vitesse moyenne axiale	112
6.6.2	Analyse de l'équation de quantité de mouvement axiale moyenne	113
6.6.3	Fluctuations	119
	A - Fluctuations de vitesse	119
	B - Fluctuations de température et de fraction massique de fuel	122
	C - Fluctuations de vortacité	124
6.6.4	Analyse de la corrélation des fluctuations de vortacité avec la vitesse de Stephan	127
6.7	Développement de lois de paroi pour l'évaporation d'un film liquide	131
6.7.1	Présentation de la construction analytique de lois de paroi	131
6.7.2	Equations de la phase gazeuse	132
6.7.3	Hypothèses de résolution	133
6.7.4	Conservation de la masse du gaz	133
6.7.5	Conservation de la quantité de mouvement moyenne	133
	A - Sous-couche inertielle turbulente	134
	B - Sous-couche laminaire	135
	C - Bilan	135
6.7.6	Conservation de la masse de fuel	136
	A - Sous-couche inertielle turbulente	136
	B - Sous-couche laminaire	137
	C - Bilan	138
6.7.7	Conservation de l'enthalpie moyenne	138
	A - Sous-couche inertielle turbulente	139
	B - Sous-couche laminaire	139
	C - Bilan	140
6.7.8	Amélioration des lois de paroi grâce aux DNS	140
6.7.9	Profils de vitesse axiale, température et fraction massique de fuel moyenne exprimées avec les nouvelles variables effectives	141

6.7.10	Prise en compte de la compressibilité : formulation en variables LnKc effectives	143
6.7.11	Comparaison des nouvelles lois de paroi avec les DNS	144
6.8	Conclusions	151
7	Modèle d'évaporation de film liquide pour le RANS	152
7.1	Modèle global de film liquide dans IFP-C3D	154
7.2	Conservation de la masse lors de la formation du film liquide	156
7.3	Equation de la température moyenne d'une particule de film liquide $\langle \bar{T}_{l,p} \rangle$	157
7.3.1	Equation gouvernant la température moyenne $\langle \bar{T}_{l,p} \rangle$ d'une particule appartenant au film liquide	158
7.3.2	Détermination de la température moyenne $\langle \bar{T}_{l,p} \rangle$ d'une particule qui impacte et rejoint le film liquide	160
7.4	Profil de température dans le film liquide	160
7.4.1	Profil de température dans le film liquide à l'équilibre thermique . .	161
7.4.2	Profil de température dans le film liquide hors équilibre thermique .	162
	A - Cas 1 : pénétration de la chaleur de la paroi vers la surface du film	164
	B - Cas 2 : pénétration de la chaleur de la surface du film vers la paroi	165
	C - Température moyenne $\langle \bar{T}_{l,p} \rangle$ d'une particule film p en fonction de $\langle \bar{T}_{l,p,\delta_1} \rangle$ et $\langle \bar{T}_{l,p,\delta_2} \rangle$	166
7.5	Calcul du débit évaporé \dot{M}	167
7.5.1	Méthodologie d'intégration des lois de paroi dans un code de calcul	168
7.5.2	Calcul de la température d'interface liquide-gaz T_s et du débit éva- poré \dot{M}	171
	A - Cas d'une pénétration complète de chaleur dans le film liquide : équilibre thermique	172
	B - Cas d'une pénétration incomplète de chaleur dans le film liquide : phase transitoire	173
7.6	Gestion des phases transitoires dans les couches limites thermique et massique	173
7.7	Validation du modèle de film liquide implémenté dans le code de calcul IFP-C3D	177
7.7.1	Méthodologie	177
7.7.2	Analyse des résultats	178
7.8	Conclusions	180
8	Modèle de combustion RANS pour l'interaction flamme film liquide	181
8.1	Introduction	181
8.2	Equation du taux de réaction d'une flamme de prémélange dans un forma- lisme RANS	181
8.3	Modèle pour la vitesse de flamme laminaire S_l	183
8.4	Conclusion	185

9	Application à des cas moteurs	186
9.1	Introduction	186
9.2	Moteur essence	186
9.2.1	Présentation	186
9.2.2	Simulations	187
9.2.3	Résultats	189
	A - Description qualitative	189
	B - Analyse des courbes de pression moyenne dans le cylindre en fonction de l'angle vilebrequin	199
	C - Analyse du film liquide	202
	D - Analyse des niveaux de polluants	209
9.2.4	Conclusions	210
9.3	Moteur diesel	211
9.3.1	Présentation	211
9.3.2	Simulations	211
9.3.3	Résultats	213
	A - Description qualitative	213
	B - Analyse des courbes de pression moyenne dans le cylindre en fonction de l'angle vilebrequin	222
	C - Analyse du film liquide	226
	D - Analyse des niveaux de polluants	230
9.3.4	Conclusions	231
9.4	Conclusions	232
	Conclusion	233
	Bibliographie	239

Nomenclature

Symboles	Signification
0	Initial
f	Flamme
F	Fuel
g	Gaz
k	Espèce k
l	Liquide
L	Laminaire
l,p	Particule film p
ox	Oxygène
P	Paroi
Q	Coincement (Quenching en anglais)
ref	Reference
s	Interface liquide gaz
t	Turbulent
∞	A l'extérieur de la couche limite
α	Face α du maillage sur la paroi

TAB. 1 – Convention des indices

Symbole	Signification
d	Epaisseur caractéristique de flamme $d = \left(\frac{\lambda}{\rho C_P S_l} \right)^0$
Pe	Peclet (distance adimensionnée (paroi ou film liquide)-flamme) $Pe = \frac{\delta}{d}$
Pe_Q	Peclet de coincement (distance de coincement adimensionnée) $Pe_Q = \frac{\delta_Q}{d}$
S_L	Vitesse de flamme laminaire
t_f	Temps caractéristique de flamme $t_f = \frac{d}{S_l^0}$
δ	Distance flamme paroi ou flamme film liquide
δ_L	Epaisseur de flamme laminaire
δ_Q	Distance de coincement
φ_f	Flux de chaleur caractéristique de flamme $\varphi_f = (\rho C_P S_l \Delta T)^0$
φ	Flux de chaleur pariétal
ϕ	Flux de chaleur pariétal réduit $\phi = \frac{\varphi}{\varphi_f}$
ϕ_Q	Flux de chaleur pariétal réduit de coincement

TAB. 2 – Convention des symboles de l'interaction flamme paroi

Symbole	Signification
A_α	Aire de la face α
C_P	Capacité calorifique à pression constante
C_v	Capacité calorifique à volume constant
D_k	Coefficient de diffusion de l'espèce gazeuse k
D_k^T	Coefficient de diffusion thermique de l'espèce gazeuse k
D_{th}	Coefficient de diffusion thermique dans le liquide
D_t	Coefficient de diffusion turbulent des espèces gazeuses
GFR	Gas Flow Rate : débit de gaz entrant dans l'expérience de Beverley
k	Constante de Karmann
H_k	Enthalpie massique de l'espèce gazeuse k
L	Taille du domaine de calcul
Le	Nombre de Lewis
N_{spec}	Nombre d'espèces dans le mélange gazeux
p	Pression
Pr	Nombre de Prandtl
R	Constante des gaz parfaits
Sc	Nombre de Schmidt
T	Température
T_c	Température critique
u	Vitesse
u_τ	Vitesse de cisaillement
E_{int}	Energie interne
V_k	Vitesse de diffusion de l'espèce gazeuse k
v_s	vitesse de Stephan
W	Masse molaire du mélange gazeux
W_k	Masse molaire de l'espèce gazeuse k
X_k	Fraction molaire de l'espèce gazeuse k
Y_k	Fraction massique de l'espèce gazeuse k
z_L	Distance entre la surface du film liquide et la transition laminaire-turbulent
α	Coefficient de diffusion thermique dans le gaz
$\varphi_{g,s}$	Flux de chaleur gazeux à l'interface liquide-gaz
$\Delta f h_0$	Enthalpie de formation
ΔL	Taille de la maille paroi selon la direction normale à la paroi
Δt	Pas de temps
ΔT	Ecart de température entre les gaz frais et les gaz brûlés
λ	Conductivité thermique
ν	Viscosité cinématique
ρ	Densité
τ	Contrainte de cisaillement
$\tau_{g,s}$	Contrainte de cisaillement à l'interface liquide-gaz

TAB. 3 – Convention des symboles généraux

Symbole	Signification
A_p	Aire occupée sur la paroi par la particule film liquide p
E_{cond}	Energie fournie par conduction au film liquide
E_{film}	Energie nécessaire pour évaporer complètement le film liquide
E_{flamme}	Energie fournie par la flamme au film liquide
h	Epaisseur du film liquide
L_V	Chaleur latente de vaporisation massique
m	Masse surfacique du film liquide
\dot{M}	Débit d'évaporation de Fuel à l'interface liquide gaz
M_α	Terme source de masse comprenant les gouttes qui rejoignent la face α pendant le temps dt par impact uniquement
nap_α	Nombre de particules film présentes sur la face α avant les impacts éventuels et après le mouvement des particules
np_α	Nombre de particules qui impactent la face α pendant dt
Q_α	Energie interne apportée par l'impact des gouttes du spray et par le splashing
S	Surface du film liquide
t_{cond}	Temps de conduction thermique dans le gaz
t_{cycle}	Temps de cycle moteur
t_{final}	Temps final de la simulation
t_{int}	Temps auquel la flamme interagit avec le film liquide
t_W	Temps de pénétration de la chaleur dans le film liquide
T_0	Température initiale des gaz frais et du film liquide
$\bar{T}_{l,p}$	Température moyenne d'une particule film liquide p
$T_{\delta,p}$	Température du film non atteinte par la pénétration de la chaleur
V_p	Volume d'une particule film liquide p
Y_F^s	Fraction massique de Fuel à l'interface liquide gaz
$\delta(t)$	Profondeur de pénétration de la chaleur dans le film liquide
φ_l	Flux de chaleur interfacial dans le liquide
φ_g	Flux de chaleur interfacial dans le gaz

TAB. 4 – Convention des symboles du modèle de film liquide

Introduction

Dans les moteurs à combustion interne, la transformation de l'énergie thermique (combustion) en énergie mécanique passe par la présence de parois mobiles (i.e. piston sur la figure 1) avec lesquelles la flamme interagit. Dans les moteurs à injection indirecte, cette interaction se déroule en général avec des parois sèches et ce phénomène a déjà été abondamment traité dans la littérature [11]. Cependant, la nécessité de réduire la consommation en carburant et de limiter les émissions polluantes conduit les constructeurs automobiles à développer de nouvelles stratégies de combustion. Parmi celles-ci, le moteur à injection directe essence (IDE) semble être une solution prometteuse. Malheureusement, l'injection directe du carburant dans la chambre de combustion entraîne parfois des dépôts importants qui engendrent des émissions d'hydrocarbures imbrûlés (HC) inhabituelles. Dans la majorité des modes de fonctionnement des moteurs IDE et particulièrement pendant le démarrage du moteur, le jet de carburant impacte directement le piston créant ainsi un film liquide avec lequel la flamme va interagir comme le montre le schéma de la figure 1. Ce mécanisme constitue l'une des sources de productions de HC et de fumée. A notre connaissance, il n'existe pratiquement pas de travaux concernant l'étude du comportement de la flamme à l'approche du dépôt de carburant liquide. L'objectif de cette thèse est donc à la fois de comprendre les mécanismes qui entrent en jeu dans l'interaction flamme-film liquide et d'établir un modèle permettant de tenir compte de cette interaction dans le code de calcul IFP-C3D dédié à la simulation numérique des moteurs automobiles.

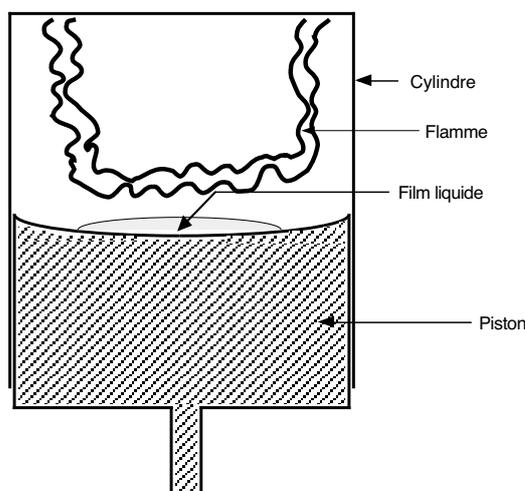


FIG. 1 – Dépôt d'un film liquide de carburant dans les moteurs à injection directe essence.

L'interaction flamme-paroi sèche se déroule près des parois dans des zones de l'ordre de l'épaisseur de flamme laminaire si bien que la turbulence n'intervient pas directement.

Par ailleurs, une flamme turbulente peut être considérée localement laminaire lorsque la combustion correspond au régime de flammelettes pour lequel la flamme plissée turbulente est décomposée en une multitude de flammes laminaires. La compréhension du mécanisme d'interaction flamme-paroi sèche en régime laminaire est donc très utile pour l'approche du régime turbulent. Une démarche similaire a donc été suivie en ce qui concerne l'interaction flamme-film liquide. C'est pourquoi, les premières simulations numériques ont été réalisées en régime laminaire.

Le premier chapitre est consacré à un bref rappel des mécanismes de l'interaction flamme-paroi sèche à l'aide de simulations numériques directes (DNS) monodimensionnelles. Cela permet de constituer une référence pour les calculs d'interaction flamme-film liquide. Dans le deuxième chapitre, nous présentons le modèle théorique de film liquide qui a été développé dans le code de calcul NTMIX3D afin de réaliser des simulations numériques directes (DNS) monodimensionnelles d'interaction flamme-film liquide dont les résultats sont détaillés dans le troisième chapitre. L'analyse des différents calculs réalisés en régime laminaire a permis de mieux comprendre les mécanismes de l'interaction flamme-film liquide et ainsi d'orienter les choix de modélisation à effectuer. Les résultats montrent en effet que l'interaction flamme-film liquide est avant tout gouverné par la formation du mélange constitué d'air et de vapeur de carburant et donc par l'évaporation du film liquide.

C'est pourquoi, les chapitres suivants sont essentiellement consacrés à la modélisation de l'évaporation d'un film liquide dans les moteurs automobiles. Ainsi, nous analysons dans le quatrième chapitre l'influence de la thermochimie sur l'évaporation du film liquide à l'aide du code calcul NTMIX_CHEMKIN. Une validation des modèles de film liquide développés dans les codes de calcul NTMIX3D et NTMIX_CHEMKIN à l'aide de l'expérience de Beverley [9] est proposée dans le cinquième chapitre. La comparaison de l'évaporation fournis par les modèles de film liquide avec les mesures expérimentales met en évidence un très bon accord quantitatif des résultats.

Fort des observations effectués en régime laminaire, le sixième chapitre aborde les bases de l'évaporation d'un film liquide en régime turbulent à l'aide de simulations numériques directes tridimensionnelles en canal périodique effectuées avec le code de calcul AVBP. Les mécanismes physiques de l'évaporation sont analysés et des lois de parois tenant compte à la fois des forts gradients de densité dans la couche limite située au dessus de la surface du film et du soufflage provoqué par l'évaporation sont développées. Ces nouvelles lois de paroi constituent la pierre angulaire du modèle d'évaporation de film liquide développé pour le formalisme RANS (Reynolds Average Navier Stokes) et implanté dans le code de calcul IFP-C3D. La présentation et la validation de ce nouveau modèle font l'objet du septième chapitre. Dans le huitième chapitre, nous montrons de quelle manière le modèle d'évaporation de film liquide est couplé avec la combustion dans le code de calcul IFP-C3D.

Finalement, le neuvième chapitre est consacré à l'étude de cas moteurs essence et diesel afin de mieux comprendre le phénomène d'interaction flamme-film liquide dans les moteurs à combustion interne. Ce chapitre constitue également l'occasion d'effectuer des comparaisons entre les modèles développés dans cette étude et le modèle d'évaporation de film liquide développé par O'Rourke et Amsden [45], [46] puis repris et amélioré par Habchi en 2004 [25]. Ces comparaisons permettent d'évaluer l'apport des développements effectués au cours de ce travail dans le cadre d'applications industrielles.

Chapitre 1

Bases de l'interaction flamme paroi

1.1 Introduction

Il existe trois configurations possibles d'interaction flamme laminaire paroi données par le schéma de la figure 1.1. Ces configurations ne donnent pas lieu à la même valeur de la distance de coïncement δ_Q . La configuration (a) dite HOQ (Head On Quenching) correspond à une flamme interagissant normalement au mur alors que la configuration (b) correspond à une interaction parallèle de la flamme dite SWQ (Side Wall Quenching). La distance de coïncement δ_Q est généralement plus faible en configuration HOQ qu'en SWQ [11, 51]. La configuration (c) peut empêcher toute flamme de passer dans le tube si son rayon est plus petit que la distance de coïncement de la flamme.

Au préalable à l'interaction flamme film liquide, on a réalisé une simulation numérique directe (DNS) d'un cas académique d'interaction entre une flamme monodimensionnelle laminaire et une paroi froide isotherme. Pour cela on a choisit une configuration HOQ puisque c'est la plus simple à simuler et la mieux étudié dans la littérature [11].

1.2 Calcul monodimensionnel laminaire

1.2.1 Présentation du code de calcul NTMIX3D

NTMIX3D est un code compressible de simulation numérique directe (DNS) qui résout les équations de conservation de la mécanique des fluides ainsi que les équations de conservation des espèces avec un terme source de combustion. Ce terme source de combustion est calculé avec une chimie simple. Les propriétés thermodynamiques sont indépendantes de la composition du mélange gazeux et pour certaines de la température. La précision du schéma spatial est du 6ème ordre et celle du schéma temporel est du 3ème ordre de type Runge-Kutta (RK3). Il faut également savoir que NTMIX3D est un code adimensionnel et que tous les résultats présentés dans cette étude ont été redimensionnés afin de les rendre exploitables, à l'exception de Certains, donnés sans dimension pour des raisons d'interprétation physique. C'est le cas des distances, données en terme d'épaisseur caractéristique de flamme $d = \left(\frac{\lambda}{\rho C_P S_i}\right)^0$, des temps adimensionnés par le de temps de

flamme $t_f = \frac{d}{S_L^0}$ et des flux de chaleur pariétaux donnés en terme de puissance surfacique de référence de la flamme $\varphi_f = (\rho C_P S_L \Delta T)^0$ où ΔT est l'écart de température entre les gaz frais et les gaz brûlés.

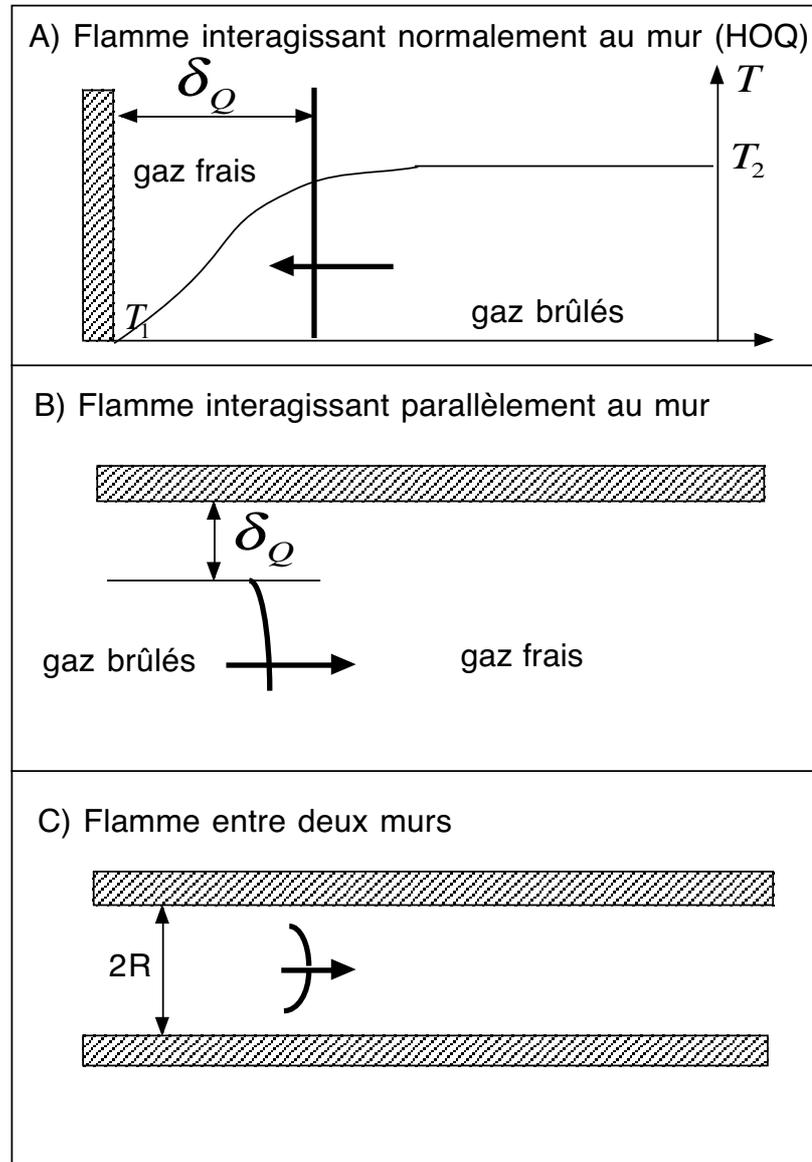


FIG. 1.1 – Configurations flamme laminaire-paroi.

1.2.2 Configuration et paramètres du calcul

D'après les différentes études menées sur l'interaction flamme paroi [11, 51], celle-ci est contrôlée au premier ordre par la thermique, c'est à dire les pertes thermiques dans la paroi et seulement au second ordre par la chimie, c'est à dire la composition des gaz et les mécanismes réactionnels. C'est pourquoi dans notre calcul, on utilise une chimie simple à une étape et une espèce (flamme académique avec une vitesse de flamme $S_L = 3.4 m.s^{-1}$ et une épaisseur de flamme $\delta_L = 0.03 mm$). Par ailleurs, la paroi ainsi que les gaz frais sont à la température de 300 K. Le calcul est réalisé dans une boîte monodimensionnelle de longueur $L=0.35$ mm avec 801 points de telle sorte que la flamme soit bien résolue. La

configuration du calcul est donnée sur la figure 1.2 :

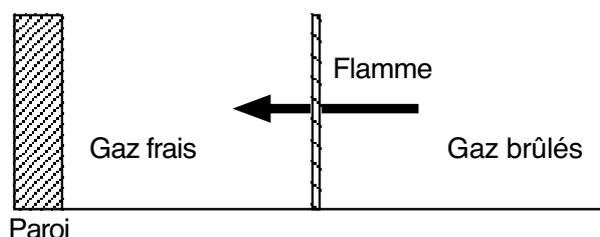


FIG. 1.2 – Configuration de l'interaction flamme paroi sèche et inerte

1.2.3 Résultats et mécanisme de l'interaction flamme paroi

Le taux de réaction de la flamme, la température ainsi que la fraction massique de fuel sont donnés pour différents temps, respectivement sur les figures 1.3, 1.4 et 1.5.

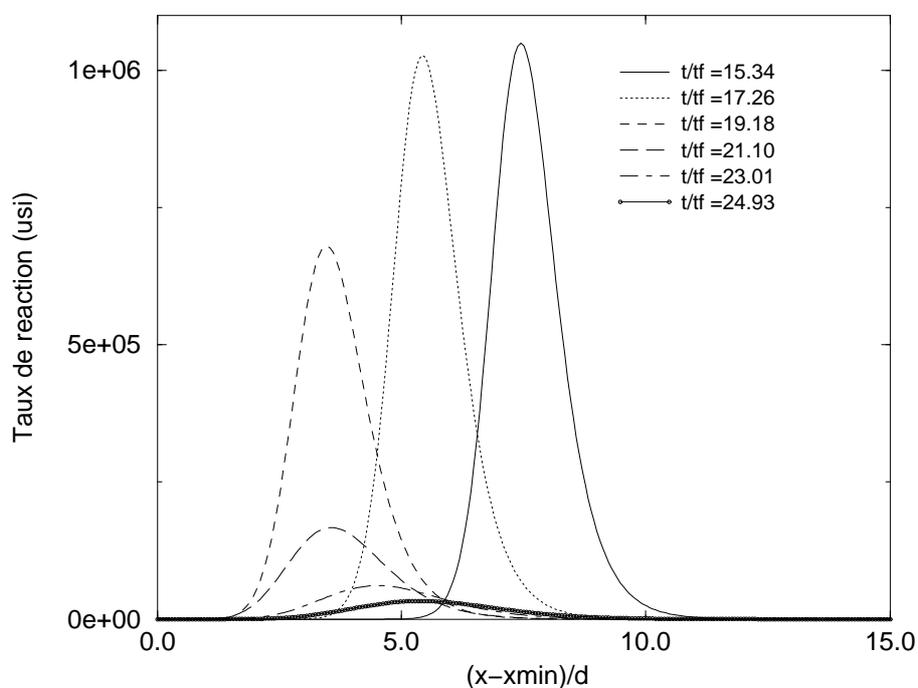


FIG. 1.3 – Taux de réaction en fonction de la distance à la paroi à différents moments de l'interaction.

Sur les trois figures, la flamme se propage de la droite vers la gauche où se situe le mur.

D'après la figure. 1.3, on constate que lorsque la flamme arrive à une certaine distance du mur, elle commence à s'éteindre comme en atteste le taux de réaction. Par la suite, lorsque la flamme est presque éteinte, on constate qu'elle s'éloigne du mur. Il existe donc une distance minimale, dite de coincement δ_Q entre le mur et la flamme, typique du mécanisme d'interaction flamme-paroi. D'après la figure 1.4, on constate que lorsque la flamme s'approche du mur froid, il existe un gradient de température à la paroi très important puisque la paroi est maintenue à température constante. Ce gradient est à l'origine du flux thermique à la paroi. La flamme perd donc de la chaleur et finit par quasiment s'éteindre. Par la suite, les gaz frais restant près de la paroi diffusent vers la

flamme comme en atteste la figure 1.5. Ainsi, la flamme ne s'éteint pas complètement mais recule.

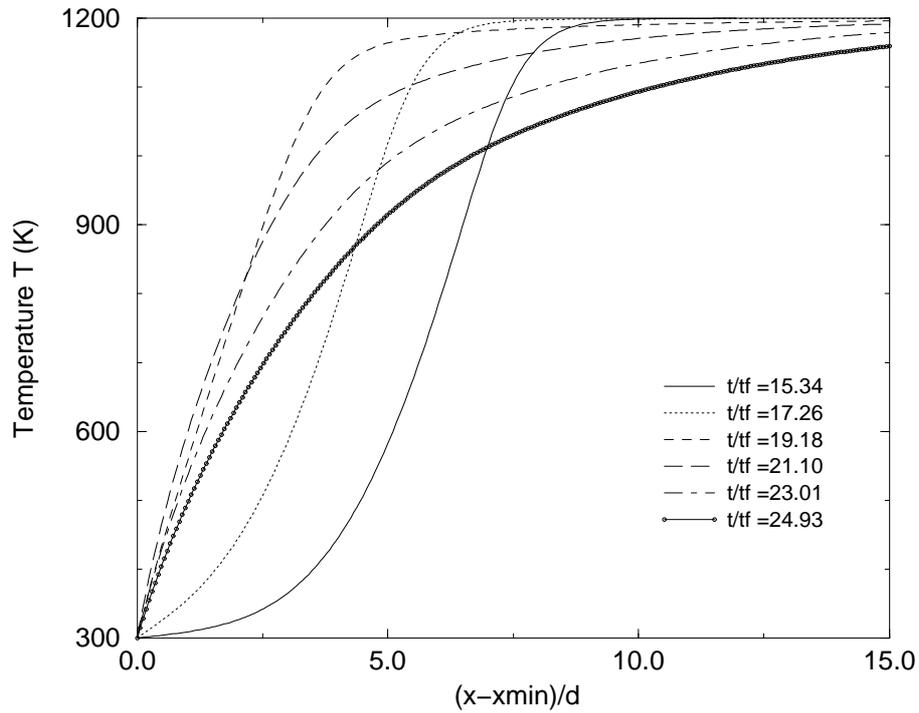


FIG. 1.4 – Température T en fonction de la distance à la paroi à différents moments de l'interaction.

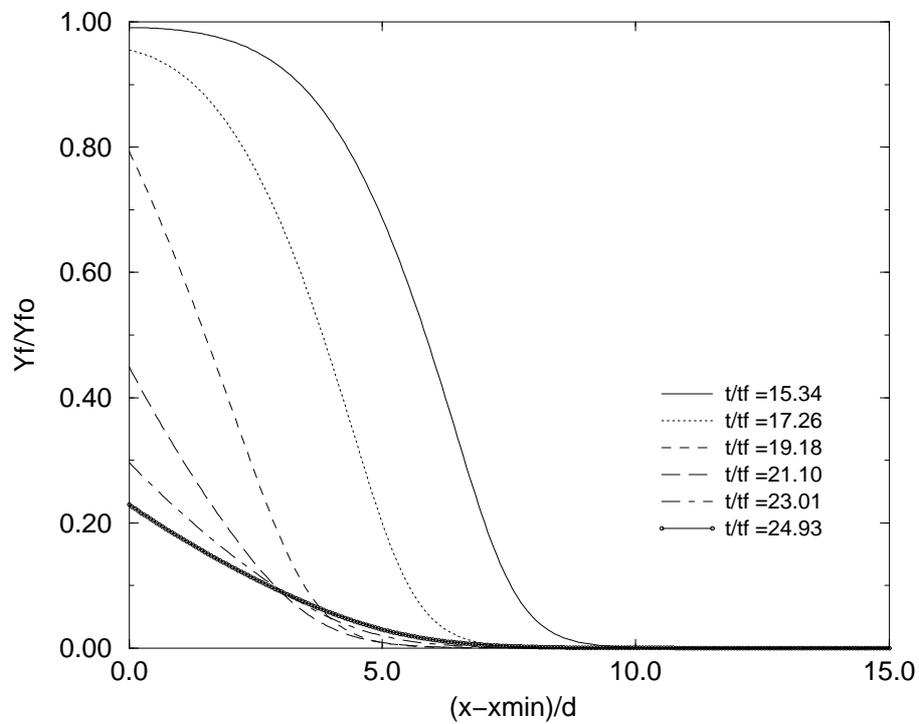


FIG. 1.5 – Fraction massique de fuel adimensionnée par la fraction massique de fuel initiale dans les gaz frais en fonction de la distance à la paroi à différents moments de l'interaction.

Sur les figures 1.6 et 1.7, se trouvent respectivement la distance flamme-paroi réduite $Pe = \frac{\delta}{a}$ et le flux de chaleur pariétal réduit $\phi = \frac{\varphi}{\varphi_f}$ en fonction du temps réduit $\frac{t}{t_f}$:

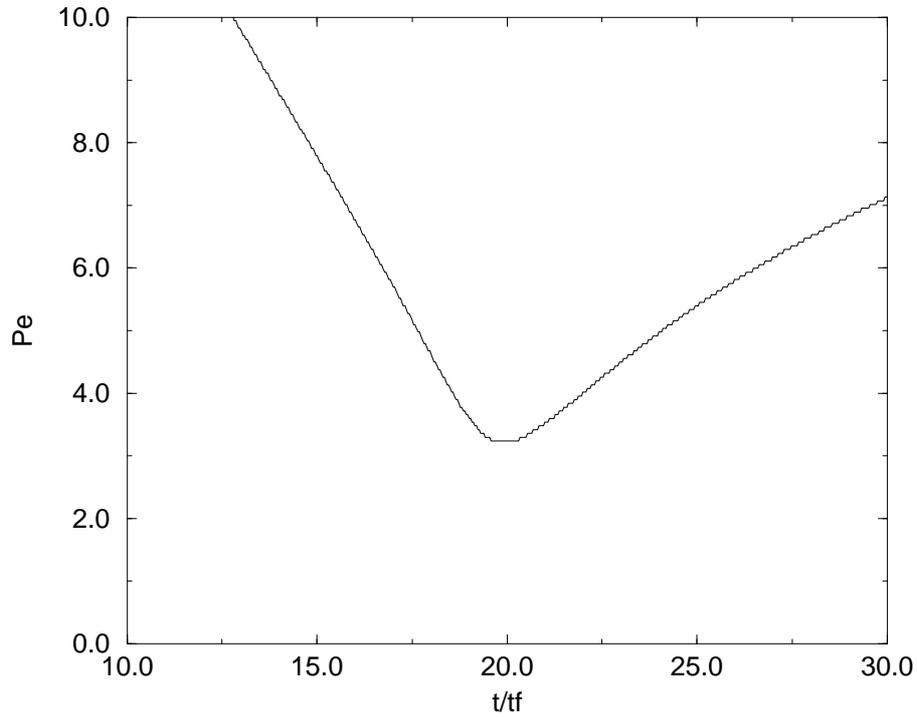


FIG. 1.6 – $Pe = \frac{\delta}{a}$ en fonction du temps réduit.

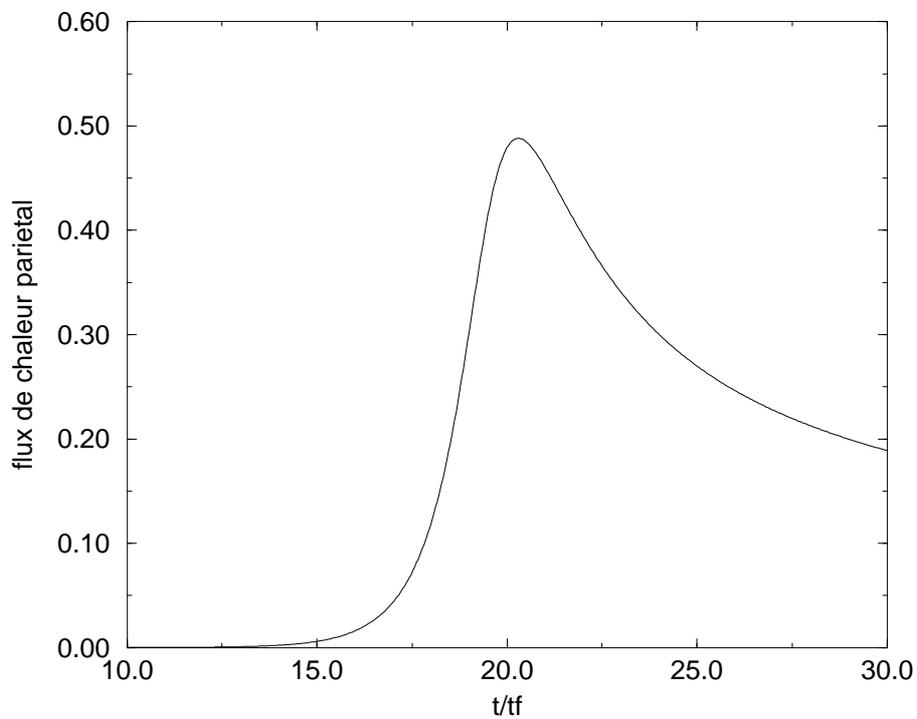


FIG. 1.7 – Flux de chaleur pariétal réduit $\phi = \frac{\varphi}{\varphi_f}$ en fonction du temps réduit.

Remarque : La distance flamme-paroi δ est calculée dans NTMIX3D, en considérant que la flamme est située au point de maillage où la taux de réaction est maximum.

Le résultat de la figure 1.6 confirme l'existence d'une distance de coïncement δ_Q et la figure 1.7 montre que l'extinction de la flamme s'accompagne d'un flux de chaleur pariétal maximum. Cela confirme que la flamme s'éteint à cause des pertes thermiques dans le mur et que l'interaction flamme paroi est avant tout contrôlée par la thermique.

Ces résultats sont cohérents avec les résultats trouvés dans la bibliographie [11, 51] puisque des simulations numériques d'interaction flamme paroi réalisées pour différents fuels montrent que la distance de coïncement est toujours à peu près identique avec $Pe_Q = \frac{\delta_Q}{d} \approx 3$.

Dans notre cas, les figures 1.6 et 1.7 nous donnent $Pe_Q = 3,4$ et $\phi_Q = 0,41$. On retrouve bien les résultats 'classiques' de Bruneaux et al [11].

Au niveau de l'application moteur, il est intéressant de savoir qu'après la quasi-extinction de la flamme, les gaz frais restant près du mur diffusent vers la flamme dans des temps caractéristiques inférieurs aux temps caractéristiques du cycle moteur. Ainsi l'interaction flamme paroi ne peut pas être une source importante d'imbrûlés. Cependant, si cela est vrai pour une interaction flamme paroi dans laquelle la flamme se propage perpendiculairement au mur comme celle que l'on vient de présenter (interaction HOQ : Head On Quenching), ce n'est pas forcément le cas pour tous les types d'interaction flamme paroi que l'on a présenté au début de chapitre. Dans les moteurs, les imbrûlés se forment surtout au niveau des crevasses de la paroi qui répondent à une interaction flamme paroi de type Tube Quenching (configuration (c) de la figure 1.1).

1.3 Approche de l'interaction flamme-paroi en régime turbulent

Le mécanisme de l'interaction est localement le même qu'en laminaire mais globalement la turbulence rend l'étude et la compréhension de l'interaction flamme paroi beaucoup plus complexe. En effet, la turbulence agit sur la flamme qui se plisse et la flamme agit par retour sur l'écoulement au travers du dégagement de chaleur. De plus, la paroi affecte la turbulence par les contraintes de cisaillement, à l'origine d'anisotropie et d'une réduction des échelles. Ainsi, le modèle HOQ n'est plus suffisant.

Des DNS d'interactions flamme paroi en régime turbulent ont déjà été réalisées dans la bibliographie [11]. Elles ont permis de dégager au moins un résultat et un mécanisme associé : Bien que localement, l'interaction puisse toujours être rapportée à une configuration laminaire, des structures pariétales turbulentes peuvent projeter la flamme sur le mur alors que des poches de gaz frais peuvent être aspirées dans les gaz brûlés. Il en résulte globalement, des distances de coïncement plus petites et des flux de chaleur pariétaux plus élevés.

Chapitre 2

Aspects théoriques de l'interaction flamme film liquide

Dans ce chapitre, nous allons présenter une approche qualitative de l'interaction flamme film liquide ainsi que le modèle de film liquide que nous avons codé dans NTMIX3D. Les ordres de grandeur de l'épaisseur du film liquide qui se forme sur les pistons des moteurs à injection directe essence sont : $h = 20\mu m$. C'est la valeur que nous retiendrons durant toute notre étude.

2.1 Configuration et hypothèses

La configuration choisie dans nos simulations numériques et correspondant à l'interaction flamme paroi avec film liquide est schématisée sur la figure 2.1 :

Elle comprend deux grandes zones distinctes couplées par le biais de la température et des fractions massiques :

- la première zone est le gaz dans lequel se propage une flamme laminaire, et qui constitue le domaine de calcul de NTMIX3D
- La deuxième zone est le film liquide de carburant qui s'évapore et qui constitue une condition limite pour NTMIX3D

Les hypothèses retenues pour nos simulations numériques directes sont les suivantes :

- Géométrie monodimensionnelle
- Absence de turbulence motivée par le fait que l'on se trouve en proche paroi
- Film liquide monocomposant
- Paroi isotherme
- Film liquide en régime mouillant cad $T_P < T_{Nu}$, où T_{Nu} désigne la température de Nukiyama (température de paroi T_P au delà de laquelle des bulles de gaz apparaissent dans le liquide, allant même jusqu'à la formation d'un film gazeux entre la paroi et le liquide, changeant l'évaporation du film liquide [2, 23])
- Conduction pure (pas de rayonnement thermique)
- Configuration d'interaction flamme-paroi HOQ

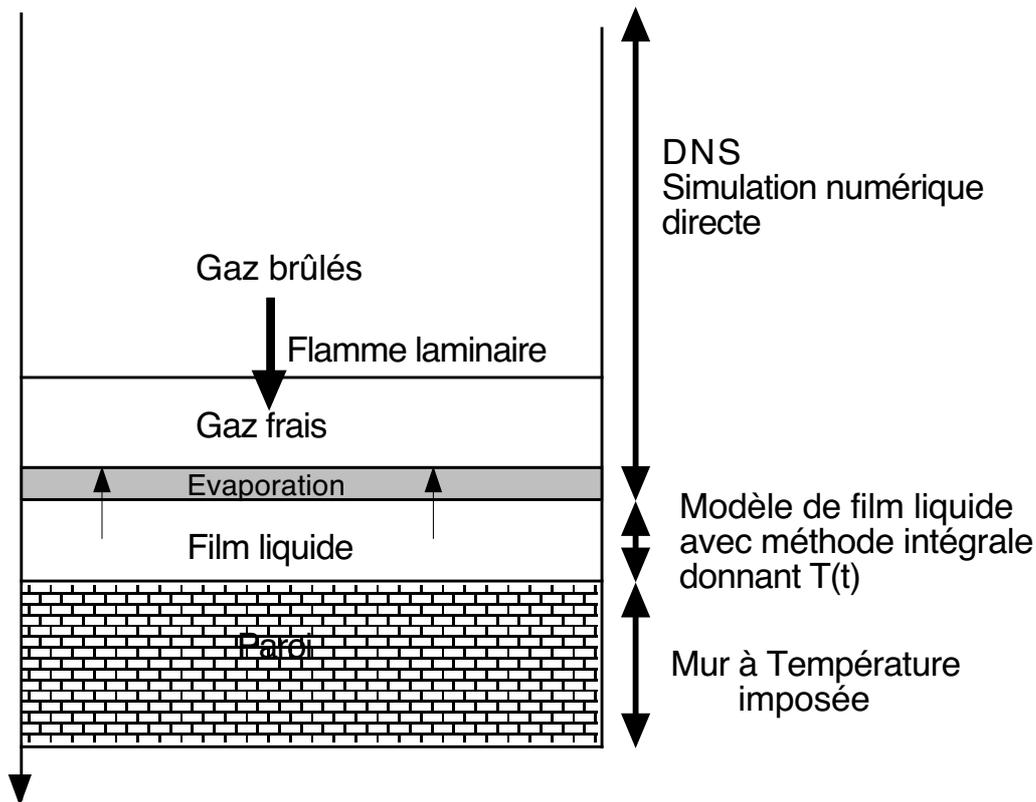


FIG. 2.1 – Configuration de l'interaction flamme paroi avec film liquide

2.2 Approche qualitative de l'interaction flamme film liquide

2.2.1 Scénario envisagé

A priori, au vu de ce que l'on connaît du mécanisme d'interaction flamme paroi sèche, on peut supposer que l'interaction d'une flamme avec un film liquide de carburant se décompose en au moins deux grandes phases :

- une première phase courte et forte dans laquelle la flamme s'approche du film liquide jusqu'à ce qu'elle soit pratiquement éteinte. Voir phase I figure 2.2
- une deuxième phase plus longue pendant laquelle les gaz chauds sont en contacts avec le film liquide de carburant. Voir phase II figure 2.2

Cette approche nous amène à envisager un modèle de résolution de la température dans le film liquide qui tienne compte de ces deux phases quand c'est nécessaire, comme nous le verrons dans notre partie modélisation du film liquide.

Afin de confirmer cette approche et de mieux cerner le problème, nous allons maintenant considérer quelques ordres de grandeurs concernant l'interaction flamme film liquide.

2.2.2 Analyse des grandeurs caractéristiques mises en jeu

Pour des raisons de commodité, dans toute notre étude, on considère un film liquide d'heptane. En effet, il s'agit d'une molécule relativement peu complexe, qui possède une température d'ébullition de 371.5 K.

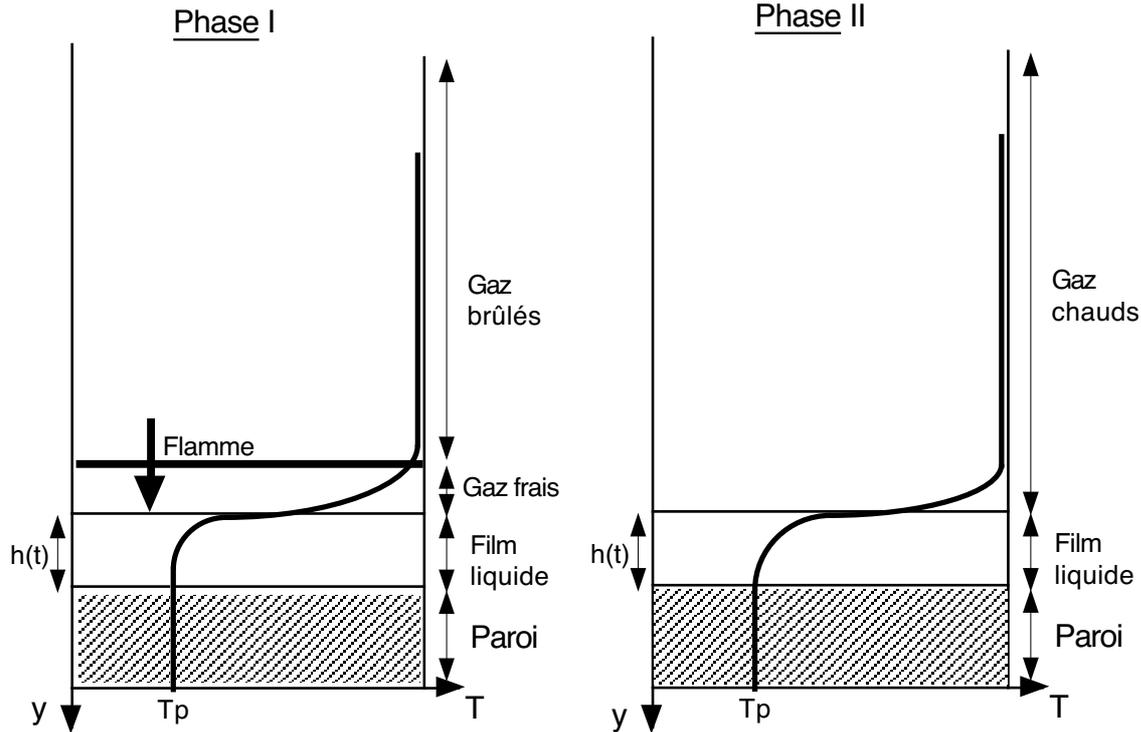


FIG. 2.2 – Les deux phases de l'interaction flamme film liquide

A - Temps caractéristiques de l'interaction flamme film liquide

- Temps caractéristique de pénétration de la chaleur dans le film liquide t_w :

L'équation de la chaleur dans le film liquide s'écrit $\frac{\partial T}{\partial t} = D_{th} \frac{\partial^2 T}{\partial y^2}$

On en déduit $\frac{T}{t_w} \approx D_{th} \frac{T}{h^2}$

$$t_w = \frac{h^2}{D_{th}} \text{ avec } \begin{cases} h \approx 20 \cdot 10^{-6} \text{ m} \\ D_{th} \approx 8,6 \cdot 10^{-8} \text{ m}^2 \cdot \text{s}^{-1} (\text{liquide à } 300\text{K}) \end{cases} \implies t_w \approx 4,8 \cdot 10^{-3} \text{ s}$$

- Temps caractéristique de flamme t_f :

$$\text{Par définition } t_f = \frac{\delta_L}{S_l} = \frac{D_{th}}{S_l^2} \quad \text{car } \frac{\delta_L S_l}{D_{th}} \approx 1$$

$$t_f = \frac{D_{th}}{S_l^2} \text{ avec } \begin{cases} S_l \approx 0,5 \text{ m} \cdot \text{s}^{-1} \\ D_{th} \approx 5 \cdot 10^{-5} \text{ m}^2 \cdot \text{s}^{-1} (\text{gaz frais à } 300\text{K}) \end{cases} \implies t_f \approx 2 \cdot 10^{-4} \text{ s}$$

$$\text{Donc : } \boxed{t_w \gg t_f}$$

Ainsi, la conduction thermique dans le film liquide est lente par rapport à la durée de l'interaction flamme paroi en phase I. C'est pourquoi, il faudrait tenir compte de la profondeur de pénétration de la chaleur dans le film liquide pour notre modèle de film liquide lors de la phase I.

B - Aspect énergétique de l'interaction flamme film liquide

- Energie surfacique nécessaire pour vaporiser le film liquide :

$$E_{film} = h\rho_l L_v \text{ avec } \begin{cases} h \approx 20.10^{-6}m \\ \rho_l \approx 678k_g.m^{-3} \text{ (à } 300K) \\ L_v \approx 36,45.10^4 J.k_g^{-1} \text{ (à } 300K) \end{cases} \implies E_{film} \approx 4,94kJ.m^{-2}$$

- Energie surfacique maximale fournie par une flamme de prémélange au film pendant l'interaction : (en négligeant les pertes thermiques dans le gaz et surtout à travers la paroi)

$$E_{flamme} = \rho_g C_p \Delta T S_l t_f \text{ avec } \begin{cases} t_f \approx 2.10^{-4}s \\ \rho_g \approx 1.21k_g.m^{-3} \text{ (gaz frais à } 300K) \\ C_p \approx 2300K J.k_g^{-1}.K^{-1} \text{ (T moyenne)} \\ \Delta T \approx 1000K \\ S_l \approx 0.5m.s^{-1} \end{cases} \implies \frac{E_{flamme}}{S} \approx 0,28kJ.m^{-2}$$

Donc : $E_{flamme} \ll E_{film}$

Ainsi, le film liquide résistera à la première phase de l'interaction et sera même très peu affecté par celle-ci dès que son épaisseur initiale est supérieure à $10 \mu m$.

- Evaluation de l'énergie surfacique fournie au film par conduction thermique (film de $20.10^{-6} m$) : (en négligeant les pertes thermiques dans le gaz et surtout à travers la paroi)

Pour ce faire, il convient d'évaluer le flux thermique des gaz chauds vers le film liquide (phase II de l'interaction) sachant que la configuration au cours de cette phase se rapproche de la figure. 2.3 :

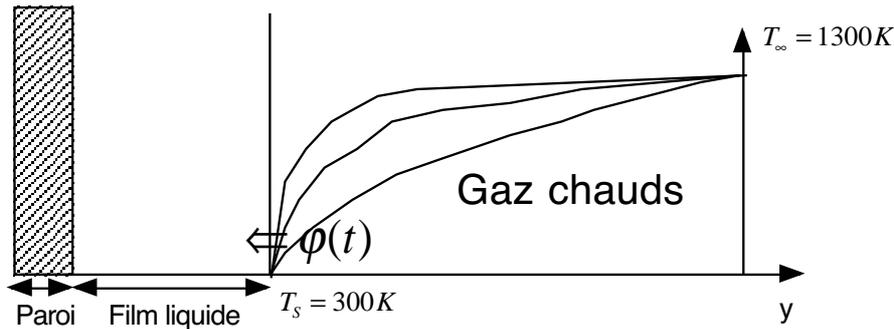


FIG. 2.3 – Flux thermique du gaz vers le liquide au cours de la phase II

D'après la littérature [48], le flux thermique au cours du temps pour une telle configuration peut être évalué par :

$$\varphi(t) \approx \frac{3\lambda(T_\infty - T_s)}{2\sqrt{8D_{th}t}} \text{ avec } \begin{cases} D_{th} \approx 2.10^{-4}m^2.s^{-1} \text{ (moyenne dans les gaz chauds)} \\ \lambda \approx 0,07W.m^{-1}.K \end{cases}$$

Et donc,

$$E_{cond} = \int_0^{t_{cond}} \varphi(t) dt = 5,25\sqrt{t_{cond}} \text{ avec } t_{cond} \leq \frac{t_{cycle}}{2}$$

Ainsi,

$$E_{cond} \approx 1,66 \text{ kJ.m}^{-2} \text{ pour } RPM = 600$$

Et,

$$\text{et } E_{cond} \approx 0,525 \text{ kJ.m}^{-2} \text{ pour } RPM = 6000$$

Par conséquent : $E_{cond} \approx E_{film}$ pour un faible régime moteur

Mais : $E_{cond} \ll E_{film}$ pour un régime moteur élevé

Ainsi, en conduction pure, l'énergie fournie par les gaz chauds au film liquide par conduction au cours d'un cycle moteur peut être comparable à l'énergie nécessaire pour évaporer le film liquide en totalité, mais uniquement à faible régime moteur. Donc, le temps de vie du film peut être comparable au temps d'un demi cycle moteur $\frac{t_{cycle}}{2}$ à faible régime moteur. En fait, dans nos simulations il y aura des pertes thermiques et on verra que le film liquide s'évapore beaucoup plus lentement que prévu. Finalement, nous verrons même que la température de la paroi joue un rôle plus important que la flamme sur l'évaporation ! Tout cela nous amène à penser qu'il faudra tenir compte des effets de la convection forcée et de la turbulence par la suite afin de vérifier si cette première analyse se confirme sur des cas plus réalistes.

2.3 Modélisation du film liquide

2.3.1 Hypothèses conditionnant le modèle de film liquide

Dans nos simulations, on ne cherche pas à résoudre la phase liquide puisque la seule chose qui nous intéresse est de simuler l'interaction flamme film liquide dans le gaz. En effet, cela nécessite uniquement que le film liquide de carburant s'évapore correctement en fonction de la fraction massique de fuel (heptane dans nos simulations) et de la température à l'interface liquide-gaz. Dans NTMIX3D, le film liquide ne constitue qu'une condition limite pour le gaz au même titre qu'un mur isotherme.

On fait les hypothèses simplificatrices suivantes :

- le film liquide est parfaitement au repos
- l'interface liquide-gaz est à la pression de vapeur saturante
- le gaz est initialement au repos
- les gaz sont considérés parfaits

Ainsi, les équations mises en oeuvre rendront compte de l'évaporation du film liquide dans le gaz (mélange air-heptane) à travers le profil de température instationnaire dans le film liquide et les conditions de saturation à la surface du liquide.

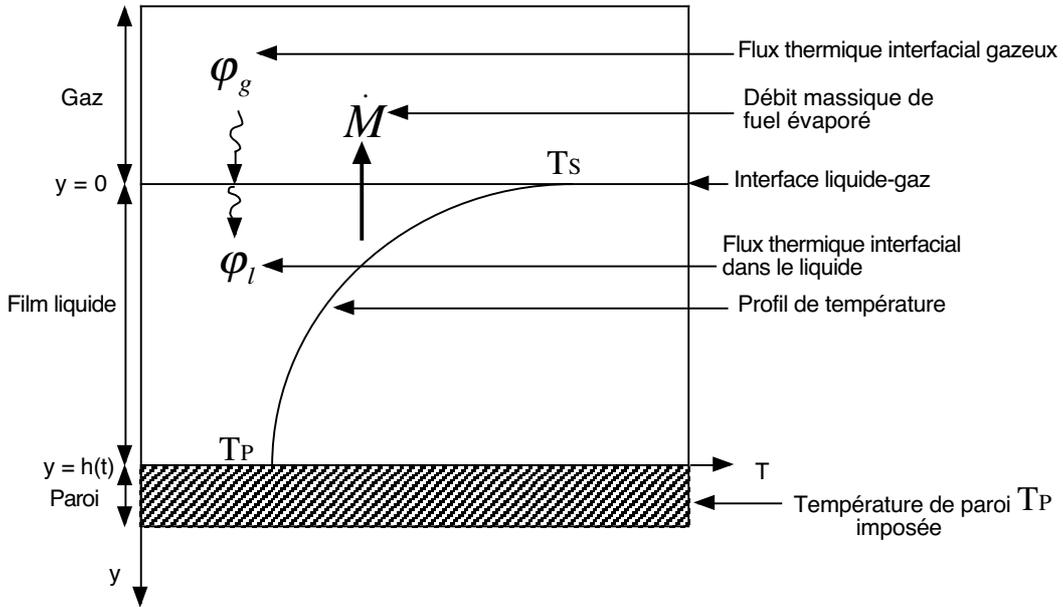


FIG. 2.4 – schéma représentatif de l'évaporation

2.3.2 Conditions de saturation à la surface du film

Grâce à l'hypothèse de saturation, la continuité du flux de masse à travers l'interface liquide-gaz \dot{M} (évaporation) s'écrit [35] (S désigne l'interface liquide-gaz) :

$$\begin{aligned}
 \dot{M} &= \rho_{g,s} u_s \\
 &= \rho_{g,s} u_s Y_F^s - \rho_{g,s} D_F^s (\nabla Y_F)^s \\
 \dot{M} &= -\frac{\rho_{g,s} D_F^s (\nabla Y_F)^s}{1 - Y_F^s}
 \end{aligned} \tag{2.1}$$

Pour obtenir le débit massique de fuel évaporé \dot{M} , il faut donc connaître la fraction massique de fuel à l'interface liquide-gaz Y_F^s .

D'après l'hypothèse des gaz parfaits on a :

$$Y_F = \frac{\rho_{g,F}}{\rho_g} = \frac{n_F W_F}{n W} = \frac{P_F W_F}{P W} \tag{2.2}$$

Par ailleurs, comme on suppose que le fuel à la surface du film liquide est dans les conditions de saturation, la formule de Clausius Clapeyron donne :

$$\ln \left(\frac{P_F}{P_{ref}} \right) = \left[\frac{W_F L_V}{R} \left(\frac{1}{T_{ref}} - \frac{1}{T_s} \right) \right] \tag{2.3}$$

où T_s est la température à la surface du liquide et T_{ref} , P_{ref} désignent les coordonnées d'un point de la courbe de saturation de l'heptane dans le diagramme (P,T). On choisit $T_{ref} = 371.5$ K et $P_{ref} = 101300$ Pa.

Ainsi, en remplaçant l'équation 2.2 dans l'équation 2.3, on obtient à la surface du film liquide :

$$Y_F^s = \frac{P_{ref}W_F}{P_sW_s} \exp \left[\frac{W_FL_V}{R} \left(\frac{1}{T_{ref}} - \frac{1}{T_s} \right) \right] \quad (2.4)$$

L'hypothèse appliquée dans NTMIX3D selon laquelle la masse molaire de la phase gazeuse W est considérée constante ne peut plus être maintenue à l'interface liquide-gaz pour le calcul de Y_F^s . En effet, pendant l'évaporation, il se peut que le fuel se trouve en proportion supérieure à l'air à l'interface liquide-gaz. Ainsi, la masse molaire de la phase gazeuse augmente de façon très conséquente.

La masse molaire de la phase gazeuse à l'interface liquide-gaz W_s , pour le calcul de Y_F^s est donc donnée par :

$$\frac{1}{W_s} = \sum_{k=1}^{N_{spec}} \frac{Y_k^s}{W_k} \quad (2.5)$$

avec N_{spec} : nombre d'espèces de la phase gazeuse (fuel, oxygène, azote dans nos simulations).

Il est donc nécessaire de connaître les fractions massiques Y_k de toutes les espèces à l'interface liquide-gaz, et en particulier celle de l'oxygène Y_{ox} , puisqu'elle sert au calcul de la combustion et constitue donc une condition limite pour NTMIX3D. Pour cela, il suffit d'écrire la continuité du flux de masse à travers l'interface liquide gaz. En effet, étant donné que le film liquide est monocomposant (fuel comportant une unique espèce), le flux de masse des espèces non fuel à l'interface est nul. Ainsi, pour toute espèce k non fuel, on a :

$$\begin{aligned} 0 &= \rho_{g,s}u_s Y_k^s - \rho_s D_k^s (\nabla Y_k)^s \\ \text{d'où} \quad Y_k^s &= \frac{\rho_{g,s} D_k^s (\nabla Y_k)^s}{\dot{M}} \end{aligned} \quad (2.6)$$

Pour simplifier la résolution de toutes ces équations, il est préférable d'effectuer un couplage faible entre le calcul de Y_F^s et celui de la masse molaire W_s . Une fois calculé \dot{M} à partir de la masse molaire W_s au temps précédent, on évalue les fractions massiques des espèces k non fuel en discrétisant $(\nabla Y_k)_S$ au 4eme ordre, ce qui donne pour toute espèce k non fuel :

$$Y_k^s = \frac{\rho_{g,s} D_k^s [48Y_k^2 - 36Y_k^3 + 16Y_k^4 - 3Y_k^5]}{12\dot{M}dy_g + 25\rho_s D_k^s} \quad (2.7)$$

où les indices 2,3,4 et 5 représentent respectivement les 2,3,4 et 5eme noeuds à partir de la surface du film du domaine gaz calculé dans NTMIX3D, et dy_g le pas d'espace dans le gaz (voir schéma de la figure 2.5).

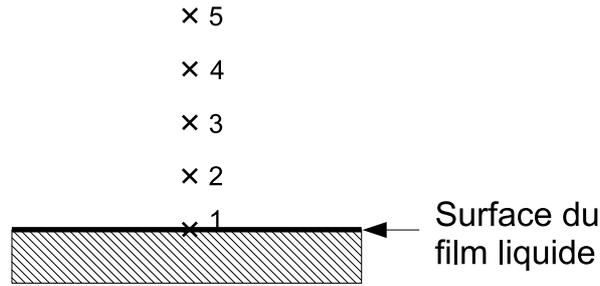


FIG. 2.5 – Représentation des noeuds de calcul au-dessus du film liquide.

Il ne reste alors plus qu'à calculer le profil de température instationnaire dans le film liquide pour que le modèle d'évaporation soit fermé.

2.3.3 Résolution de l'équation de la chaleur dans le film liquide

Pour calculer le profil de température instationnaire dans le film liquide, on se propose deux méthodes différentes :

- Une méthode intégrale [48].
- La résolution de l'équation de la chaleur par différences finies.

Chacune de ces méthodes est couplée avec l'équation de continuité des flux de chaleur à l'interface liquide gaz.

A - Méthode intégrale

Le principe de la méthode intégrale est d'estimer la température dans le film par un polynôme dont l'ordre dépend du nombre de degrés de liberté du problème. Etant donné que l'équation différentielle de la chaleur est du premier ordre en temps et du deuxième ordre en espace, le problème possède 3 degrés de liberté. Par ailleurs, si on remplace le polynôme de température dans l'équation locale de la chaleur, on constate que les degrés pairs du polynôme sont tous nuls. Le polynôme est donc de la forme : $T(y) = a(t) + b(t)y + c(t)y^3$. On détermine ensuite les coefficients du polynôme grâce aux conditions limites et à l'équation intégrale 2.8.

$$\int_0^{h(t)} \frac{\partial T}{\partial t} dy = D_{th} \int_0^{h(t)} \frac{\partial^2 T}{\partial y^2} dy \quad (2.8)$$

Etant donné que les variations de température et les flux de chaleur à l'interface liquide-gaz sont rapides par rapport à la pénétration de la chaleur dans le film liquide, on décompose l'étude en deux cas distincts en fonction de l'état de la pénétration de la chaleur dans le film liquide :

- Un premier cas où l'on tient compte de la profondeur de pénétration de la chaleur dans le film liquide au cours du temps : $\delta(t) < h(t)$. La condition limite en $y = h(t)$ n'a pas d'effet.
- Un deuxième cas où la chaleur a traversé le film liquide en entier : $\delta(t) = h(t)$. Il faut alors définir la condition limite en $y = h(t)$. On prendra une paroi isotherme.

Remarque : Il faut bien noter que l'on suppose que l'épaisseur $h(t)$ du film liquide varie très lentement au cours du temps devant les autres variables, ce qui sera vérifié à posteriori dans nos simulations numériques. Ceci permet de découpler le calcul de $h(t)$ et le calcul du profil de température dans le liquide (dans lequel on néglige les dérivées temporelles de $h(t)$).

- 1^{er} cas : $\delta(t) < h(t)$ (phase I du modèle de film liquide)

La configuration de ce cas est donnée par la figure. 2.6 :

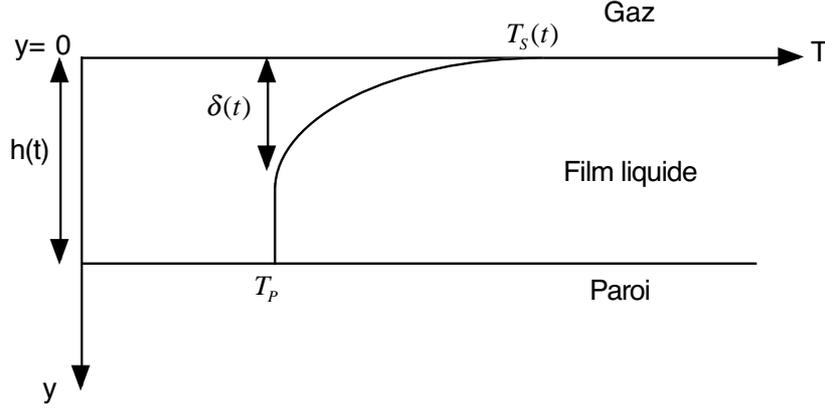


FIG. 2.6 – profil de température pour $\delta(t) < h(t)$

Les conditions aux limites sont donc :

$$CL \begin{cases} T(\delta(t)) = T_P \\ \frac{\partial T}{\partial y} [y = \delta(t)] = 0 \\ -\lambda_l \frac{\partial T}{\partial y} [y = 0] = \varphi_l(t) = \varphi_g(t) + \dot{M}L_V \end{cases} \quad (2.9)$$

En utilisant ces conditions aux limites, on obtient l'expression du polynôme $T(y)$ en fonction de la profondeur de pénétration $\delta(t)$.

$$T(y) = T_P + \frac{2\varphi_l(t)\delta(t)}{3\lambda_l} - \frac{\varphi_l(t)y}{\lambda_l} + \frac{\varphi_l(t)y^3}{3\lambda_l\delta^2(t)} \quad (2.10)$$

En remplaçant ce polynôme 2.10 dans l'équation intégrale 2.8, on obtient l'équation différentielle 2.11 qui ferme le problème :

$$\frac{d}{dt} [\varphi_l(t)\delta^2(t)] = 4D_{th}\varphi_l(t) \quad (2.11)$$

- 2^{eme} cas : $\delta(t) = h(t)$ (phase II du modèle de film liquide)

La configuration de ce cas est donnée par la figure. 2.7 :

Les conditions aux limites sont donc :

$$CL \begin{cases} T(h(t)) = T_P \\ -\lambda_l \frac{\partial T}{\partial y} [y = 0] = \varphi_l(t) = \varphi_g(t) + \dot{M}L_V \end{cases} \quad (2.12)$$

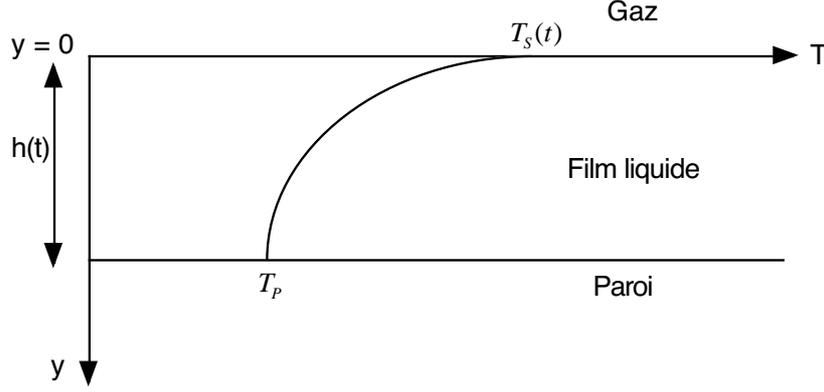


FIG. 2.7 – profil de température pour $\delta(t) = h(t)$

Pour des raisons de simplicité de calcul, on opère le changement de variable suivant : $y' = -y + h(t)$. Cela implique également : $\varphi_l'(t) = -\varphi_l(t)$.

On obtient alors l'expression du polynôme $T(y')$ en fonction de la température d'interface $T_s(t)$.

$$T(y') = T_P - \left[\frac{3[T_P - T_s(t)] \lambda_l - h(t) \varphi_l'(t)}{2h(t) \lambda_l} \right] y' + \left[\frac{[T_P - T_s(t)] \lambda_l - h(t) \varphi_l'(t)}{2h(t)^3 \lambda_l} \right] y'^3 \quad (2.13)$$

En remplaçant le polynôme 2.13 dans l'équation intégrale 2.8, et après avoir effectué le changement $\varphi_l'(t) = -\varphi_l(t)$, on obtient l'équation différentielle 2.14 qui ferme le problème :

$$\frac{h(t)^2 \lambda_l}{12D_{th}} \frac{d}{dt} \left(\frac{-h(t) \varphi_l(t)}{\lambda_l} + 5T_s(t) \right) = [T_P - T_s(t)] \lambda_l + h(t) \varphi_l(t) \quad (2.14)$$

La méthode intégrale présente l'avantage d'être très simple et peu coûteuse, puisqu'elle ne nécessite pas de mailler le film liquide. De ce fait, c'est une méthode que l'on pourra éventuellement adapter pour le développement d'un modèle d'évaporation de film liquide dans le code RANS IFP_C3D. En revanche, elle présente l'inconvénient d'être moins précise et moins adaptable qu'une méthode de résolution par différence finie. En effet, théoriquement le modèle de film liquide devrait suivre l'organigramme de la figure 2.8. t_W désigne le temps de pénétration de la chaleur dans le film liquide. Or, en l'état actuel des développements, le modèle intégral ne permet pas de repasser en phase I une fois que la phase II est atteinte. Pour se faire, la phase I devrait être initialisée avec un profil de température non uniforme, ce qui rendrait la méthode beaucoup plus complexe, et de ce fait moins intéressante. Nous verrons au chapitre suivant comment se déroulent les choses dans la pratique. Par ailleurs, il est impossible de prendre en compte les gradients transversaux dans le cadre d'une évolution du modèle vers une approche 2D ou 3D. C'est pourquoi, on se propose maintenant de présenter une méthode basée sur la discrétisation spatiale du film liquide qui pallie ces problèmes, bien que moins élégante et peu appropriée à de futurs développements dans le code RANS IFP_C3D.

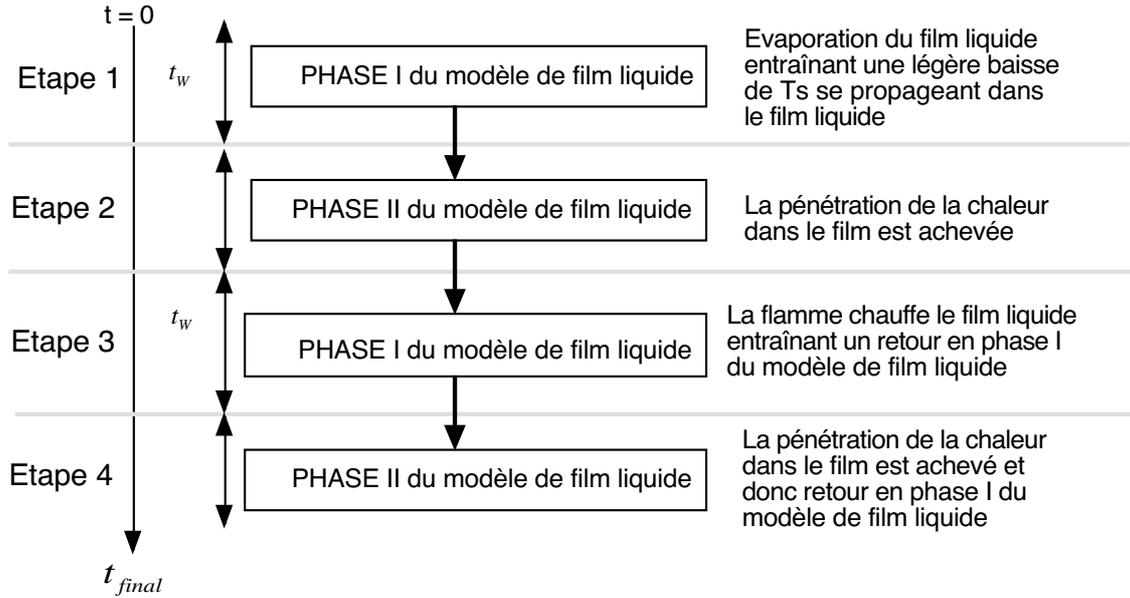


FIG. 2.8 – Organigramme décrivant le déroulement théorique du calcul d'interaction flamme paroi avec film liquide.

B - Résolution de l'équation de la chaleur par différences finies

Etant donné que l'on suppose le film liquide au repos, l'équation de la chaleur se résume à la diffusion thermique. Ainsi, on résout l'équation 2.15

$$\frac{\partial T}{\partial t} = D_{th} \frac{\partial^2 T}{\partial y^2} \quad (2.15)$$

avec les conditions aux limites suivantes :

$$CL \begin{cases} T(h(t)) = T_P \\ -\lambda_l \frac{\partial T}{\partial y} [y=0] = \varphi_l(t) = \varphi_g(t) + \dot{M}L_V \end{cases} \quad (2.16)$$

Remarque : C'est l'équation de continuité des flux thermiques 2.16 qui assure le couplage de la phase gazeuse vers le film liquide.

Bien que les propriétés thermodynamiques du gaz soient pratiquement toutes indépendantes de la température dans NTMIX3D, notre modèle de film tient compte de la variation des propriétés thermodynamiques du liquide avec la température (ρ_l , c_{pl} , λ_l , D_{th} , L_V). La dilatation du film liquide est ainsi prise en compte. De ce fait, la discrétisation du film liquide fait apparaître autant de pas d'espace $dy(j)$ différents que de mailles. Par contre, l'actualisation des propriétés thermodynamiques est découplée du calcul de la température dans le liquide pour des raisons de simplicité.

Ainsi, la discrétisation de l'équation 2.15 au premier ordre en espace avec un maillage de Numb points conformément à la figure 2.9 conduit à l'équation 2.17 :

$$\forall j \in [2, Numb - 1]$$

$$\frac{\partial T}{\partial t}(j) = D_{th}(j) \frac{2[T(j+1)dy(j-1) + T(j-1)dy(j) - T(j)(dy(j) + dy(j-1))]}{dy(j)dy(j-1)[dy(j) + dy(j-1)]} \quad (2.17)$$

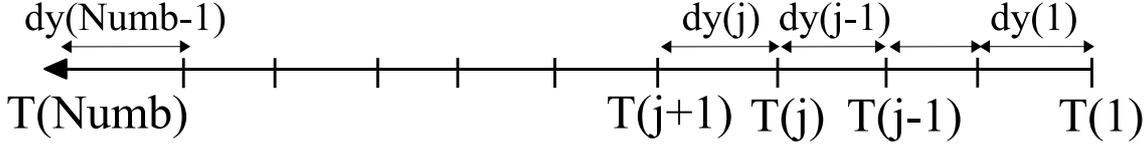


FIG. 2.9 – maillage monodimensionnel non uniforme du film liquide.

La résolution de cette équation 2.17 avec un schéma temporel RK3 explicite et les conditions aux limites 2.16 ferme le problème.

2.3.4 Equations gouvernant la masse surfacique $m(t)$ et l'épaisseur $h(t)$ du film liquide :

Les calculs de la masse surfacique $m(t)$ et de l'épaisseur $h(t)$ du film liquide ne sont pas couplés avec le calcul de la température de surface du film liquide T_s . L'évolution de $m(t)$ est gouvernée par l'équation 2.18 de conservation de la masse :

$$\frac{dm(t)}{dt} = -\dot{M} \quad (2.18)$$

L'épaisseur $h(t)$ du film liquide est alors donnée par l'équation 2.19 :

$$\int_0^{h(t)} \rho_l(y, t) dy = m(t) \quad (2.19)$$

2.3.5 Systèmes d'équations couplées de la phase liquide :

Les systèmes d'équations des tableaux 2.1 et 2.2 récapitulent les modèles de film liquide pour chacune des méthodes de résolution de l'équation de la chaleur choisie (respectivement méthode intégrale et méthode par différences finies).

C'est le codage et la résolution de ces équations dans NTMIX3D qui a permis d'obtenir les résultats que nous allons exposer dans le chapitre suivant. Le système d'équations couplées donnant la température de surface du film liquide T_s a été résolu par une méthode de Newton.

2.3.6 Algorithmes des modèles de film liquide codé dans NTMIX3D

A - Algorithme correspondant à la méthode intégrale

L'algorithme figure 2.10 indique de manière schématique la façon dont est codé le modèle de film liquide intégral dans NTMIX3D et son couplage avec la flamme.

	$\delta(t) < h(t)$	$\delta(t) = h(t)$
Equations couplées entre elles	$T_s(t) = T_P + \frac{2\varphi_l(t)\delta(t)}{3\lambda_l}$	$\frac{h(t)^2\lambda_l}{12D_{th}} \frac{d}{dt} \left(\frac{-h(t)\varphi_l(t)}{\lambda_l} + 5T_s(t) \right) =$
	$\frac{d}{dt} [\varphi_l(t)\delta^2(t)] = 4D_{th}\varphi_l(t)$	$[T_P - T_s(t)]\lambda_l + h(t)\varphi_l(t)$
Equations indépendantes	$Y_F^s = \frac{P_{ref}W_F}{P_sW_s} \exp \left[\frac{W_F L_V}{R} \left(\frac{1}{T_{ref}} - \frac{1}{T_s} \right) \right]$ $\varphi_l(t) = \varphi_g(t) + M L_V$ $\dot{M} = -\frac{\rho_{g,s} D_F^s (\nabla Y_F)^s}{1 - Y_F^s}$	
	$\frac{dm(t)}{dt} = -\dot{M}$ $\int_0^{h(t)} \rho_l(y, t) dy = m(t)$ $\forall k \text{ non fuel}, Y_k^s = \frac{\rho_{g,s} D_k^s (\nabla Y_k)^s}{M}$ $\frac{1}{W_s} = \sum_{k=1}^{N_{spec}} \frac{Y_k^s}{W_k}$	

TAB. 2.1 – Equations gouvernant le film liquide avec méthode intégrale

Equations couplées entre elles	$T(Numb) = T_P$ $\forall j \in [2, Numb - 1], \frac{\partial T}{\partial t}(j) = D_{th}(j) \frac{2[T(j+1)dy(j-1) + T(j-1)dy(j) - T(j)(dy(j) + dy(j-1))]}{dy(j)dy(j-1)[dy(j) + dy(j-1)]}$	
	$Y_F^s = \frac{P_{ref}W_F}{P_sW_s} \exp \left[\frac{W_F L_V}{R} \left(\frac{1}{T_{ref}} - \frac{1}{T_s} \right) \right]$ $\varphi_l(t) = \varphi_g(t) + M L_V$ $\dot{M} = -\frac{\rho_{g,s} D_F^s (\nabla Y_F)^s}{1 - Y_F^s}$	
Equations indépendantes	$\frac{dm(t)}{dt} = -\dot{M}$ $\int_0^{h(t)} \rho_l(y, t) dy = m(t)$ $\forall k \text{ non fuel}, Y_k^s = \frac{\rho_{g,s} D_k^s (\nabla Y_k)^s}{M}$ $\frac{1}{W_s} = \sum_{k=1}^{N_{spec}} \frac{Y_k^s}{W_k}$	

TAB. 2.2 – Equations gouvernant le film liquide avec méthode par différences finies

Afin de mieux cerner la démarche, on note :

$$G(t) = \varphi_l(t)\delta^2(t)$$

Ainsi, d'après l'équation différentielle 2.11, on a :

$$\frac{d}{dt} [G(t)] = 4D_{th}\varphi_l(t)$$

De la même manière, on note :

$$H(t) = \frac{-h(t)\varphi_l(t)}{\lambda_l} + 5T_s(t)$$

Ainsi, d'après l'équation différentielle 2.14, on a :

$$\frac{d}{dt} (H(t)) = \frac{12D_{th}}{h(t)^2\lambda_l} ([T_P - T_s(t)]\lambda_l + h(t)\varphi_l(t))$$

Par ailleurs, afin d'obtenir une équation de T_s pour la phase 1, on procède comme suit :

Tout d'abord, en écrivant l'équation 2.9 au temps (n+1), après avoir remplacé \dot{M} par son expression donnée par l'équation 2.1 et discrétisé les gradients au 4eme ordre en espace, on obtient :

$$\begin{aligned} \varphi_l^{n+1} = & \lambda_g \left(\frac{-25T_s^{n+1} + 48T_{g,2}^{n+1} - 36T_{g,3}^{n+1} + 16T_{g,4}^{n+1} - 3T_{g,5}^{n+1}}{12dy_g} \right) \\ & + \frac{\rho_{g,s}D_F^s[-25(Y_F^s)^{n+1} + 48(Y_F^2)^{n+1} - 36(Y_F^3)^{n+1} + 16(Y_F^4)^{n+1} - 3(Y_F^5)^{n+1}]L_V}{12[1 - (Y_F^s)^{n+1}]dy_g} \end{aligned} \quad (2.20)$$

D'un autre côté, en écrivant l'équation 2.10 en $y=0$ et au temps (n+1), on obtient l'expression de T_s en fonction de δ et φ_l :

$$T_s^{n+1} = T_P^{n+1} + \frac{2\varphi_l^{n+1}\delta^{n+1}}{3\lambda_l} \quad (2.21)$$

Ensuite, en utilisant l'équation 2.21 et l'expression de G^{n+1} , on obtient l'expression de φ_l^{n+1} en fonction de T_s^{n+1} :

$$\varphi_l^{n+1} = \frac{9[T_s^{n+1} - T_P]^{2}\lambda_l^2}{4G^{n+1}} \quad (2.22)$$

Il suffit alors de remplacer l'expression de φ_l^{n+1} donnée par l'équation 2.22 et l'expression de $(Y_F^s)^{n+1}$ donnée par l'équation 2.4 dans l'équation 2.20 pour obtenir la fonction f dont le bon zéro donne T_s^{n+1} :

$$\begin{aligned} f(T_s^{n+1}) &= 0 \\ &= (1 - (Y_F^s)^{n+1}) \left[f_G(T_s^{n+1} - T_P)^2 - b_g \left(\frac{-25T_s^{n+1} + c_T}{12} \right) \right] - \left(\frac{-25(Y_F^s)^{n+1} + c_Y}{12} \right) \\ &= \left(1 - A \exp \left[\frac{-a_g}{T_s^{n+1}} \right] \right) \left[f_G(T_s^{n+1} - T_P)^2 - b_g \left(\frac{-25T_s^{n+1} + c_T}{12} \right) - \frac{25}{12} \right] + \left(\frac{25 - c_Y}{12} \right) \end{aligned} \quad (2.23)$$

où l'on a posé :

$$A = \frac{P_{ref}W_F}{P_sW_s} \exp \left[\frac{W_FL_V}{RT_{ref}} \right] \quad ; \quad a_g = \frac{W_FL_V}{R} \quad ; \quad f_G = \frac{9\lambda_l^2 dy_g}{4G^{n+1}L_V\rho_{g,s}D_F^s} \quad ; \quad b_g = \frac{\lambda_g}{L_V\rho_{g,s}D_F^s}$$

et

$$\begin{aligned} c_T &= 48T_{g,2}^{n+1} - 36T_{g,3}^{n+1} + 16T_{g,4}^{n+1} - 3T_{g,5}^{n+1} \\ c_Y &= 48(Y_F^2)^{n+1} - 36(Y_F^3)^{n+1} + 16(Y_F^4)^{n+1} - 3(Y_F^5)^{n+1} \end{aligned}$$

où les indices 2,3,4 et 5 représentent respectivement les 2,3,4 et 5eme noeuds du domaine gaz calculé dans NTMIX3D.

De la même manière, on obtient l'équation de T_s pour la phase 2, en utilisant l'équation 2.12 au temps (n+1), après avoir remplacé \dot{M} par son expression donnée en 2.1 et

discrétisé les gradients au 4eme ordre. La seule différence par rapport à la phase 1 est l'utilisation de l'expression de H^{n+1} pour obtenir l'expression de φ_l^{n+1} en fonction de T_s^{n+1} . L'équation ainsi obtenue est donnée par 2.24 :

$$\begin{aligned}
g(T_s^{n+1}) &= 0 \\
&= (1 - (Y_F^s)^{n+1}) \left[f_H (5T_s^{n+1} - H^{n+1}) - b_g \left(\frac{-25T_s^{n+1} + c_T}{12} \right) \right] - \left(\frac{-25(Y_F^s)^{n+1} + c_Y}{12} \right) \\
&= \left(1 - A \exp \left[\frac{-a_g}{T_s^{n+1}} \right] \right) \left[f_H (5T_s^{n+1} - H^{n+1}) - b_g \left(\frac{-25T_s^{n+1} + c_T}{12} \right) - \frac{25}{12} \right] + \left(\frac{25 - c_Y}{12} \right)
\end{aligned} \tag{2.24}$$

où l'on a posé :

$$f_H = \frac{\lambda_l dy_g}{h(t) L_V \rho_{g,s} D_F^s}$$

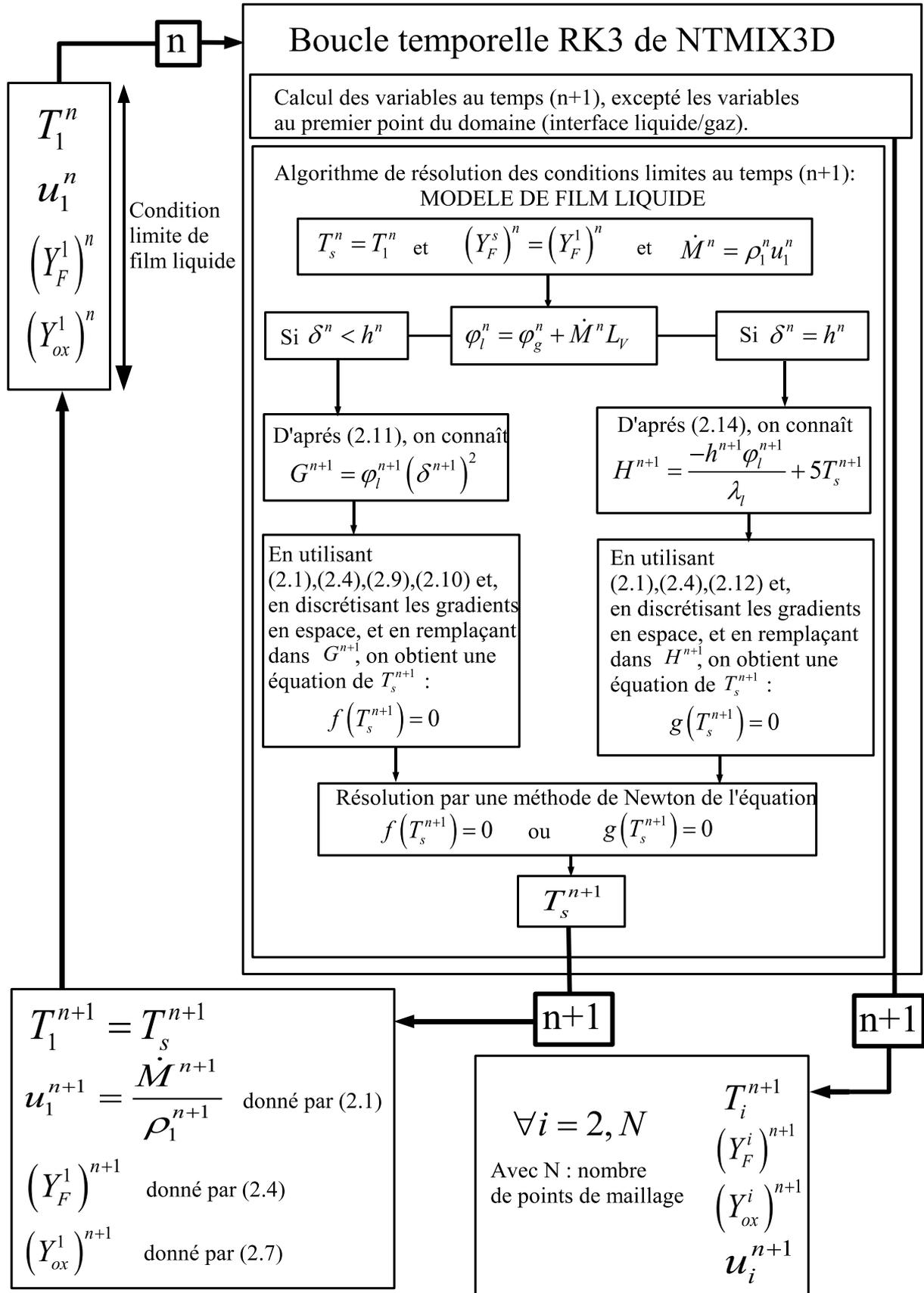


FIG. 2.10 – Algorithme schématique du modèle de film liquide intégral codé dans NTMIX3D.

B - Algorithme correspondant à la méthode par différences finies

L'algorithme figure 2.11 indique de manière schématique la façon dont est codé le modèle de film liquide par différences finies dans NTMIX3D et son couplage avec la flamme.

Afin de dériver une équation pour T_s , on discrétise φ_l au premier ordre en espace car le maillage dans le film est beaucoup plus fin que le maillage dans le gaz. On obtient ainsi :

$$\varphi_l^{n+1} = \frac{-\lambda_l [T(2)^{n+1} - T_s]}{dy(1)} \quad (2.25)$$

où $dy(1)$ désigne le premier pas d'espace dans le liquide.

La partie gazeuse étant identique dans les modèles intégrale et différences finies, l'équation 2.20 dérivée dans le modèle intégrale reste applicable au modèle par différences finies. Il suffit alors de remplacer φ_l donné par l'équation 2.25 dans l'équation 2.20 afin d'obtenir la fonction f_{diff} dont le bon zéro donne T_s^{n+1} :

$$\begin{aligned} f_{diff}(T_s^{n+1}) &= 0 \\ &= (1 - (Y_F^s)^{n+1}) \left[Mdl (T(2)^{n+1} - T_s^{n+1}) + b_g \left(\frac{-25T_s^{n+1} + c_T}{12} \right) \right] + \left(\frac{-25(Y_F^s)^{n+1} + c_Y}{12} \right) \\ &= \left(1 - Aexp \left[\frac{-a_g}{T_s^{n+1}} \right] \right) \left[Mdl (T(2)^{n+1} - T_s^{n+1}) + b_g \left(\frac{-25T_s^{n+1} + c_T}{12} \right) + \frac{25}{12} \right] - \left(\frac{25 - c_Y}{12} \right) \end{aligned} \quad (2.26)$$

où l'on a posé :

$$Mdl = \frac{12\lambda_l dy_g}{dy(1)L_V \rho_{g,s} D_F^s}$$

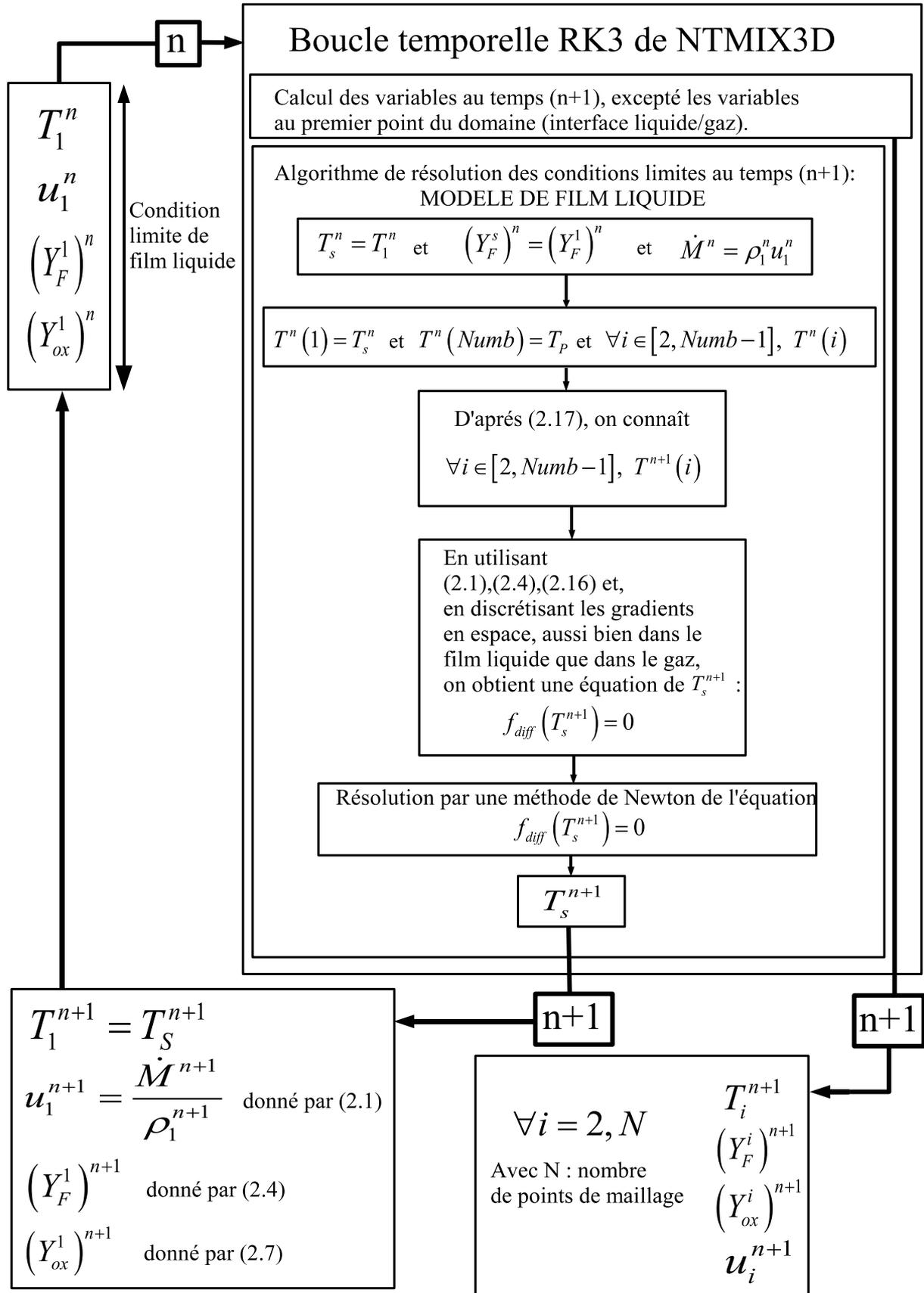


FIG. 2.11 – Algorithme schématique du modèle de film liquide par différences finies codé dans NTMIX3D.

Chapitre 3

Résultats comparatifs de DNS monodimensionnelles effectuées avec NTMIX3D

Nous allons tout d'abord comparer les résultats concernant l'évaporation d'un film liquide sans combustion pour les deux modèles de film liquide et pour différents régimes thermiques.

Ensuite, nous allons comparer les résultats de l'interaction flamme-paroi avec film liquide obtenus à l'aide du code de calcul NTMIX3D dans lequel on a inclus notre modèle de film liquide sous forme d'une condition limite. Pour ce faire, nous avons effectué un nouveau calcul d'interaction flamme-paroi sèche avec les mêmes paramètres que ceux utilisés pour les différents calculs d'interaction flamme film liquide. Ce calcul servira alors de référence pour les différents calculs d'interaction flamme film liquide, ce qui permettra de faire ressortir les différences entre les deux interactions. Les simulations numériques de l'interaction flamme paroi avec film liquide seront réalisées pour le jeu de paramètre suivant :

- Une température de paroi T_P de 300K, 350K ou 370K afin de mesurer l'impact de la température de paroi T_P sur l'évaporation et la distance de coincement δ_Q .
- Une température de flamme T_F de 1200K ou 2500K afin de mesurer l'impact de la flamme sur la température d'interface T_s .
- Un modèle de film liquide intégral noté MI ou par différences finies noté MDF afin de mesurer la validité de l'approximation intégrale.

Il convient de noter ici que la température de fin de combustion ou température de flamme T_F réelle de l'heptane pour des gaz frais à 300K et sous 1 atm est $T_F = 2500K$, mais que l'on choisit généralement des températures de flamme plus basse en DNS (1200K par exemple) pour des raisons de simplicité numérique, les principes restant les mêmes. Il se trouve que dans nos calculs 1D, les problèmes sont limités. C'est pourquoi nous avons pu effectuer des simulations avec une flamme à température réelle, même si on verra que certaines perturbations sont visibles sur les résultats dans ce cas.

3.1 Paramètres des différents calculs

3.1.1 Chimie

On utilise de l'heptane comme fuel pour les raisons déjà citées au chapitre précédent. On utilise un schéma cinétique à une étape et deux espèces (fuel et oxydant) pour permettre le calcul éventuel d'une flamme de diffusion qui peut apparaître en plus de la flamme de prémélange. Par ailleurs, comme un schéma cinétique à une étape ne permet pas de simuler le fait qu'une flamme s'éteint progressivement lorsque la richesse du mélange devient trop forte, on utilise un facteur préexponentiel qui dépend de la richesse. Ce facteur est choisi de telle manière que la vitesse de flamme de prémélange de l'heptane en fonction de la richesse corresponde aux mesures expérimentales. Ainsi, lorsque la flamme atteindra les forts gradients de richesse produits par le film qui s'évapore, elle gardera un comportement physique. La nouvelle cinétique est validée dans un nouveau calcul d'interaction flamme paroi sèche dont les résultats sont présentés dans la section 3.3.2.

3.1.2 Maillage et domaine de calcul

Afin de choisir un domaine de calcul adéquat, considérons les ordres de grandeur suivants : si on admet que le film liquide s'évapore pendant un demi-tour moteur avant que la flamme n'interagisse avec celui-ci, le film liquide s'évapore pendant $7,5ms$ à $4000tr.min^{-1}$ avant l'interaction. Or, pendant ce temps, le carburant évaporé parcourt environ $1,8mm$ d'après nos simulations et la flamme d'heptane environ $2,65mm$. Il faut donc un domaine de longueur au moins égale à $4.45mm$.

Dans nos simulations on utilise un domaine physique de longueur $L = 5,3mm$ et on choisit la position initiale de la flamme, lorsqu'elle existe, de telle sorte que le temps d'existence du film liquide avant l'interaction avec la flamme soit de $7,5ms$.

Par ailleurs, on utilise un maillage monodimensionnel de 401 points afin que la flamme soit bien résolue, puisque son épaisseur $\delta_L \approx 0.5mm$. On conserve le même maillage pour les calculs sans combustion afin que les différents résultats soient strictement comparables.

3.1.3 Conditions limites

Le calcul de référence interaction flamme-paroi sèche utilise les mêmes conditions limites que celles utilisées pour les simulations du chapitre 1.

En ce qui concerne les calculs d'interaction flamme film liquide, on utilise une condition limite différente à gauche (figure. 3.1) où se trouve le film : c'est la condition de film liquide développée au chapitre précédent.

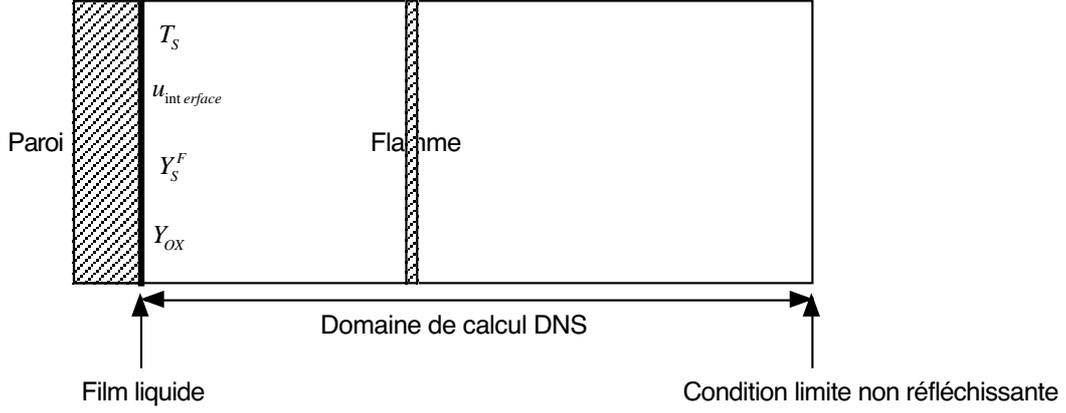


FIG. 3.1 – Conditions limites de l'interaction flamme film liquide

On peut résumer la condition limite de film liquide par :

$$T_{interface} = T_s \quad (3.1)$$

$$u_{interface} = \frac{\dot{M}}{\rho} \quad (3.2)$$

$$Y_{Finterface} = Y_S^F \quad (3.3)$$

$$Y_{oxinterface} = \frac{\rho D [48(Y_{ox})_2 - 36(Y_{ox})_3 + 16(Y_{ox})_4 - 3(Y_{ox})_5]}{-12\dot{M}dy_g + 25\rho D} \quad (3.4)$$

où les indices 2,3,4 et 5 représentent respectivement les 2,3,4 et 5eme noeuds du domaine gaz calculé dans NTMIX3D, et dy_g le pas d'espace dans le gaz.

3.1.4 Condition initiale

En ce qui concerne les calculs sans combustion, on initialise le calcul avec des champs uniformes de température (300K), de pression (1atm) et de fraction massique de telle sorte que la richesse soit $\phi = 0.8$.

Les calculs avec combustion sont initialisés dans tous les cas par une flamme prémélangée instationnaire d'heptane calculée selon un profil Echehki Ferziger [49], et dont la richesse est $\phi = 0.8$ et les gaz frais sont à $T=300K$.

Par ailleurs, la flamme est placée à 4.45 mm du film liquide afin que l'interaction entre la flamme et le film liquide ait lieu à environ $t = 7,5ms$.

Le film liquide est quant à lui à une température uniforme $T_s = 300K$.

Les différents champs de la condition initiale dans le cas où la température de flamme est $T_F = 1200K$ sont donnés sur la figure. 3.2. On notera que la coordonnée x utilisée sur les figures de ce chapitre correspond à la direction normale à la paroi et au film liquide. C'est l'équivalent de la coordonnée y du chapitre 2.

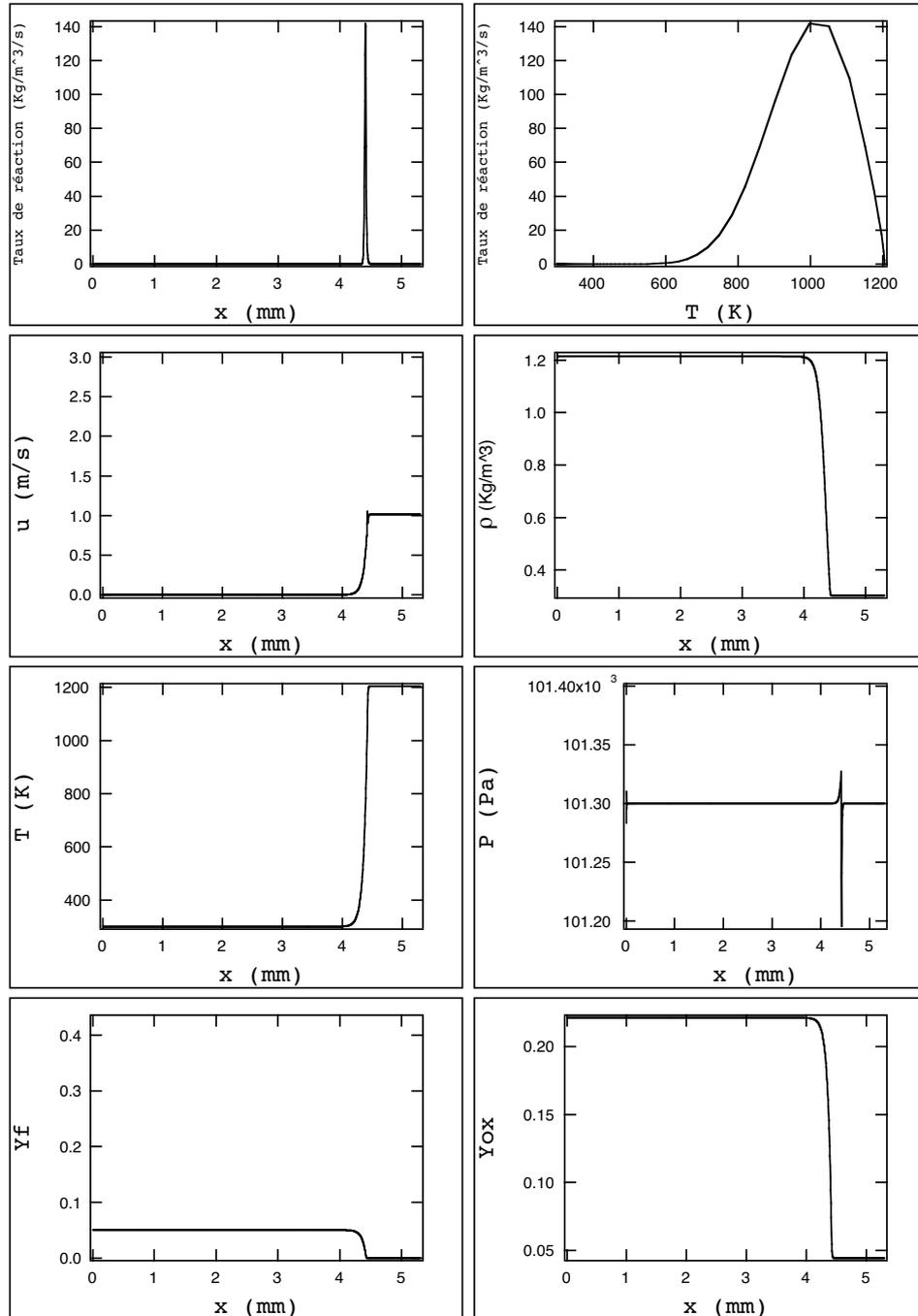


FIG. 3.2 – Condition initiale de l’interaction flamme film liquide pour la flamme à $T_F = 1200K$

3.2 Résultats pour l’évaporation d’un film sans combustion

Afin de comparer les deux méthodes de calcul de la température dans le film liquide, nous avons tracé les profils de température dans le liquide et dans le gaz près du film pour le cas d’une température de paroi $T_P = 370K$ et une température initiale de gaz $T_g = 300K$. On constate d’après la figure 3.3 que les deux méthodes fournissent des résultats assez proches. Les températures issues de la méthode intégrale sont légèrement plus faibles que celles calculées par la méthode différences finies. Une partie de cette différence provient du fait que le calcul de la température par la méthode intégrale commence trop tard. En effet, comme nous l’avons mentionné dans les sections précédentes, la méthode intégrale

impose une contrainte lorsque la température de paroi T_P est supérieure à la température initiale des gaz frais T_0 : le calcul de la température dans le film liquide ne débute qu'à partir de l'instant où l'on estime que l'influence de la température de paroi T_P est perçue par la surface du film. En effet, dans les calculs de ce chapitre, la pénétration de la chaleur de la paroi vers la surface du film n'est pas résolue avec la méthode intégrale. Néanmoins, on estime la durée de cette pénétration afin de tenir compte du fait que la température à l'interface liquide-gaz T_s reste pratiquement inchangée tant que la chaleur provenant de la paroi ne s'est pas propagée jusqu'à la surface du film liquide. Or, ce temps de pénétration de la chaleur de la paroi vers la surface du film a été légèrement surestimé dans nos calculs.

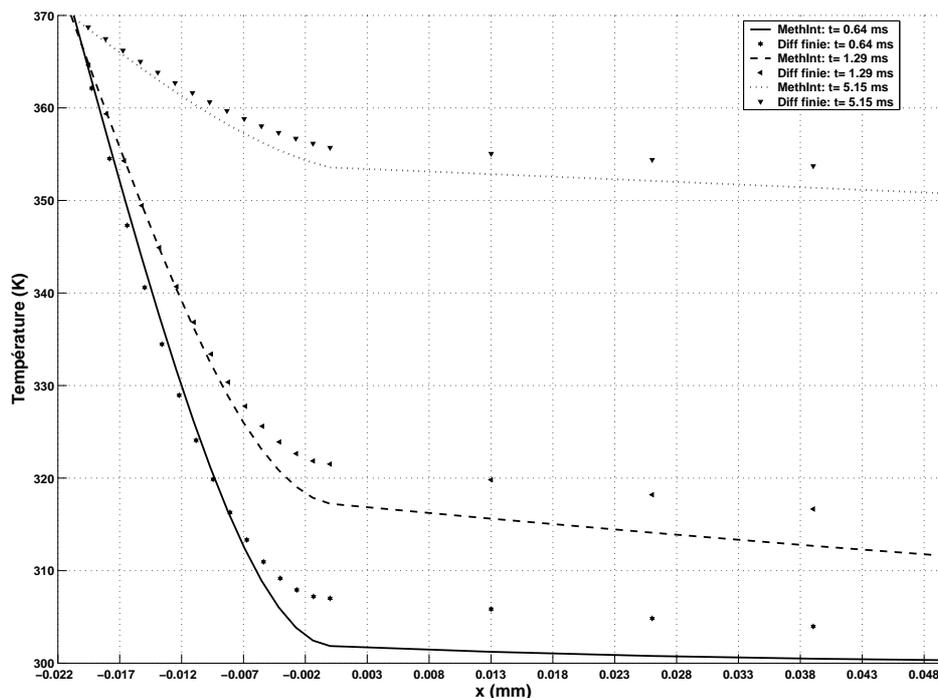


FIG. 3.3 – Profils de température dans le liquide ($x < 0$) et dans le gaz ($x > 0$) pour $T_P = 370K$ et $T_g = 300K$ à différents instants.

Par ailleurs, afin de comparer l'évaporation d'un film liquide pour différents régimes thermiques, nous avons ensuite tracé la température interfaciale T_s (figure 3.4), la fraction massique de carburant à la surface du film (figure 3.5), le débit surfacique de masse évaporé (figure 3.6), la masse et l'épaisseur du film (figures 3.7 et 3.8) en fonction du temps pour les deux méthodes de résolution de la température dans le liquide.

Tout d'abord, ces figures confirment toutes que la méthode intégrale donne des résultats relativement proches de ceux issus de la résolution complète par différences finies. La méthode intégrale, bien que moins souple que la résolution de la chaleur dans le film par différences finies, constitue donc une bonne approximation, et pourra de ce fait, éventuellement être utilisée dans un code RANS par la suite.

Ensuite, ces résultats montrent que la température de paroi T_P a un impact prépondérant sur l'évaporation alors que la température du gaz a une influence très modeste, que ce soit sur la température interfaciale T_s ou l'évaporation. En effet, le débit évaporé augmente approximativement d'un facteur 15 lorsque la température de paroi T_P passe de 300K à 370K alors que le passage d'une température de gaz de 300K à 2500K est simplement perceptible.

Enfin, on constate que le film se dilate bien lorsque la température augmente et que l'évaporation du film liquide est très lente conformément à l'hypothèse formulée pour la méthode intégrale. En effet, en 20 ms, le film liquide n'a perdu que 12.5% de sa masse lorsque l'on se place dans les conditions d'évaporation les plus favorables.

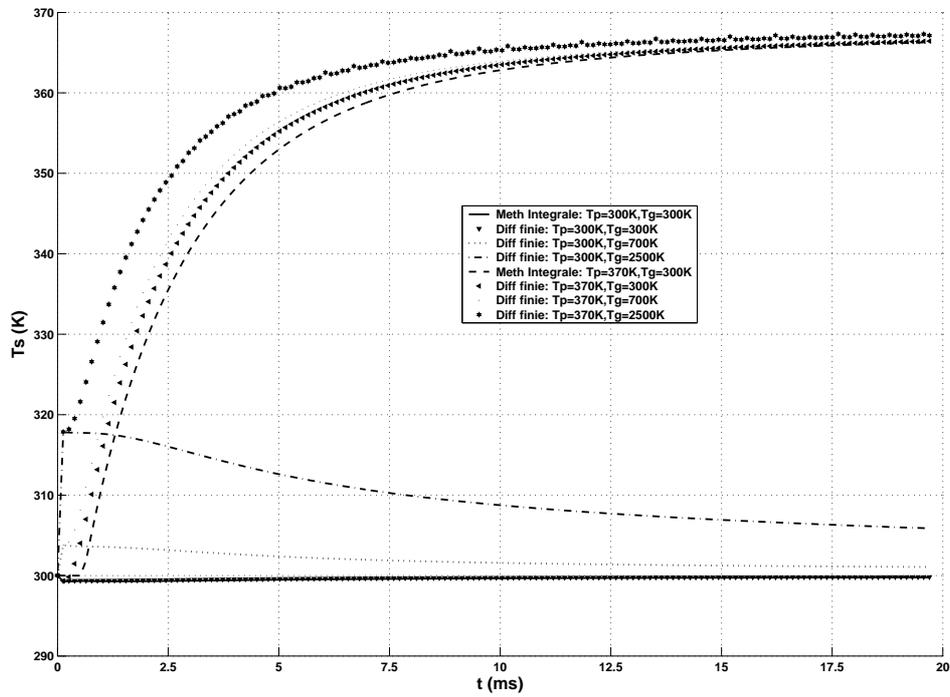


FIG. 3.4 – Evolution temporelle de la température d'interface T_s .

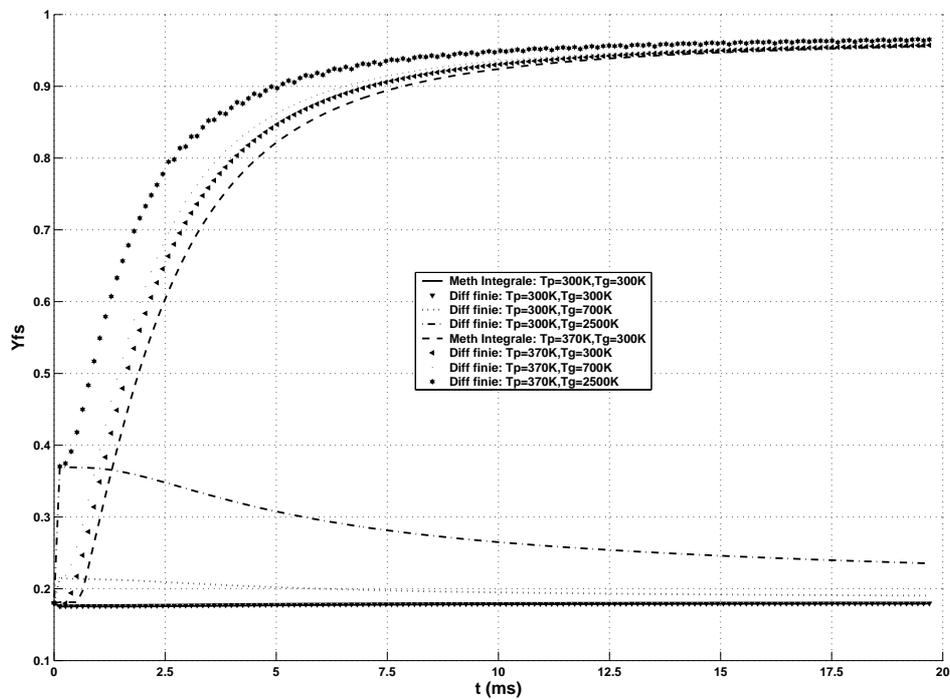


FIG. 3.5 – Evolution temporelle de la fraction massique de fuel Y_S^F .

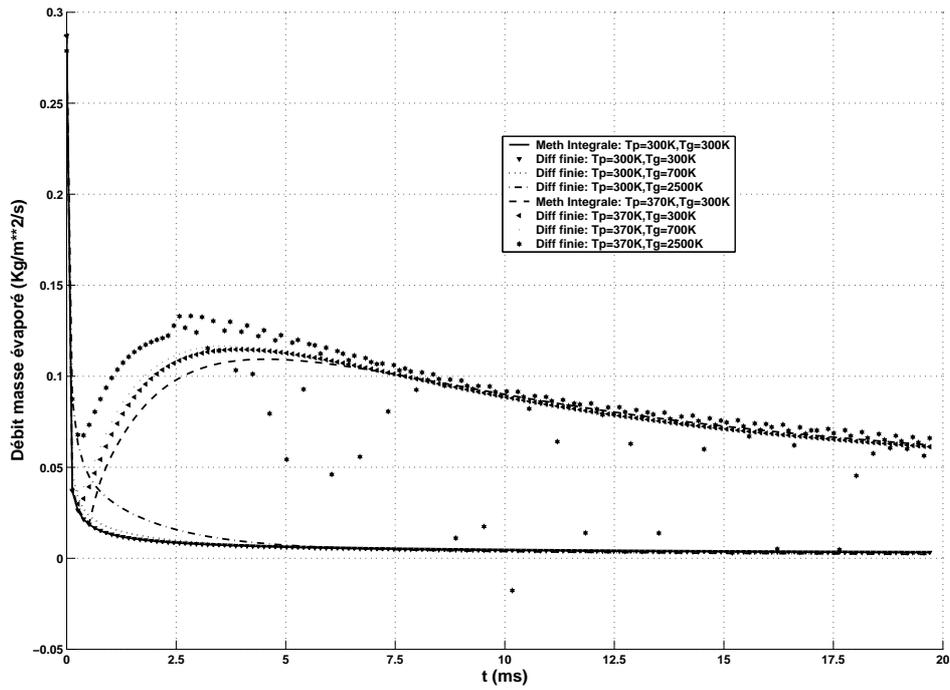


FIG. 3.6 – Evolution temporelle du débit surfacique de masse évaporé \dot{M}

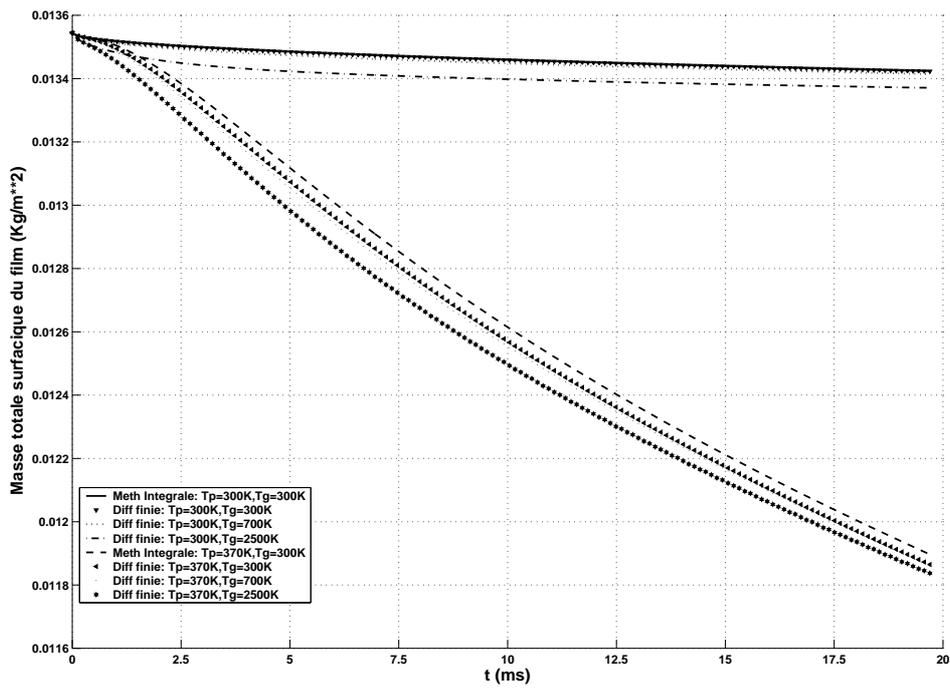


FIG. 3.7 – Evolution temporelle de la masse surfacique du film liquide.

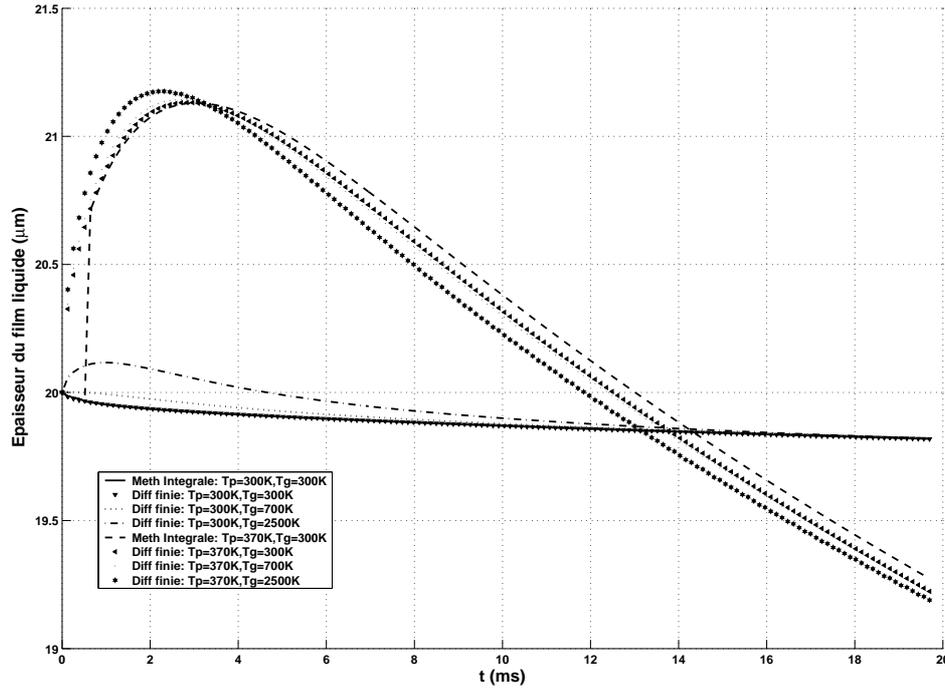


FIG. 3.8 – Evolution temporelle de l’épaisseur du film liquide.

3.3 Résultats pour l’interaction flamme film liquide

3.3.1 Déroulement pratique de l’interaction flamme paroi avec film liquide

Dans les simulations de ce chapitre, la température initiale des gaz frais et celle du film liquide sont considérées identiques et égales à T_0 . Cette température T_0 constitue un paramètre important afin d’expliquer le déroulement pratique de l’interaction flamme paroi avec film liquide. Dans toute la suite de notre étude $T_0 = 300K$. Le déroulement de toutes les simulations numériques effectuées avec le modèle de film liquide par différences fines (MDF) est conforme à l’organigramme théorique de la figure 2.8 exposé à la page 30 alors que les simulations à base de modèle de film liquide intégrale (MI) s’en éloignent quelque peu. En effet, les simulations numériques effectuées avec le modèle de film liquide intégrale suivent l’organigramme 3.9 et nous allons expliquer pourquoi.

- CAS A ($T_P = T_0$) : On ne fait que les étapes 1 et 2 de l’organigramme théorique de la figure 2.8 exposé à la page 30 du chapitre 2. En effet, lorsque le film liquide a déjà subi un échauffement (après les étapes 1 et 2 de la figure 2.8), il est beaucoup trop complexe de revenir en phase I du modèle de film intégral lorsque la flamme chauffe le film. En outre, nous verrons dans les résultats de nos simulations que ce n’est pas directement la flamme qui chauffe le film liquide mais uniquement les gaz brûlés issus de la combustion. Ainsi, le temps caractéristique d’échauffement du film liquide dans ce cas est suffisamment long pour que l’on puisse négliger la profondeur de pénétration de la chaleur dans le film liquide lorsque la flamme interagit avec le film. Une description de ce cas de figure est représentée sur la figure 3.10.
- CAS B ($T_P > T_0$) : On remplace l’étape 1 de l’organigramme théorique de la figure 2.8 exposé à la page 30 du chapitre 2 par un modèle d’évaporation à T_s constante. En effet, nous verrons que c’est la température de paroi T_P qui influe de manière prépondérante sur la température d’interface T_s . Or, il faut un certain temps t_W à la

chaleur provenant de la paroi pour pénétrer dans le film liquide et atteindre sa surface qui reste à température T_s quasiment constante pendant ce temps. Une description de ce cas de figure est représentée sur la figure 3.11.

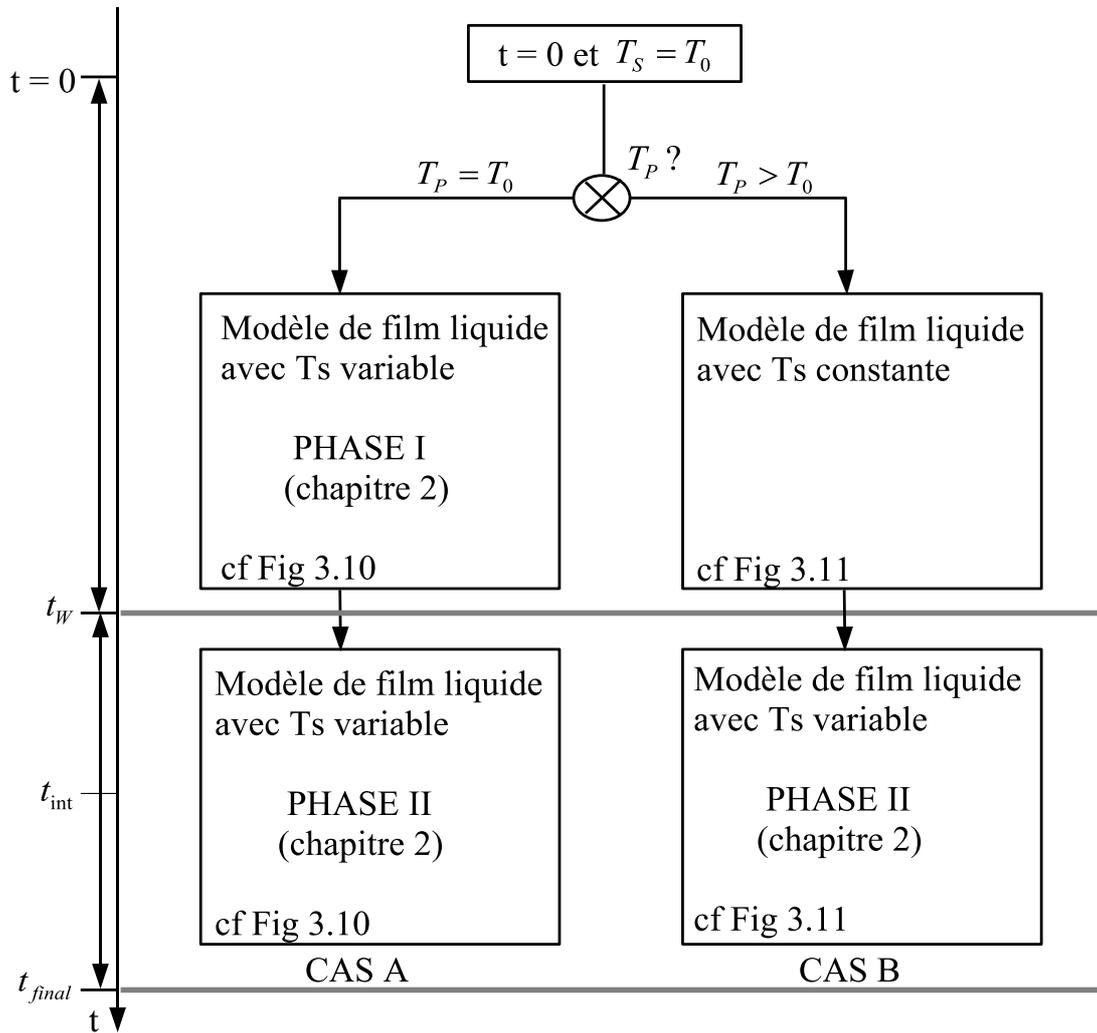


FIG. 3.9 – Déroulement pratique des différentes phases de calcul de T_s avec le modèle de film liquide intégral selon les cas traités.

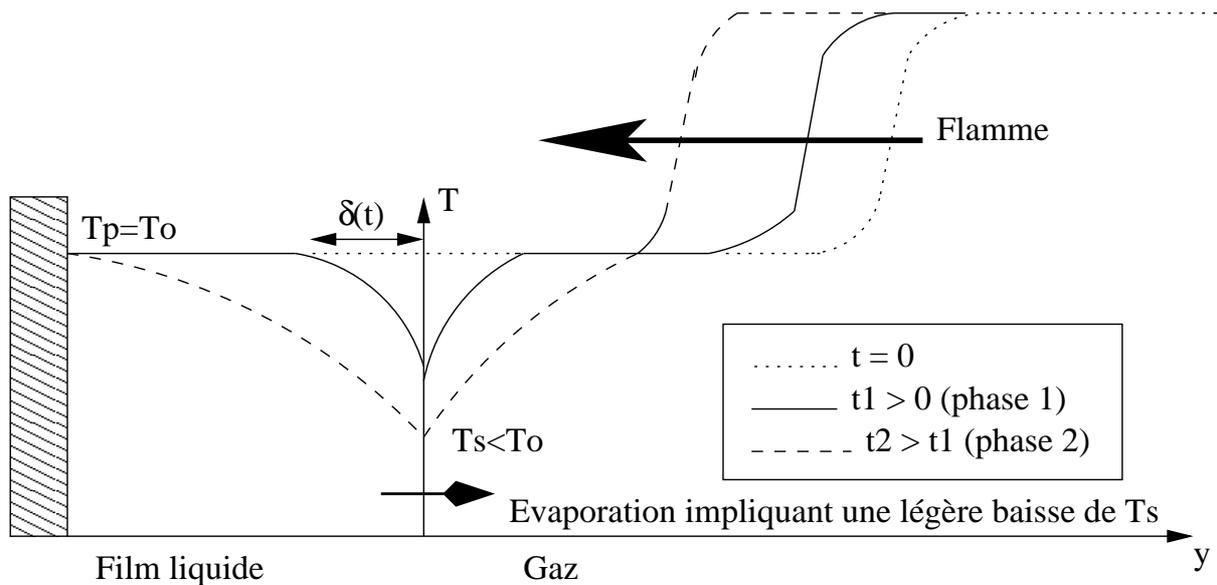


FIG. 3.10 – Profils de température pour le CAS A ($T_P = T_0$)

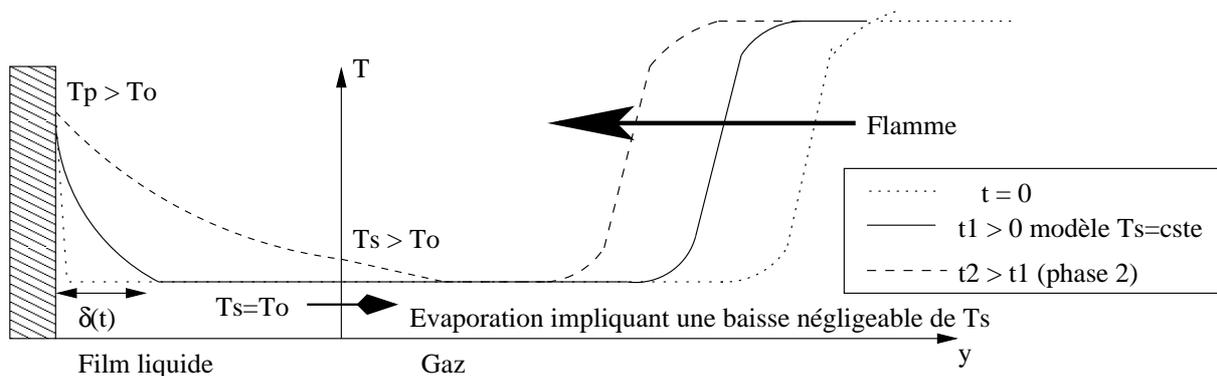


FIG. 3.11 – Profils de température pour le CAS B ($T_P > T_0$)

3.3.2 Calcul de référence : Interaction flamme paroi sèche

D'après la figure 3.12, on constate que la distance de coincement (Pe_Q) ainsi que le flux de chaleur pariétal maximal sont quasiment identiques à ceux trouvés au chapitre 1. En effet, on a : $Pe_Q = 3,46$ et $\phi_{Q_{max}} = 0,40$. Ainsi, cela atteste que la nouvelle cinétique a été correctement codée et conforte le fait que l'interaction flamme paroi sèche est essentiellement contrôlée par la thermique. A noter que la flamme est initialement située au centre du domaine pour ce calcul contrairement aux calculs d'interaction flamme film liquide pour lesquels la flamme est initialement situé aux 5/6ème du domaine.

3.3.3 Analyse de l'interaction flamme film liquide

Afin de comprendre comment se déroule l'interaction flamme paroi en présence d'un film liquide, nous allons maintenant analyser les profils de température, taux de réaction et fraction massique de fuel et d'oxygène à différents moments de l'interaction sur un

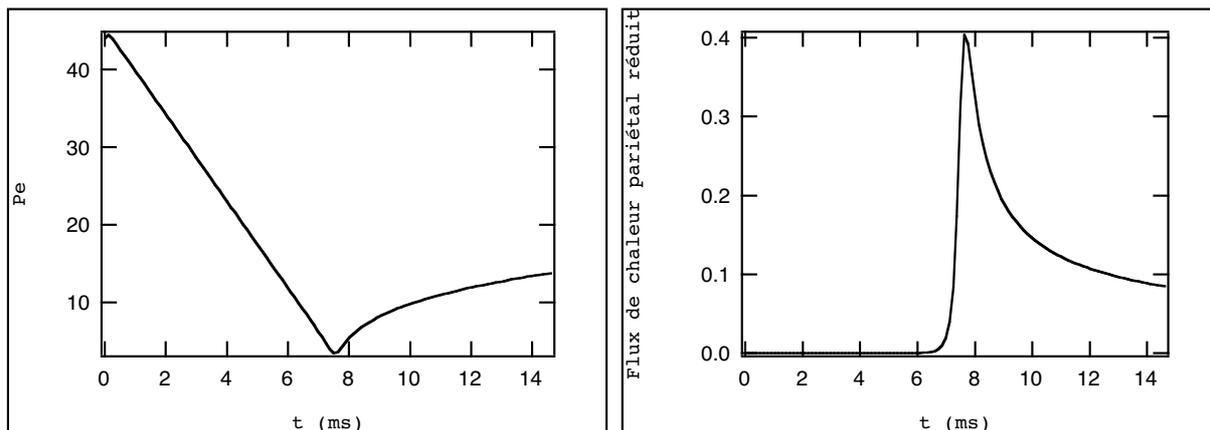


FIG. 3.12 – Pe et flux de chaleur pariétal réduit en fonction du temps pour l'interaction flamme paroi sèche

seul cas sachant que le principe de l'interaction reste le même pour tous les cas. Le cas présenté est basé sur les paramètres suivants :

- Température de paroi $T_P = 300K$
- Température de flamme $T_F = 1200K$
- Modèle de film liquide par différences finies

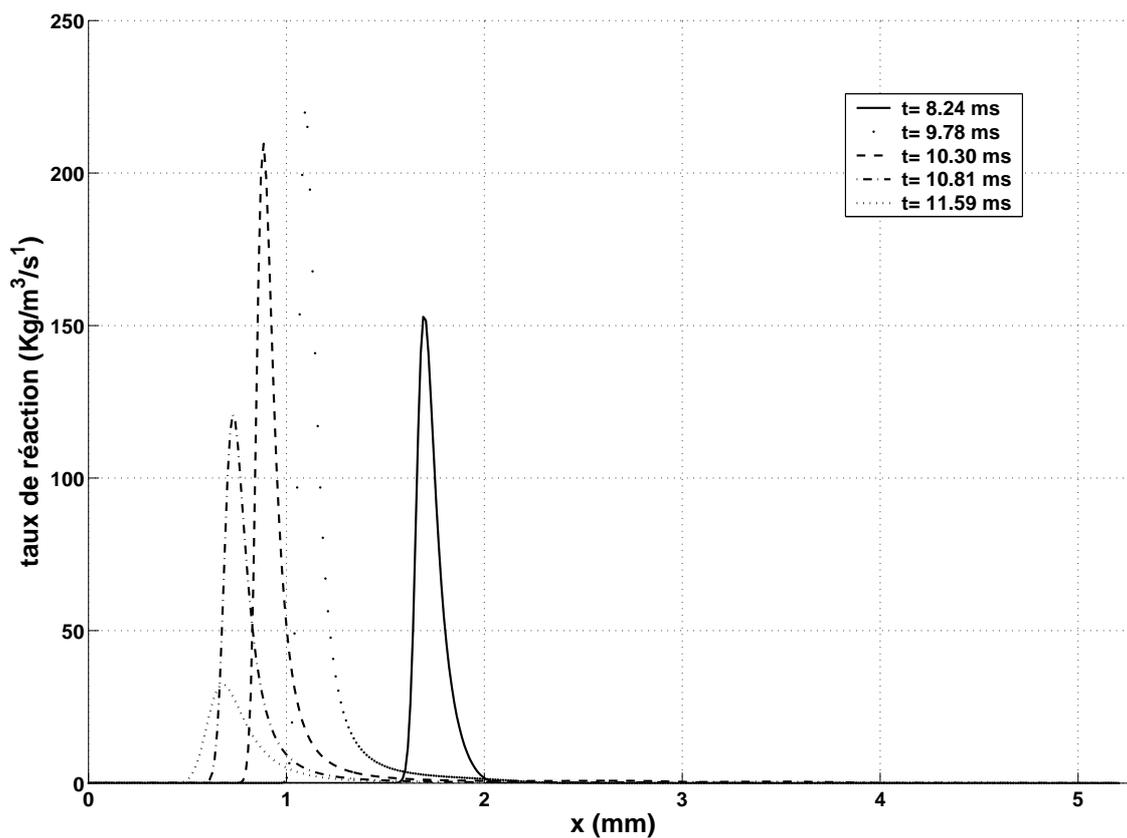


FIG. 3.13 – Taux de réaction en fonction de x à différents moments de l'interaction.

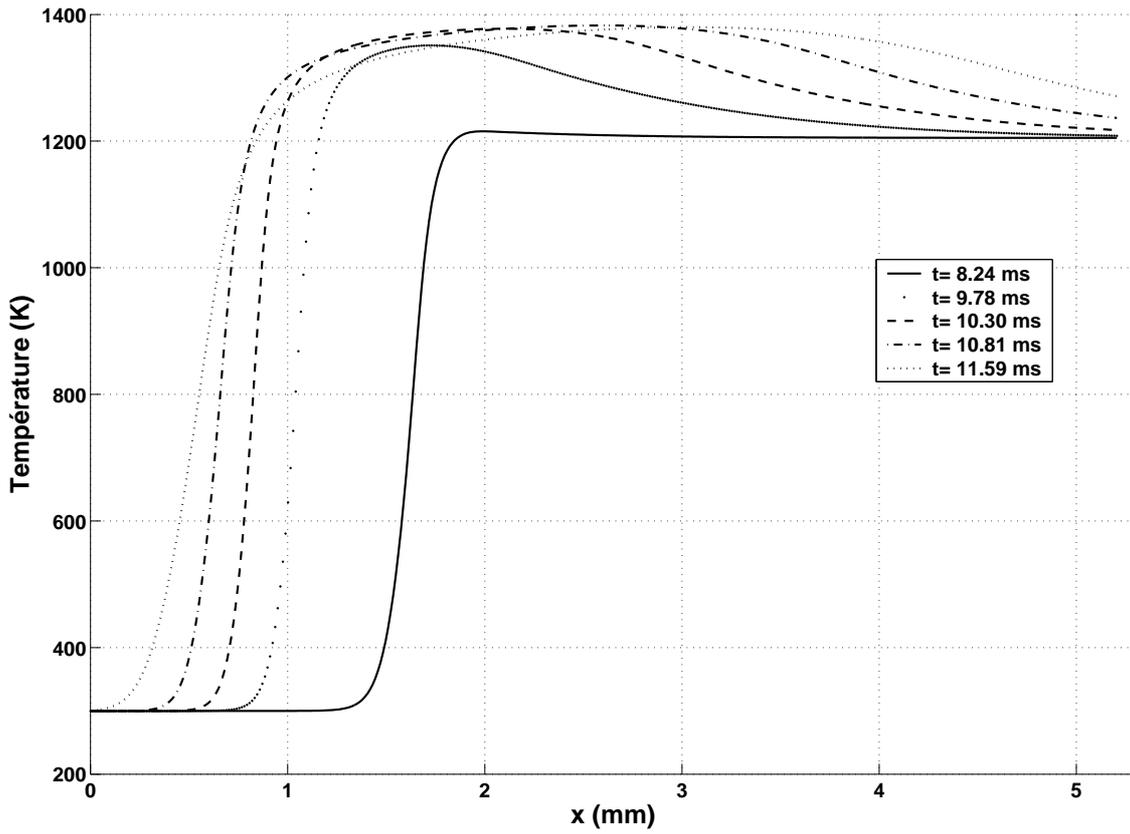


FIG. 3.14 – Température en fonction de x à différents moments de l'interaction.

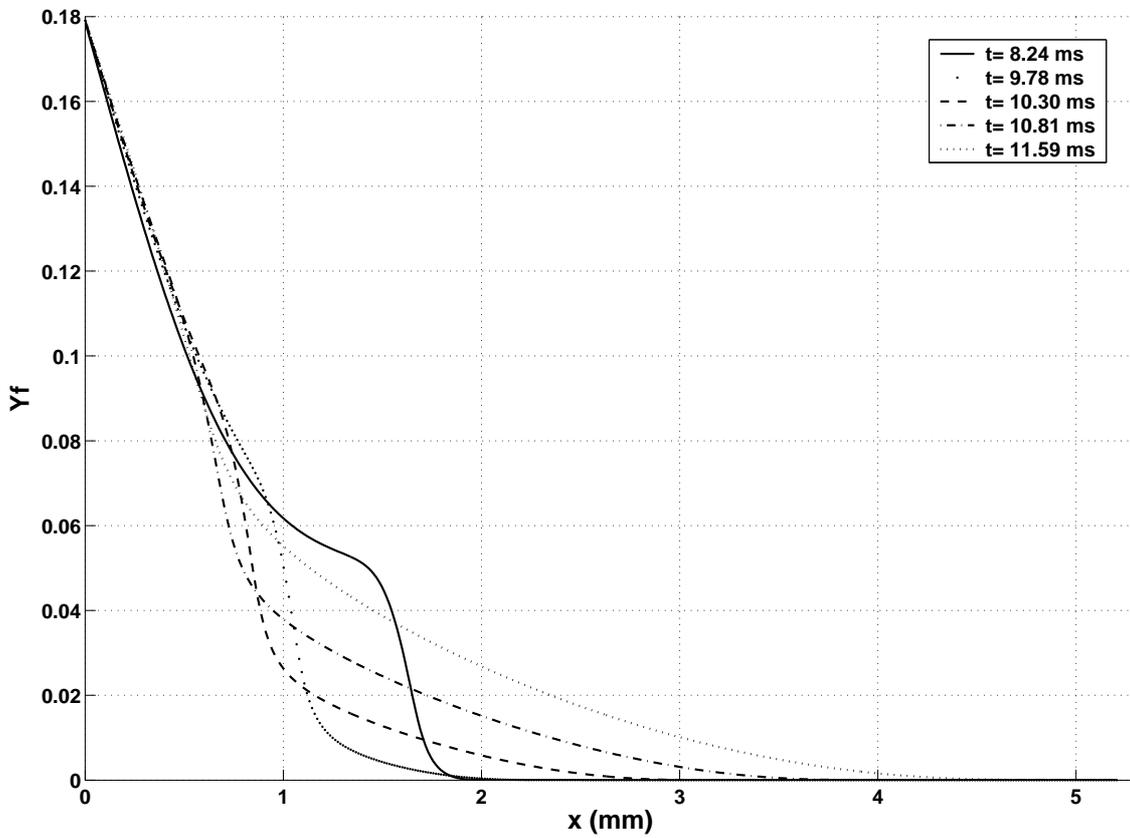


FIG. 3.15 – Fraction massique de fuel en fonction de x à différents moments de l'interaction.

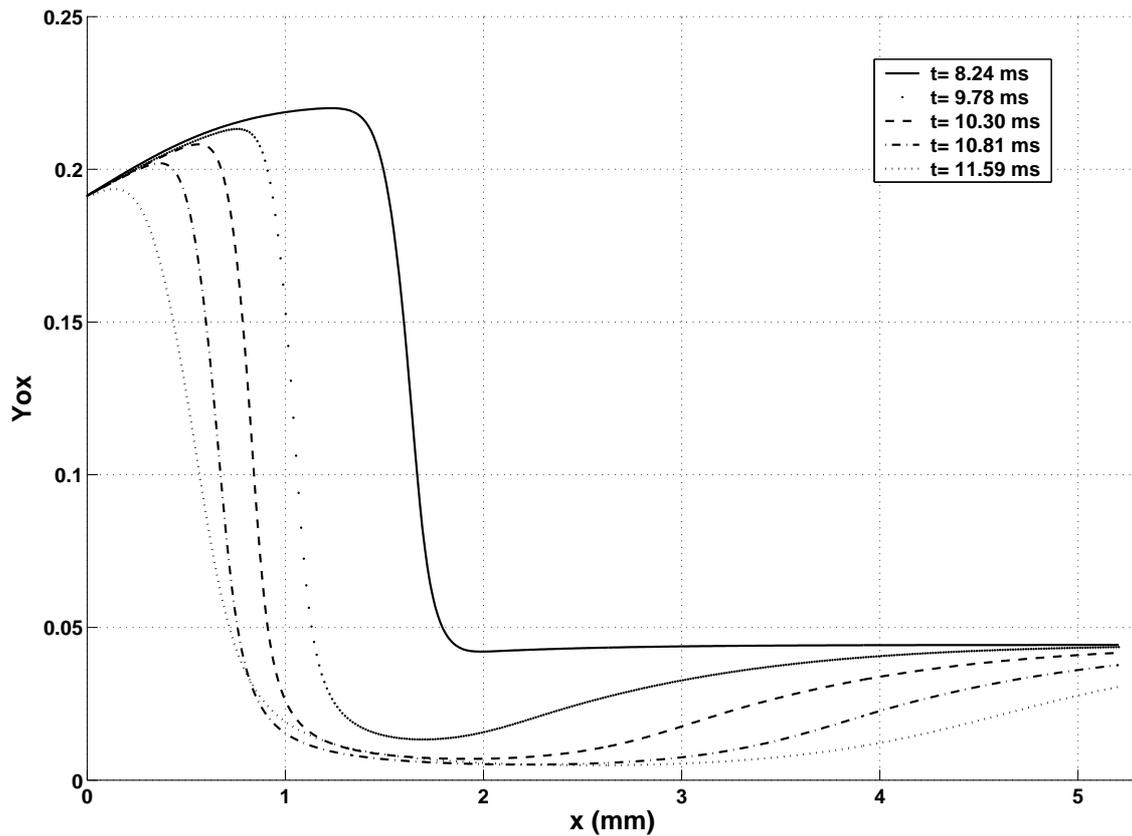


FIG. 3.16 – Fraction massique d’oxygène en fonction de x à différents moments de l’interaction.

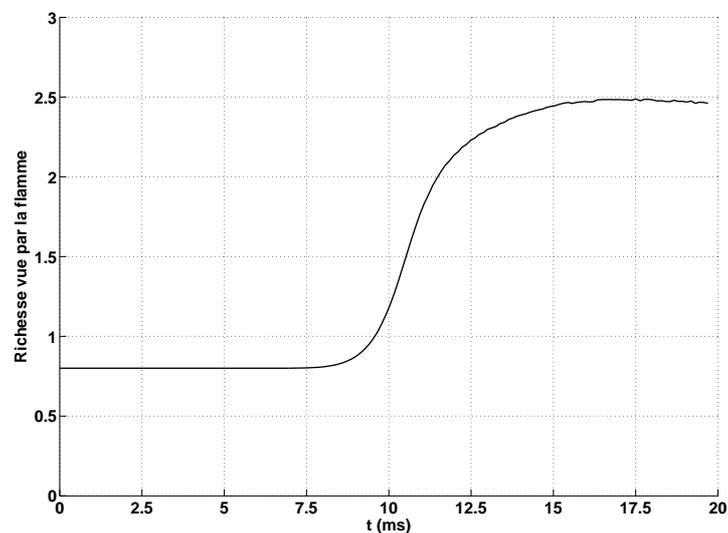


FIG. 3.17 – Richesse (calculée au point où le taux de réaction est maximal) vue par la flamme au cours du temps.

D’après la figure 3.13, on constate que l’interaction flamme film liquide se déroule de manière analogue à l’interaction flamme-paroi sèche. En effet, il existe également une zone près du film liquide où le taux de réaction est toujours nul : après s’être presque éteinte la flamme recule et s’éloigne du film liquide.

Cependant, quelques différences majeures apparaissent. Tout d’abord, la figure 3.13 montre que le taux de réaction de la flamme augmente de façon significative avant de

diminuer jusqu'à la quasi-extinction de la flamme, alors que les figures 3.15, 3.16 et 3.17 montrent que la richesse de la flamme augmente au cours de l'interaction. Ensuite, d'après la figure 3.14, on constate que les gradients de température près du film liquide semblent quasiment nuls pendant l'interaction.

Cela signifie que la flamme s'emballé puis s'éteint à cause du gradient de richesse entre le film liquide et la flamme et non à cause des pertes thermiques dans le film liquide et la paroi. L'interaction flamme paroi avec film liquide est donc **contrôlée au premier ordre par la préparation du mélange gazeux** contrairement à l'interaction flamme paroi-sèche qui est contrôlée par la thermique.

Etant donné que le mécanisme de l'interaction flamme film liquide n'est pas fonction des paramètres que l'on fait varier (modèle de film liquide utilisé, température de flamme T_F et valeur de T_P), nous allons maintenant simplement comparer les résultats quantitatifs obtenus pour différentes températures de paroi T_P .

3.3.4 Comparaison de l'interaction flamme-paroi sèche et de l'interaction flamme-paroi avec film liquide pour différentes températures de paroi T_P .

Afin de comparer les différents cas d'interaction flamme-paroi, nous avons tracé le nombre de Peclet qui représente la distance flamme-paroi adimensionnée par l'épaisseur caractéristique de la flamme, la vitesse de flamme, le flux de chaleur pariétal, la température interfaciale T_s , la fraction massique interfaciale de carburant Y_S^F , la masse surfacique du film liquide ainsi que son épaisseur en fonction du temps.

Tout d'abord, d'après la figure 3.18, on peut extraire trois résultats majeurs :

- La distance de coïncement pour l'interaction flamme film liquide est beaucoup plus importante que pour l'interaction flamme paroi sèche, ce qui s'explique par le fait que la flamme s'étouffe lorsqu'elle atteint les fortes richesses occasionnées par l'évaporation du film liquide. Il faut cependant garder à l'esprit que les résultats pourraient être sensiblement différents dans un cas moteur réel. En effet, la pression qui règne dans la chambre de combustion d'un moteur au moment de l'interaction flamme film liquide est beaucoup plus élevée que la pression atmosphérique considérée dans ce chapitre. Cela a pour conséquence directe de diminuer la fraction massique du fuel à l'interface liquide-gaz Y_F^s et donc de diminuer la distance de coïncement pour une température de paroi T_P identique. La turbulence et le caractère tridimensionnel d'un moteur à piston réel doivent également modifier ces résultats mais sans doute pas les tendances observées.
- La distance de coïncement n'est que très peu dépendante du modèle de film liquide utilisé, ce qui confirme que le modèle intégral constitue une bonne approximation pour traiter le problème de l'interaction flamme paroi, et pourra donc être utilisé ultérieurement dans le code RANS IFP-C3D.
- La distance de coïncement augmente de manière très significative avec la température de paroi T_P , alors que l'augmentation est beaucoup plus modérée lorsque l'on augmente la température de flamme T_F . Par ailleurs, une partie de cette augmentation résulte du fait que la chimie utilisée est légèrement différente selon la flamme considérée (température de flamme T_F de $1200K$ ou de $2500K$). Ces constatations sont logiques au regard des données des figures 3.20, 3.21 et 3.23. En effet, d'après les figures 3.21 et 3.23, l'augmentation de la température de paroi s'accompagne d'un échauffement proportionnel de la surface du film liquide et par conséquent d'une augmentation du débit évaporé

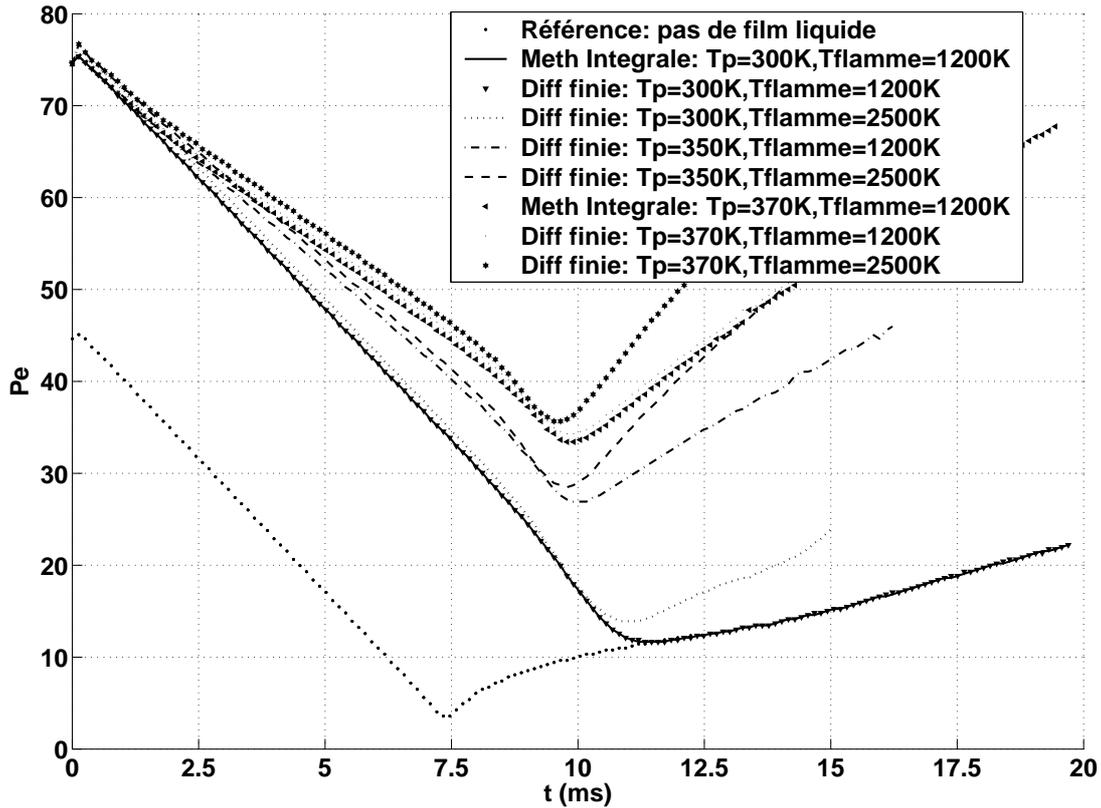


FIG. 3.18 – Evolution temporelle du Peclet pour différents cas d’interaction flamme paroi avec ou sans film liquide.

alors que la flamme n’a qu’une influence modérée sur le film liquide, et cela uniquement lorsque la température de paroi est suffisamment froide pour que l’évaporation soit lente et permette ainsi à la flamme de s’approcher assez près du film pour le chauffer. En réalité, si on se penche sur la courbe de la figure 3.20, on constate même que l’échauffement du film liquide par la flamme se produit après l’extinction de cette dernière, ce qui prouve que l’augmentation de l’évaporation qui s’en suit n’a aucune influence sur l’extinction de la flamme. Ce sont donc en fait les gaz brûlés qui sont à l’origine de l’échauffement du film, et c’est donc très certainement la différence de chimie utilisée suivant la température de flamme choisie qui est en majeure partie à l’origine de la légère augmentation de la distance de coincement avec la température de flamme T_F . Ceci nous permet également de conclure que la cinétique chimie a sans doute peu d’influence sur l’interaction flamme film liquide bien que son mécanisme soit gouverné par la chimie (extinction de la flamme liée à un mécanisme chimique).

Au niveau thermique, c’est donc la température de paroi qui joue le rôle le plus important dans l’interaction flamme-paroi avec film liquide et non la température de la flamme. C’est d’autant plus vrai que les simulations de ce chapitre sont effectuées en régime laminaire et en diffusion pure. Ainsi, le flux thermique entre la flamme ou les gaz brûlés et le film liquide est donc un flux conductif pur. L’impact de la flamme sur le film liquide pourra donc éventuellement être plus important dans un moteur automobile en fonctionnement que ne le laisse penser ces premiers résultats comme nous le verrons lors du chapitre 9.

Par ailleurs, les figures 3.17 et 3.19 confirment le fait que la flamme s’éteint à cause des fortes richesses près du film liquide. En effet, l’extinction de la flamme survient après

que l'activité de la flamme ait augmenté et se fait de manière plus progressive en présence du film liquide. En outre, lorsque la température de paroi augmente, on constate que l'extinction de la flamme se fait de manière un peu plus brutale, attestant le fait que la flamme s'étouffe parce que les gradients de richesse deviennent plus forts. En ce qui concerne les différences entre les deux modèles de film, elles sont également minimales sur la vitesse de flamme.

Ainsi, l'interaction flamme paroi avec film liquide est contrôlée de manière directe par la préparation du mélange et de manière indirecte (via l'évaporation) par la thermique, c'est-à-dire la température de paroi T_P . La pression des gaz au-dessus du film joue également un rôle déterminant comme nous le verrons lorsque l'on présentera les calculs moteurs effectués avec le code de calcul IFP-C3D au chapitre 9 puisque qu'elle intervient directement dans l'expression du débit de masse évaporé via la fraction massique du fuel à l'interface liquide-gaz.

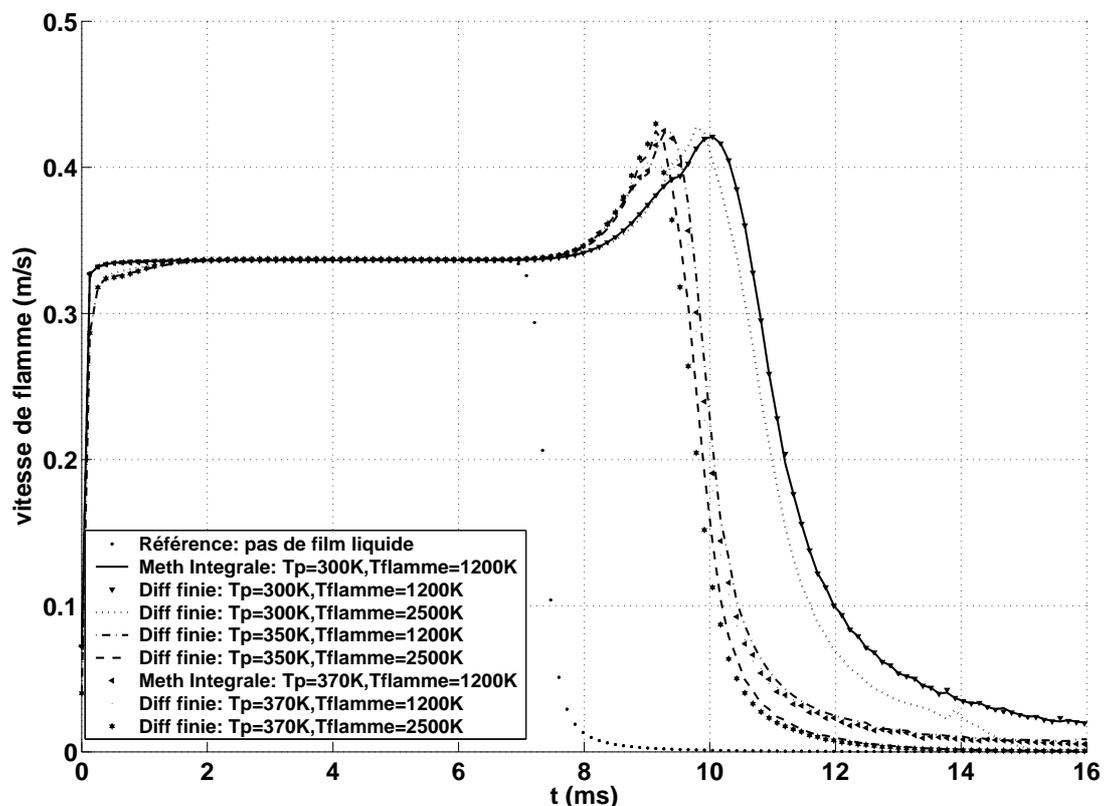


FIG. 3.19 – Evolution temporelle de la vitesse de flamme pour différents cas d'interaction flamme paroi avec ou sans film liquide.

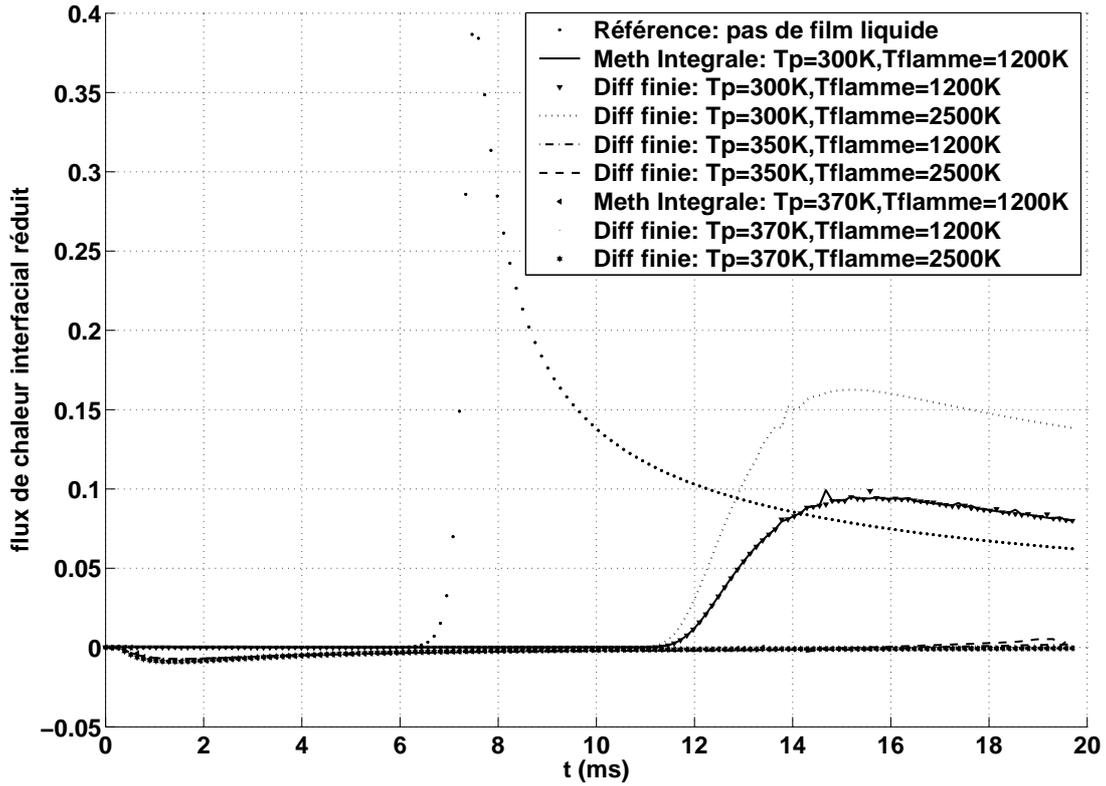


FIG. 3.20 – Evolution temporelle du flux de chaleur interfacial réduit dans le gaz pour différents cas d'interaction flamme paroi avec film liquide.

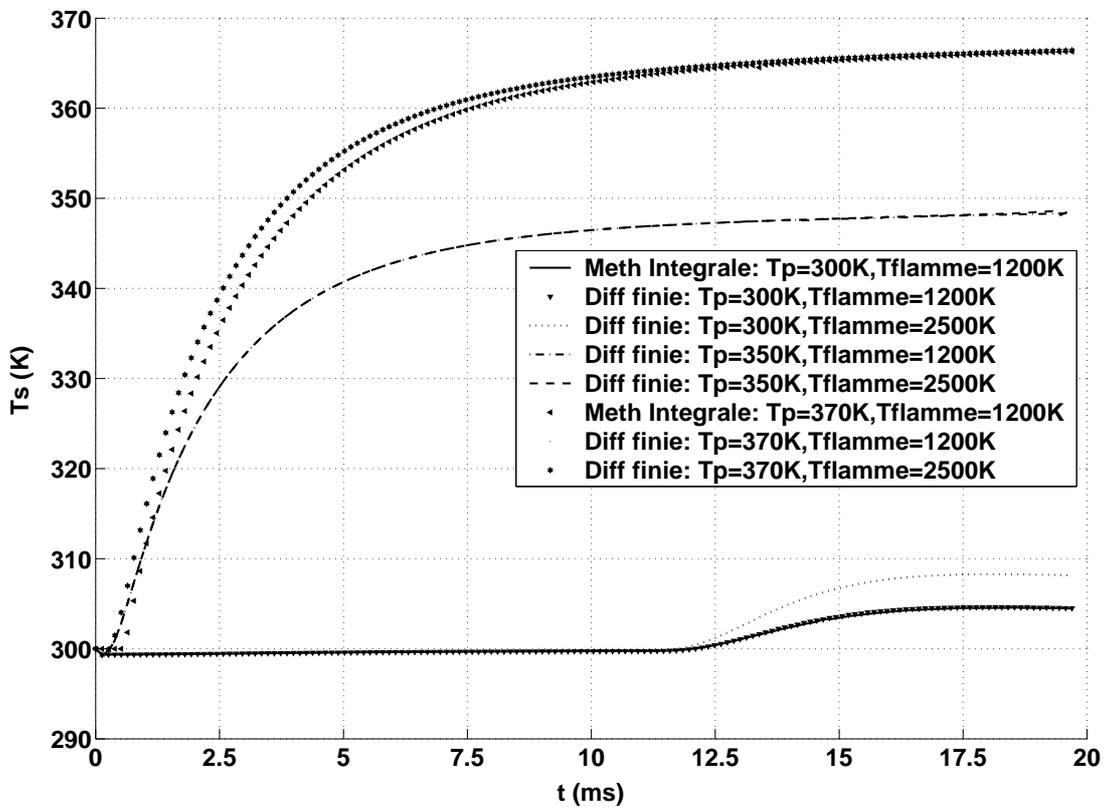


FIG. 3.21 – Evolution temporelle de la température interfaciale T_s en fonction du temps pour différents cas d'interaction flamme paroi avec ou sans film liquide.

De manière plus quantitative et afin de se rendre compte de la différence entre l'interaction flamme paroi avec et sans film liquide, le tableau 3.1 donne les distances de coincement pour différentes interactions flamme paroi. On constate ainsi que la présence d'un film liquide de carburant sur une paroi à la température T_P de $300K$ multiplie par environ un facteur 3.3 la distance de coincement par rapport à une paroi sèche. Par ailleurs, le passage de $T_P = 300K$ à $T_P = 350K$ entraîne une augmentation d'un facteur 2.3 de la distance de coincement alors que le passage de $T_P = 300K$ à $T_P = 370K$ entraîne une augmentation d'un facteur 2.9 de la distance de coincement. Les différences induites par la présence du film liquide, et par l'augmentation de la température de paroi T_P , sont donc très importantes selon ces premiers résultats. Nous verrons au chapitre 9 que la température de paroi T_P joue effectivement un rôle très important sur l'évaporation du film liquide et son interaction avec la combustion dans un moteur réel.

Film liquide	non	oui							
MI	non	oui	non	non	non	non	oui	non	non
MDF	non	non	oui	oui	oui	oui	non	oui	oui
T_F	1200K	1200K	1200K	2500K	1200K	2500K	1200K	1200K	2500K
T_P	300K	300K	300K	300K	350K	350K	370K	370K	370K
Pe_Q	3,5	11.7	11.7	13.9	26.9	28.5	33.4	34.3	35.7

TAB. 3.1 – Distance de coincement adimensionnée Pe_Q pour différents cas d'interaction flamme paroi avec et sans film liquide.

En ce qui concerne le film liquide et son évaporation, si on compare la figure 3.23 avec la figure 3.6 de la section précédente donnant les débits d'évaporation du film liquide sans combustion, on s'aperçoit que les écarts sont minimes. Les débits d'évaporation sont mêmes identiques lorsque la température de paroi T_P est chaude ($350K$ ou plus dans nos exemples). Cela signifie que la flamme n'a aucun impact sur l'évaporation du film liquide lorsque la température de paroi dépasse une certaine valeur critique qui doit certainement dépendre du temps d'existence du film liquide avant l'interaction avec la flamme. Maintenant, si on s'attarde sur les températures de paroi froides (typiquement $300K$), on constate que la flamme a un impact sur l'évaporation du film liquide mais qui reste modéré au regard de l'influence de la température de paroi comme en attestent les figures 3.23 et 3.21. Il faut rappeler en outre, que ce n'est pas directement la flamme qui affecte le film, mais les gaz chauds issus de la combustion après que la flamme se soit éteinte. Nous verrons au chapitre 9 que ces conclusions restent globalement valables dans un moteur réel pour l'interaction d'une flamme de prémélange avec un film liquide même si les raisons qui amènent ces conclusions peuvent différer. En revanche, nous verrons que l'interaction est différente avec une flamme de diffusion ou d'auto inflammation.

Pour en revenir à la comparaison entre le modèle intégral MI et le modèle par différences finies MDF, on s'aperçoit d'après les courbes 3.21, 3.26 et 3.27 que le comportement des 2 modèles est très proche. Cela prouve que la méthode intégrale fonctionne également bien lorsque la flamme impacte le film liquide, même si on ne tient pas compte de la profondeur de pénétration de la chaleur dans ce cas.

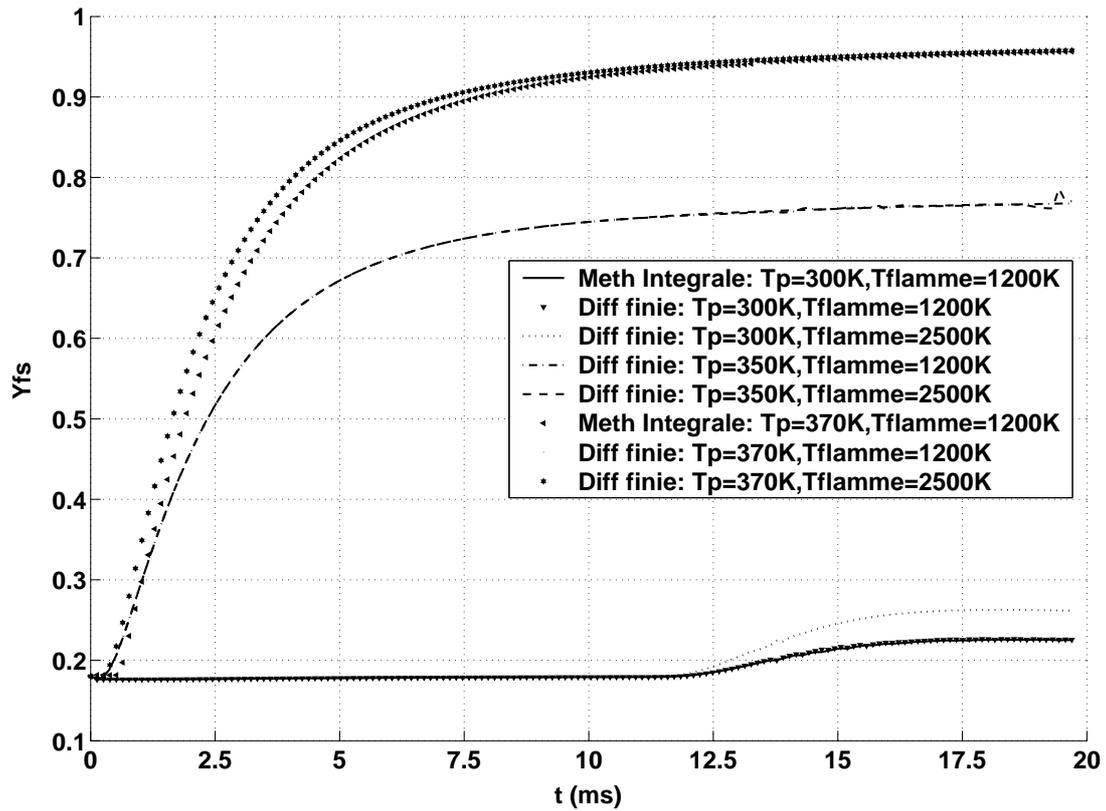


FIG. 3.22 – Evolution temporelle de la fraction massique interfaciale de carburant Y_S^F pour différents cas d'interaction flamme paroi avec ou sans film liquide.

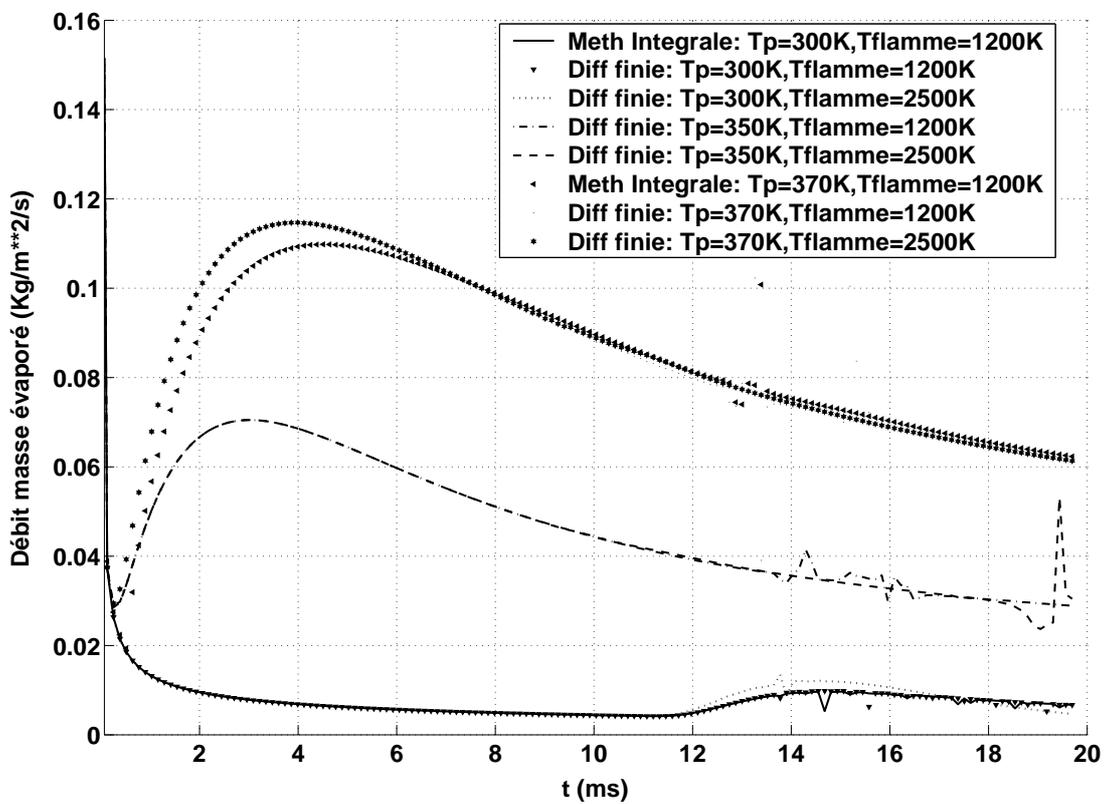


FIG. 3.23 – Evolution temporelle du débit massique évaporé \dot{M} pour différents cas d'interaction flamme paroi avec ou sans film liquide

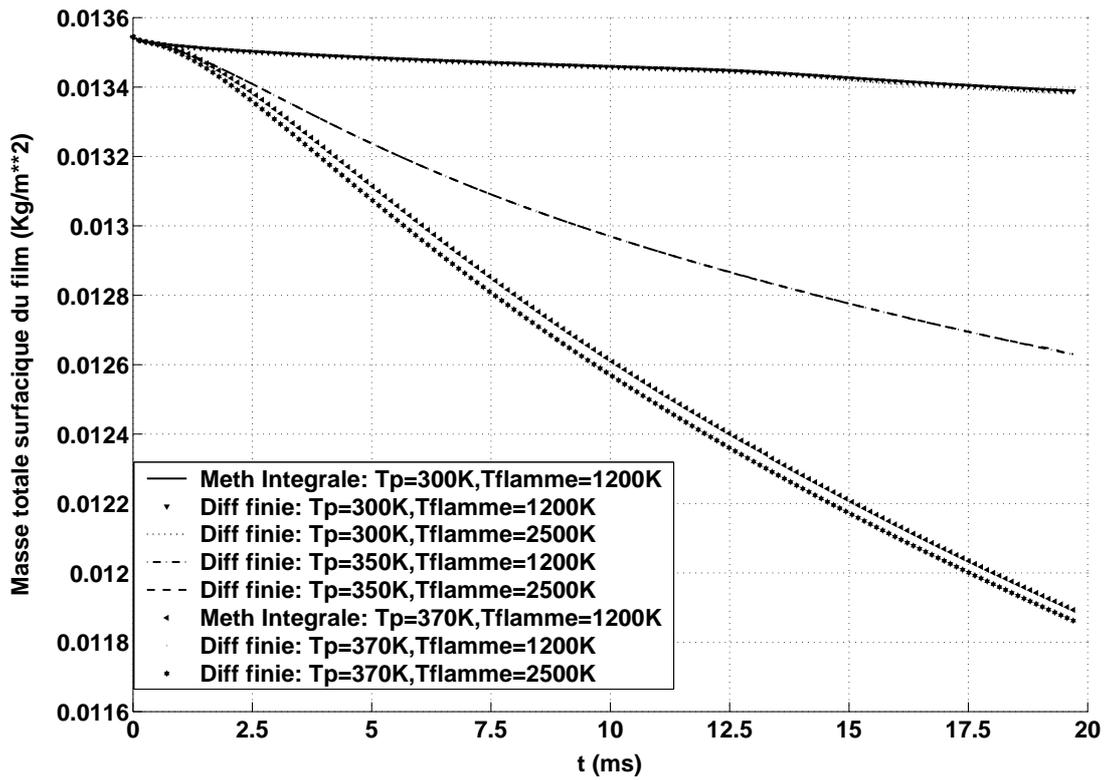


FIG. 3.24 – Evolution temporelle de la masse surfacique du film pour différents cas d’interaction flamme paroi avec ou sans film liquide.

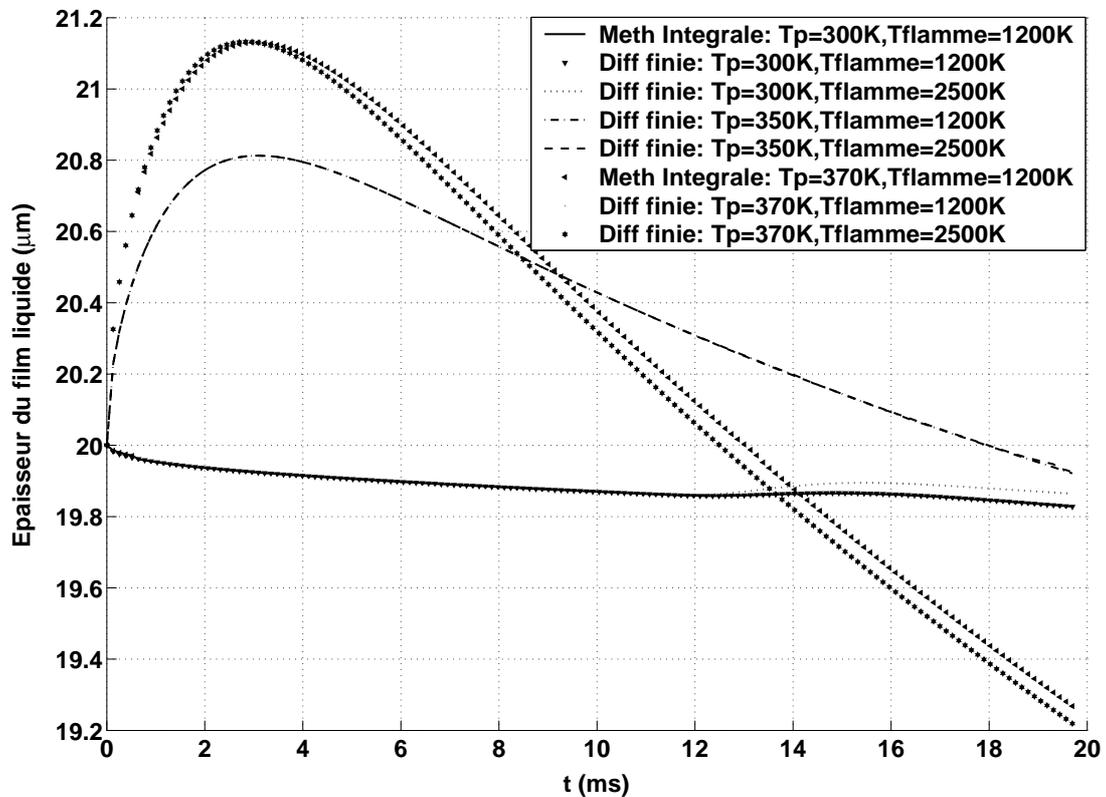


FIG. 3.25 – Evolution temporelle de l’épaisseur du film liquide pour différents cas d’interaction flamme paroi avec film liquide.

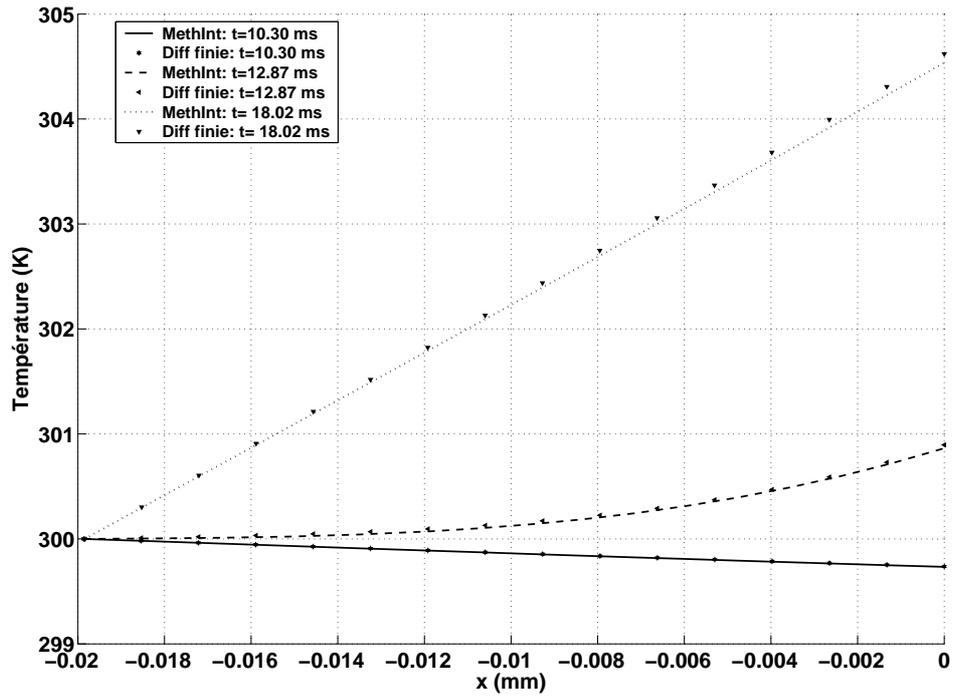


FIG. 3.26 – Profils de température dans le liquide ($x < 0$) pour $T_P = 300K$ et $T_F = 1200K$ à différents instants de l'interaction flamme film liquide. Le film est chauffé par les gaz brûlés après l'extinction de la flamme.

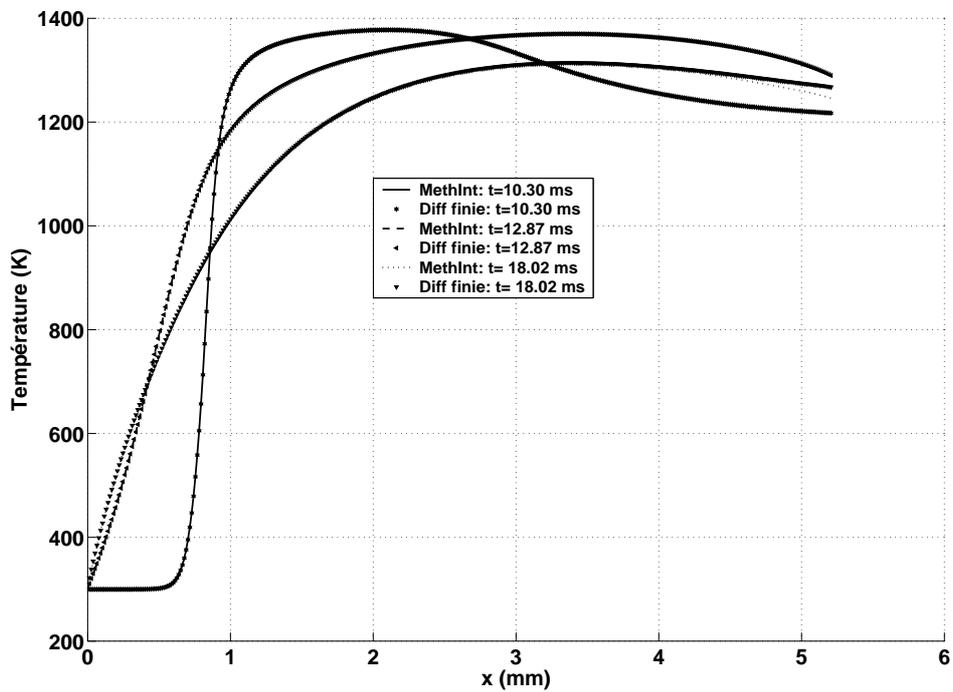


FIG. 3.27 – Profils de température dans le gaz ($x > 0$) pour $T_P = 300K$ et $T_F = 1200K$ à différents instants de l'interaction flamme film liquide.

Il convient maintenant de faire quelques remarques sur la validité de notre modélisation et de nos simulations :

- D’après les figures 3.24 et 3.25, on constate que le film liquide de carburant ne s’évapore que de 5 % au maximum en volume et de 13 % en masse pendant toute la simulation, ce qui valide à posteriori l’hypothèse faite selon laquelle le film liquide de carburant s’évapore lentement en ce qui concerne le modèle intégral MI.
- D’après la figure 3.25, on constate que nos modèles de film liquide prennent bien en compte la dilatation, et cela de manière presque similaire alors que la modélisation de la dilatation est quelque peu différente suivant le modèle utilisé, ce qui constitue une première validation de cette partie du modèle.
- Un calcul d’interaction flamme-paroi avec film liquide en utilisant un maillage deux fois plus fin que celui utilisé pour les calculs précédents nous a donné les mêmes résultats à 10^{-3} près. Cela signifie que notre modèle de film liquide est indépendant du maillage et que le maillage utilisé pour nos calculs jusqu’alors, est suffisamment fin pour résoudre notre problème.
- Le débit évaporé \dot{M} calculé par nos modèles de film liquide sera confronté à des mesures expérimentales ultérieurement.

Pour terminer cette étude, nous allons étudier l’influence d’un paramètre qui semble important : le temps d’existence du film avant interaction que l’on a pris jusqu’alors égal à 7,5 ms et qui est certainement gouverné par le régime moteur et l’avance à l’injection (AVI).

Remarque : Dans les moteurs, plus le jet liquide de carburant impacte tôt les parois de la chambre de combustion, plus le film liquide de carburant formé est important.

3.3.5 Influence du temps d’existence du film liquide avant l’interaction.

Afin de mener à bien cette étude, nous avons effectué deux simulations identiques à celles réalisées précédemment avec $T_F = 1200K$, mais en initialisant le calcul avec la flamme au centre du domaine ($x=2,65\text{mm}$). Ainsi, le temps d’existence du film liquide avant interaction est de 3,75 ms dans ce cas. On notera également que le modèle de film utilisé est le modèle MDF.

La figure 3.28 permet de comparer les distances de coïncement obtenues pour chacune des interactions flamme film liquide correspondant soit à un temps d’existence du film avant interaction différent, soit à une température de paroi T_P différente. On y a également indiqué le calcul d’interaction flamme-paroi sèche comme référence.

On constate que la distance de coïncement est plus petite lorsqu’on diminue le temps d’existence du film liquide avant interaction. En effet, on obtient $Pe_Q = 9,6$ avec $T_P = 300K$ et $Pe_Q = 21,3$ avec $T_P = 370K$, pour un temps d’existence du film liquide avant interaction de 3,75 ms. Cela représente une diminution de la distance de coïncement de 18% à froid et de 38% à chaud lorsque l’on divise par deux le temps d’existence du film avant interaction. Cette diminution de la distance de coïncement est logique dans la mesure où c’est l’évaporation du film liquide qui provoque l’extinction de la flamme. Donc, plus le film a le temps de s’évaporer, moins la flamme peut s’approcher de celui-ci. Cependant, malgré cette diminution de la distance de coïncement, le comportement de l’interaction reste le même. En particulier, on n’observe pas d’échauffement du film

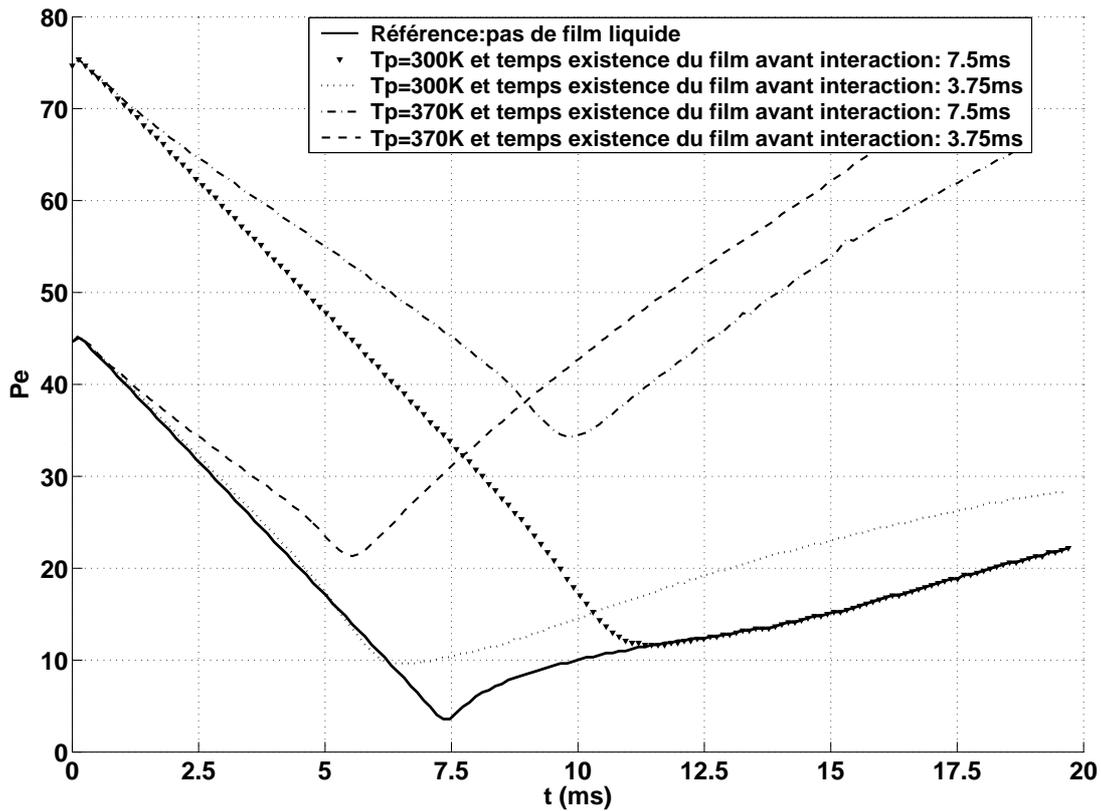


FIG. 3.28 – Evolution temporelle du Peclet pour différents temps d’existence du film liquide avant interaction ($T_P = 300$ ou $370K$).

directement par la flamme (avant que cette dernière ne soit éteinte). Pour autant, si on diminue drastiquement le temps d’existence du film avant l’interaction, on ne peut pas exclure le fait que la flamme chauffe directement le film avant de s’éteindre dans un régime hybride entre pertes thermiques et étouffement engendré par l’évaporation du film.

On remarque également que malgré cette diminution de la distance de coincement, celle ci reste entre 2 et 3 fois plus élevée que pour l’interaction flamme-paroi sèche.

Chapitre 4

Influence des propriétés thermodynamiques variables du gaz sur l'évaporation du film liquide.

Tous les résultats du chapitre précédent ont été obtenus avec le code de calcul NTMIX3D. Comme nous l'avons précisé lors du premier chapitre, les propriétés thermodynamiques du gaz sont quasiment toutes supposées constantes dans NTMIX3D, indépendantes de la composition des gaz et de la température. Or, la composition et (dans une moindre mesure) la température des gaz évoluent fortement au cours de l'évaporation, notamment près du film liquide, comme nous l'avons vu au chapitre 2. On peut donc se demander dans quelle mesure les résultats en thermochimie simple sont valides. Pour ce faire, nous allons utiliser la version en thermochimie complexe de NTMIX3D, qui porte le nom de NTMIX_CHEMKIN, avec un modèle de film liquide adapté.

4.1 Le code de calcul NTMIX_CHEMKIN

NTMIX_CHEMKIN est un code compressible de simulation numérique directe (DNS) qui utilise les mêmes schémas spatial et temporel que NTMIX3D. En revanche, contrairement à NTMIX3D, toutes les propriétés thermodynamiques du gaz sont dépendantes de la température et de la composition du mélange. En particulier, la masse molaire du mélange W et les coefficients de diffusion des espèces D_k ne sont plus fixés au début de la simulation comme c'est le cas dans NTMIX3D. Par ailleurs, la partie diffusive de NTMIX_CHEMKIN fait intervenir la vitesse de diffusion V_k d'une espèce k calculée de manière rigoureuse en utilisant les fractions molaires des espèces X_k . En outre, les effets Dufour et Soret sont pris en compte, respectivement dans le calcul du flux de chaleur q et de la vitesse de diffusion des espèces V_k .

Ainsi, dans NTMIX_CHEMKIN la vitesse de diffusion V_{kj} de l'espèce k dans la direction j s'écrit :

$$V_{kj} = -\frac{D_k}{X_k} \cdot \frac{\partial X_k}{\partial x_j} + \sum_{\alpha=1}^{N_{spec}} Y_\alpha \frac{D_\alpha}{X_\alpha} \cdot \frac{\partial X_\alpha}{\partial x_j} - \frac{D_k^T}{\rho_g Y_k} \cdot \frac{\partial (\log T)}{\partial x_j} + \sum_{\alpha=1}^{N_{spec}} Y_\alpha \frac{D_\alpha^T}{\rho_g Y_\alpha} \cdot \frac{\partial (\log T)}{\partial x_j} \quad (4.1)$$

où N_{spec} désigne le nombre d'espèces gazeuses et D_k^T désigne le coefficient de diffusion thermique de l'espèce k . Le premier terme de l'équation 4.1 décrit le flux d'espèce k engendré par la différence de concentration alors que le troisième terme décrit le flux d'espèce k engendré par un gradient de température et connu sous le nom d'effet Soret. Les deux termes sommes correspondent à la vitesse de correction qui garantit un flux diffusif total nul :

$$\sum_{\alpha=1}^{N_{spec}} Y_{\alpha} V_{\alpha j} = 0 \quad (4.2)$$

Le flux de chaleur q_j dans la direction j s'écrit quand à lui :

$$q_j = -\lambda_g \frac{\partial T}{\partial x_j} + \rho_g \sum_{\alpha=1}^{N_{spec}} H_{\alpha} Y_{\alpha} V_{\alpha j} - \frac{p}{\rho_g} \sum_{\alpha=1}^{N_{spec}} \frac{D_{\alpha}^T}{W_{\alpha} X_{\alpha}} \cdot \frac{\partial X_{\alpha}}{\partial x_j} \quad (4.3)$$

où H_{α} et W_{α} désignent respectivement l'enthalpie massique et la masse molaire de l'espèce α . Le premier terme de l'équation 4.3 correspond au flux de chaleur par conduction thermique (Fourier), alors que le second et le dernier terme correspondent respectivement au flux de chaleur par diffusion des espèces et à l'effet Dufour.

Enfin, le coefficient de diffusion D_k de l'espèce k dans un mélange constitué de N_{spec} espèces s'écrit :

$$D_k = \frac{1 - Y_k}{\sum_{\alpha \neq k}^{N_{spec}} \frac{X_{\alpha}}{D_{\alpha k}}} = \frac{\sum_{\alpha \neq k}^{N_{spec}} X_{\alpha} W_{\alpha}}{W \sum_{\alpha \neq k}^{N_{spec}} \frac{X_{\alpha}}{D_{\alpha k}}} \quad (4.4)$$

où W désigne la masse molaire du mélange, alors que $D_{\alpha k}$ désigne le coefficient de diffusion binaire de l'espèce α dans l'espèce k .

Etant donné les différences qui existent entre NTMIX_CHEMKIN et NTMIX3D, le modèle de film liquide présenté au chapitre 2 doit être modifié. Cette modification concerne plus particulièrement le calcul du débit évaporé \dot{M} qui dépend directement de la diffusion des espèces, et par voie de conséquence le calcul de la température de surface du film liquide T_s .

4.2 Le modèle de film liquide dans NTMIX_CHEMKIN

Le modèle de film liquide par différences finies (MDF) est adapté, et certaines approximations, implicites dans NTMIX3D mais non nécessaires dans NTMIX_CHEMKIN, ont néanmoins été conservées pour des raisons de simplicité.

Tout d'abord, étant donné que l'effet Soret n'affecte que les espèces de masse molaire faible ($W_k \leq 5$), il est négligé dans le modèle de film liquide dans la mesure où on ne considérera jamais d'espèces ayant des masses molaires aussi faibles.

Ensuite, le flux de chaleur interfacial gazeux φ_g ne contient que la conduction thermique. En effet, les deux derniers termes de l'équation 4.3 (effet Dufour et transport thermique par diffusion des espèces) sont le plus souvent négligeables devant la conduction thermique. Dans les rares cas où ce ne serait plus vrai, cela signifierait que la conduction thermique interfaciale dans le gaz est faible, donc négligeable devant le flux thermique interfacial dans le liquide φ_l . Ainsi, ces simplifications n'affecteraient en rien le calcul de la température de surface du film T_S .

4.2.1 Equations du modèle de film liquide de NTMIX_CHEMKIN

Les seules équations du modèle de film liquide qui sont modifiées par le passage de NTMIX3D à NTMIX_CHEMKIN sont les équations de conservation de masse car ce sont les seules équations concernées par la diffusion des espèces. Toutes les autres équations (Eq. 2.4, 2.5, 2.16, 2.17, 2.18 et 2.19) restent inchangées.

Etant donné que le film liquide n'est constitué que d'une seule espèce (le carburant), l'évaporation ne concerne que le fuel F . Ainsi, la continuité du flux de masse à travers l'interface liquide-gaz s conduit aux égalités suivantes :

$$\begin{aligned} \dot{M} &= \rho_{g,s} u_s \\ &= \rho_{g,s} u_s Y_F^s + \rho_{g,s} Y_F^s V_F^s \\ \text{soit } \dot{M} &= \frac{\rho_{g,s} Y_F^s V_F^s}{1 - Y_F^s} \end{aligned} \quad (4.5)$$

et $\forall k \neq F$,

$$\begin{aligned} 0 &= \rho_{g,s} u_s Y_k^s + \rho_{g,s} Y_k^s V_k^s \\ \text{d'où } u_s &= -V_k^s \end{aligned} \quad (4.6)$$

Or, d'après les approximations formulées en début de section, la vitesse de diffusion V_k^s à l'interface liquide-gaz selon la direction y , et pour toute espèce k , s'écrit :

$$V_k^s = -\frac{D_k^s}{X_s^k} \cdot \left(\frac{\partial X_k}{\partial y} \right)_s + \sum_{\alpha=1}^{N_{spec}} Y_s^\alpha \frac{D_s^\alpha}{X_s^\alpha} \cdot \left(\frac{\partial X_\alpha}{\partial y} \right)_s \quad (4.7)$$

Par conséquent, en utilisant les équations 4.6 et 4.7, on en déduit que $\forall k \neq F$:

$$\frac{D_k^s}{X_s^k} \cdot \left(\frac{\partial X_k}{\partial y} \right)_s = u_s + \sum_{\alpha=1}^{N_{spec}} Y_s^\alpha \frac{D_s^\alpha}{X_s^\alpha} \cdot \left(\frac{\partial X_\alpha}{\partial y} \right)_s = K \quad (4.8)$$

où l'on remarquera que K est indépendant de l'espèce k choisie.

Ainsi, la vitesse de diffusion du fuel V_F^s à l'interface liquide-gaz selon la direction y s'écrit :

$$V_F^s = (1 - Y_F^s) \left[-\frac{D_F^s}{X_F^s} \cdot \left(\frac{\partial X_F}{\partial y} \right)_s + K \right] \quad (4.9)$$

alors que la vitesse de diffusion V_k^s à l'interface liquide-gaz selon la direction y , et pour $\forall k \neq F$, s'écrit :

$$V_k^s = Y_F^s \left[\frac{D_F^s}{X_F^s} \cdot \left(\frac{\partial X_F}{\partial y} \right)_s - K \right] \quad (4.10)$$

Finalement, en introduisant dans l'équation 4.5 l'expression de V_F^s (Eq. 4.9, et après avoir substitué les fractions molaires par leurs expressions en fonction des fractions massiques, on obtient l'expression du débit massique évaporé \dot{M} :

$$\dot{M} = \frac{\rho_{g,s} Y_F^s}{W_s} \left[-\frac{D_F^s}{Y_F^s} \cdot \left(\frac{\partial W Y_F}{\partial y} \right)_s + K \right] \quad (4.11)$$

où K s'exprime désormais avec des fractions massiques et devient donc $\forall k \neq F$:

$$K = \frac{D_k^s}{Y_k^s} \cdot \left(\frac{\partial W Y_k}{\partial y} \right)_s \quad (4.12)$$

Dans cette expression, la masse molaire du mélange W_s à l'interface liquide-gaz nécessite de connaître les fractions massiques Y_k^s de toutes les espèces k à la surface du film liquide. On connaît déjà la fraction massique du fuel Y_F^s par la formule de Clausius Clapeyron (Eq. 2.4). Il reste donc à déterminer les fractions massiques Y_k^s de toutes les autres espèces k à l'interface liquide-gaz. Pour ce faire, on introduit dans l'équation 4.6 l'expression de V_k^s (Eq.4.10) et, on remplace les fractions molaires par leurs expressions en fonction des fractions massiques. Pour calculer les fractions massiques Y_k^s , il faut discrétiser les gradients. On choisit une discrétisation au 4eme ordre compatible avec le schéma de NTMIX_CHEMKIN. Finalement, on obtient l'équation 4.13 donnant les fractions massiques Y_k^s des espèces ($\forall k \neq F$) à la surface du film liquide :

$$\forall k \neq F, \quad Y_k^s = \frac{Y_F^s D_k^s c_Y^k}{W_s \left[\frac{12 \dot{M} dy_g}{\rho_{g,s}} + 25 Y_F^s (D_k^s - D_F^s) \right] + D_F^s c_Y^F} \quad (4.13)$$

où l'on a défini :

$$\forall k \in [1, N_{spec}], \quad c_Y^k = 48Y_k^2W_2 - 36Y_k^3W_3 + 16Y_k^4W_4 - 3Y_k^5W_5 \quad (4.14)$$

où les indices 2,3,4 et 5 représentent respectivement les 2,3,4 et 5ème noeuds du domaine gaz calculé dans NTMIX_CHEMKIN et compté à partir de la surface du film.

Le système d'équations du tableau 4.1 récapitule le modèle de film liquide MDF implanté dans NTMIX_CHEMKIN.

Equations couplées entre elles	$T(Numb) = T_P$
	$\forall j \in [2, Numb - 1], \quad \frac{\partial T}{\partial t}(j) = D_{th}(j) \frac{2T(j+1)dy(j-1) + T(j-1)dy(j) - T(j)(dy(j) + dy(j-1))}{dy(j)dy(j-1)[dy(j) + dy(j-1)]}$
Equations indépendantes	$Y_F^s = \frac{P_{ref}W_F}{P_sW_s} \exp \left[\frac{W_F L_V}{R} \left(\frac{1}{T_{ref}} - \frac{1}{T_s} \right) \right]$
	$\varphi_l(t) = \varphi_g(t) + M L_V$ $\dot{M} = \frac{\rho_{g,s}Y_F^s}{W_s} \left[-\frac{D_F^s}{Y_F^s} \cdot \left(\frac{\partial W_{Y_F}}{\partial y} \right)_s + \frac{D_k^s}{Y_k^s} \cdot \left(\frac{\partial W_{Y_k}}{\partial y} \right)_s \right]$
	$\frac{dm(t)}{dt} = -\dot{M}$
	$\int_0^{h(t)} \rho_l(y, t) dy = m(t)$
	$\forall k \neq F, \quad Y_k^s = \frac{Y_F^s D_k^s c_Y^k}{W_s \left[\frac{12\dot{M}dy_g}{\rho_{g,s}} + 25Y_F^s (D_k^s - D_F^s) \right] + D_F^s c_Y^F}$
	$\forall k, \quad c_Y^k = 48Y_k^2W_2 - 36Y_k^3W_3 + 16Y_k^4W_4 - 3Y_k^5W_5$
	$\frac{1}{W_s} = \sum_{k=1}^{N_{spec}} \frac{Y_k^s}{W_k}$

TAB. 4.1 – Equations gouvernant le modèle de film liquide avec méthode par différences finies implanté dans NTMIX_CHEMKIN

4.2.2 Algorithme du modèle de film liquide dans NTMIX_CHEMKIN

L'algorithme de la figure 4.1 indique de manière schématique la façon dont est codé le modèle de film liquide dans NTMIX_CHEMKIN.

Afin de dériver une équation pour T_s , on procède de la même façon que ce qui a été fait dans NTMIX3D. Le seul changement dans le résultat obtenu incombe à l'expression du débit massique évaporé \dot{M} qui est très différente entre NTMIX3D et NTMIX_CHEMKIN. On obtient ainsi l'équation $f_{ntchem}(T_s^{n+1}) = 0$ dont la résolution donne T_s^{n+1} :

$$\begin{aligned} f_{ntchem}(T_s^{n+1}) &= 0 \\ &= M_{dcg} (c_T - 25T_s^{n+1}) + M_{dcl} (T(2)^{n+1} - T_s^{n+1}) + \\ &A \exp \left[\frac{-a_g}{T_s^{n+1}} \right] \left[-\frac{D_k^s c_Y^k}{(Y_k^s)^{n+1}} + 25W_s (D_k^s - D_F^s) \right] + c_Y^F D_F^s \quad (4.15) \end{aligned}$$

Dans cette équation, k désigne n'importe quelle espèce différente du fuel, et on a posé :

$$A = \frac{P_{ref}W_F}{P_sW_s} \exp \left[\frac{W_F L_V}{R T_{ref}} \right] \quad ; \quad a_g = \frac{W_F L_V}{R} \quad ; \quad M_{dcl} = \frac{12\lambda_l W_s dy_g}{\rho_{g,s} L_V dy(1)} \quad ; \quad M_{dcg} = \frac{\lambda_g W_s}{\rho_{g,s} L_V}$$

où dy_g et $dy(1)$ représentent respectivement le pas d'espace dans le gaz dans la direction normale au film et le premier pas d'espace dans le liquide.

et

$$\begin{aligned}c_T &= 48T_{g,2}^{n+1} - 36T_{g,3}^{n+1} + 16T_{g,4}^{n+1} - 3T_{g,5}^{n+1} \\c_Y^k &= 48(Y_k^2)^{n+1}W_2 - 36(Y_k^3)^{n+1}W_3 + 16(Y_k^4)^{n+1}W_4 - 3(Y_k^5)^{n+1}W_5, \forall k \in [1, N_{spec}]\end{aligned}$$

où les indices 2,3,4 et 5 représentent respectivement les 2,3,4 et 5ème noeuds du domaine gaz.

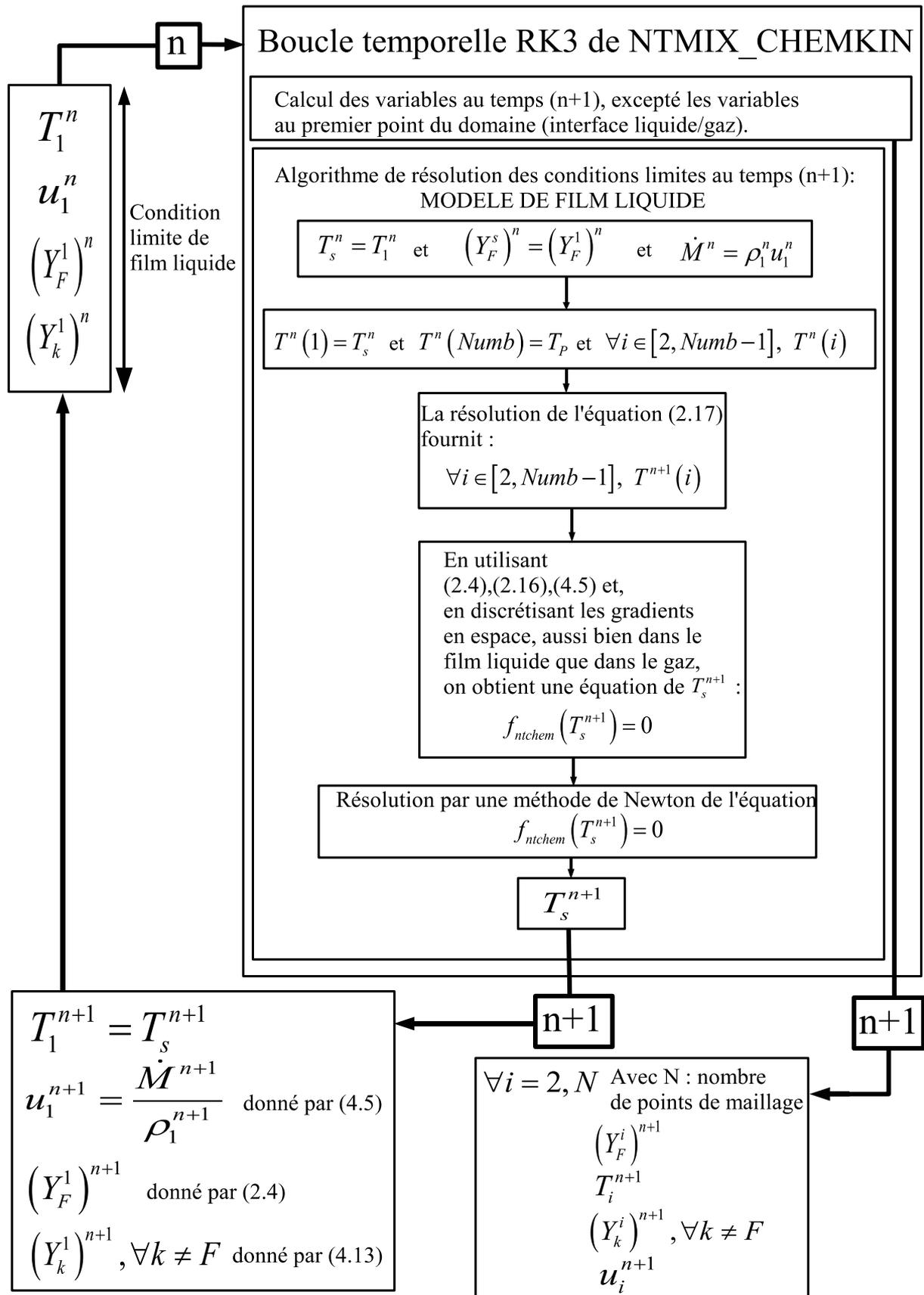


FIG. 4.1 – Algorithme schématique du modèle de film liquide par différences finies codé dans NTMIX_CHEMKIN.

4.3 Comparaison de l'évaporation d'un film liquide en thermo- chimie simple et en thermochimie complexe

Afin de mesurer l'influence sur l'évaporation des propriétés thermodynamiques variables du gaz, les résultats d'évaporation de film liquide obtenus avec les modèles MDF de NTMIX3D et NTMIX_CHEMKIN sont comparés pour des températures de paroi T_P de 300K et 370K. Les paramètres des calculs sont ceux utilisés pour les calculs en thermochimie simple (chapitre 2). On rappelle notamment que le domaine de calcul est unidimensionnel et mesure 5.3 mm. Il est discrétisé par un maillage de 401 points.

D'après les figures 4.2 à 4.11, on constate que les évolutions temporelles de la température de surface du film T_s , de la fraction massique de fuel à l'interface liquide-gaz Y_F^s , du débit surfacique de masse évaporé \dot{M} , de la masse surfacique $m(t)$ et de l'épaisseur du film $h(t)$ ont la même allure avec les deux thermochimies, et cela quelle que soit la température de paroi T_P utilisée. Cela signifie que le comportement du film liquide est globalement le même avec ou sans propriétés thermodynamiques variables dans le gaz. Par contre, les niveaux quantitatifs diffèrent de manière conséquente entre NTMIX_CHEMKIN et NTMIX3D. Les écarts -faibles- sur la température T_s et la fraction massique de fuel Y_F^s à l'interface liquide-gaz sont la conséquence des écarts sur les débits évaporés. En effet, le débit évaporé \dot{M} , qui constitue la variable la plus représentative dès lors que l'on s'attache à quantifier l'évaporation, présente des niveaux très différents dans les deux cas. Cette différence est également à l'origine des différences observées sur la masse et l'épaisseur du film qui sont aussi conséquentes.

La différence relative de débit évaporé entre NTMIX3D et NTMIX_CHEMKIN $\frac{\dot{M}_{nt3d} - \dot{M}_{ntchem}}{\dot{M}_{ntchem}}$ pour chacune des températures de paroi ($T_P = 300K$ et $T_P = 370K$), tracée sur la figure 4.12, montre que le débit évaporé lorsque $T_P = 300K$ est environ 60% plus élevé avec NTMIX3D qu'avec NTMIX_CHEMKIN, alors qu'il est environ 30% plus faible (à $t=20ms$) lorsque la température de paroi $T_P = 370K$. NTMIX3D sur-estime donc le débit évaporé à froid alors qu'il le sous-estime à chaud. Cependant, il est très difficile d'identifier les mécanismes conduisant à ce résultat dans la mesure où les causes possibles sont très nombreuses. Mais en se rappelant que les propriétés influentes qui diffèrent entre les deux approches sont essentiellement la masse molaire du mélange W et les coefficients de diffusion des espèces D_k , on peut supposer que ce sont là les mécanismes des différences observées. Cette hypothèse est confortée par la possibilité d'ajuster le coefficient de diffusion du fuel D_F dans NTMIX3D pour d'obtenir un débit d'évaporation proche de celui de NTMIX_CHEMKIN, à condition que la température d'interface liquide-gaz T_S reste constante au cours du temps. Ainsi, la valeur $D_F = 20.10^{-6}m^2s^{-1}$ pour l'heptane à une température de gaz de 300K dans NTMIX3D, donne un meilleur résultat que la valeur théorique de D_F qui est de $7.3.10^{-6}m^2s^{-1}$ dans ces conditions. En effet, avec une telle valeur de D_F , le débit serait sans doute moins surestimé à faible température de paroi, mais beaucoup plus sous-estimé encore à température de paroi élevée.

Il apparaît donc très important de bien ajuster la valeur des coefficients de diffusion des espèces D_k dans NTMIX3D si l'on veut reproduire au mieux les débits d'évaporation observés dans NTMIX_CHEMKIN. Cependant, il sera impossible de reproduire parfaitement les débits évaporés avec des coefficients de diffusion des espèces D_k constants lorsque la composition du mélange varie de manière importante. Il faudra donc à priori tenir compte de la thermochimie complexe dans les cas moteurs. Nous verrons en effet au chapitre 6 que l'impact des propriétés thermodynamiques variables dans le gaz sur

l'évaporation d'un film liquide reste très important en régime turbulent.

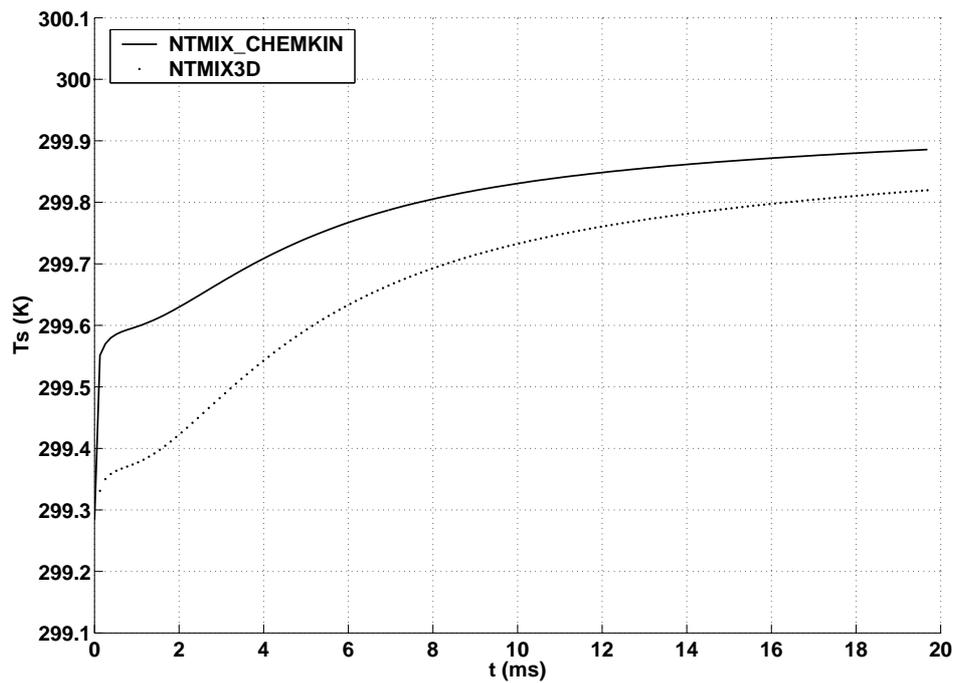


FIG. 4.2 – Evolution temporelle de la température d'interface T_S ($T_P = 300K$).

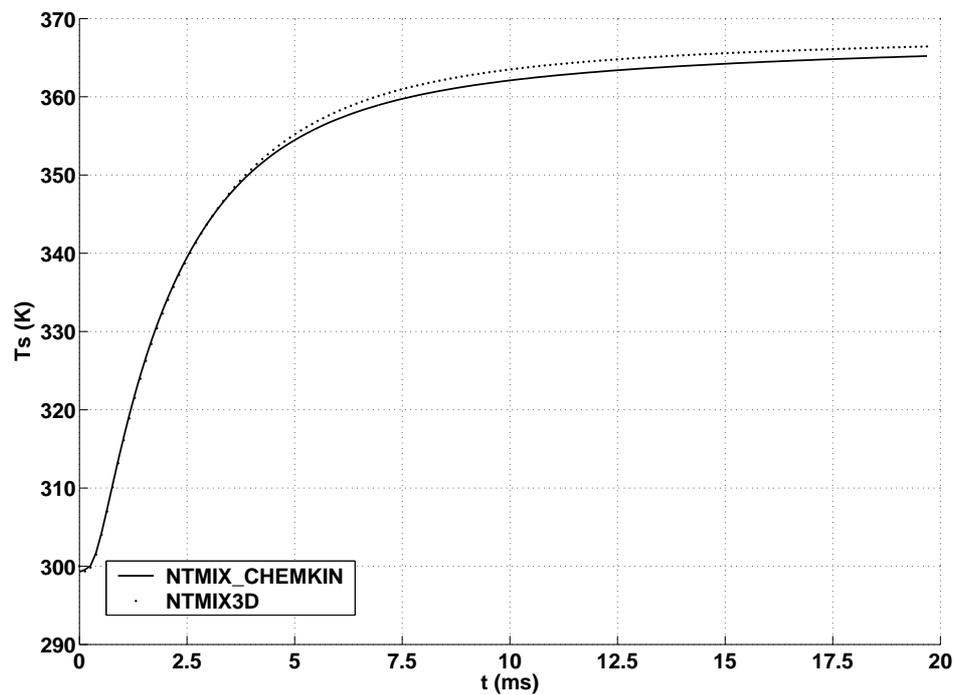


FIG. 4.3 – Evolution temporelle de la température d'interface T_S ($T_P = 370K$).

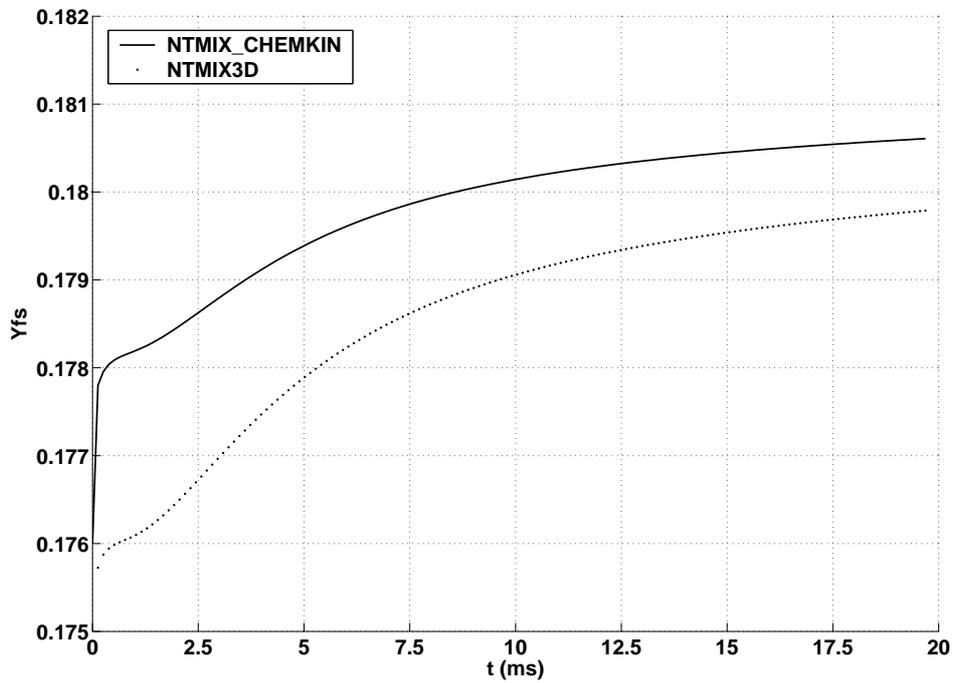


FIG. 4.4 – Evolution temporelle de la fraction massique de fuel Y_F^s ($T_P = 300K$).

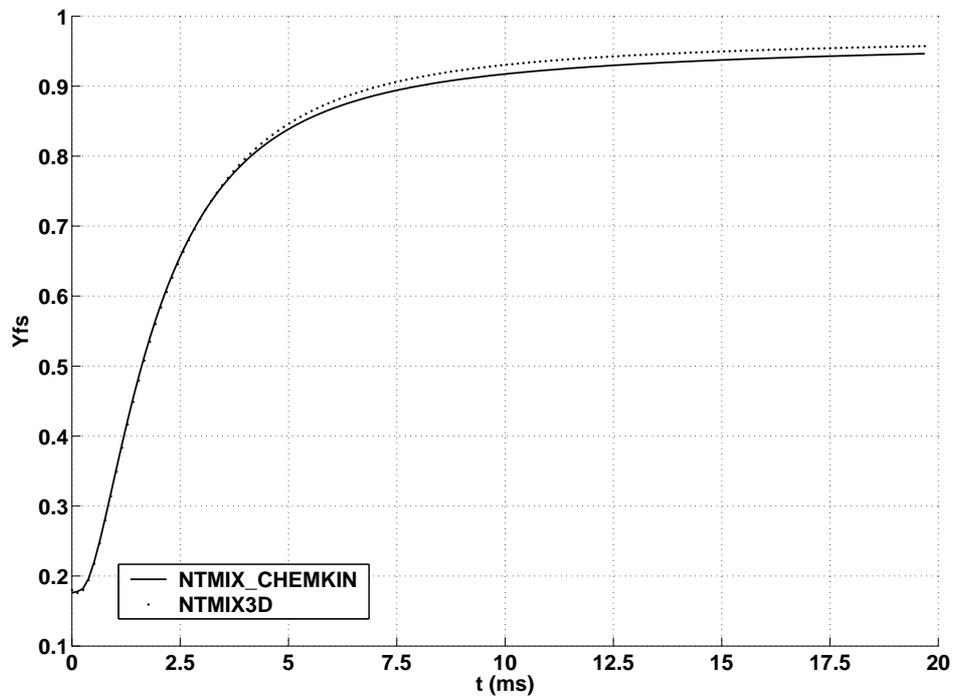


FIG. 4.5 – Evolution temporelle de la fraction massique de fuel Y_F^s ($T_P = 370K$).

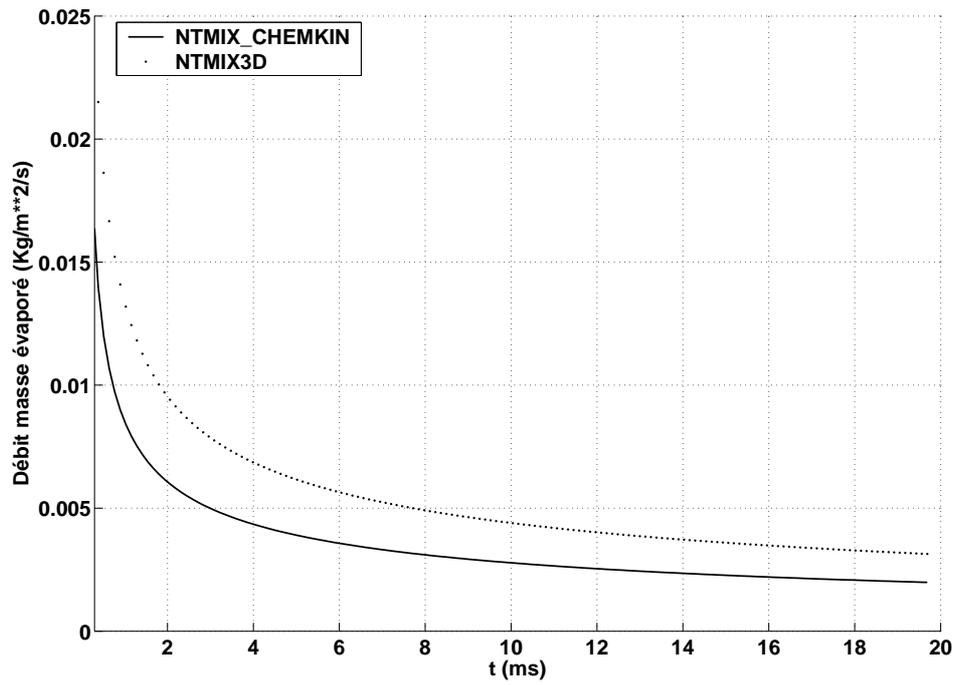


FIG. 4.6 – Evolution temporelle du débit surfacique de masse évaporé \dot{M} ($T_P = 300K$).

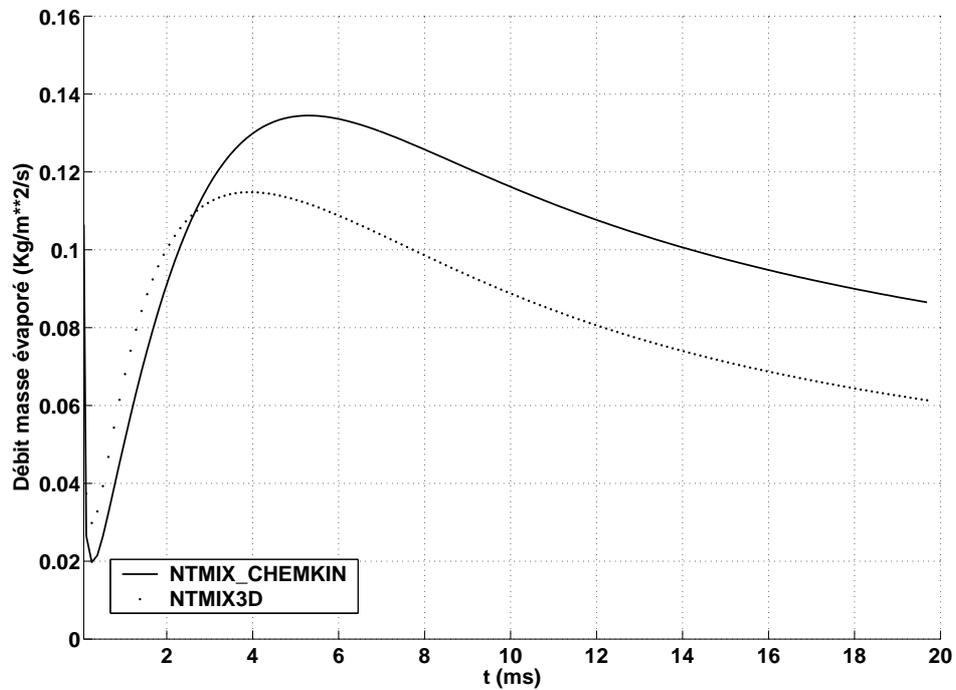


FIG. 4.7 – Evolution temporelle du débit surfacique de masse évaporé \dot{M} ($T_P = 370K$).

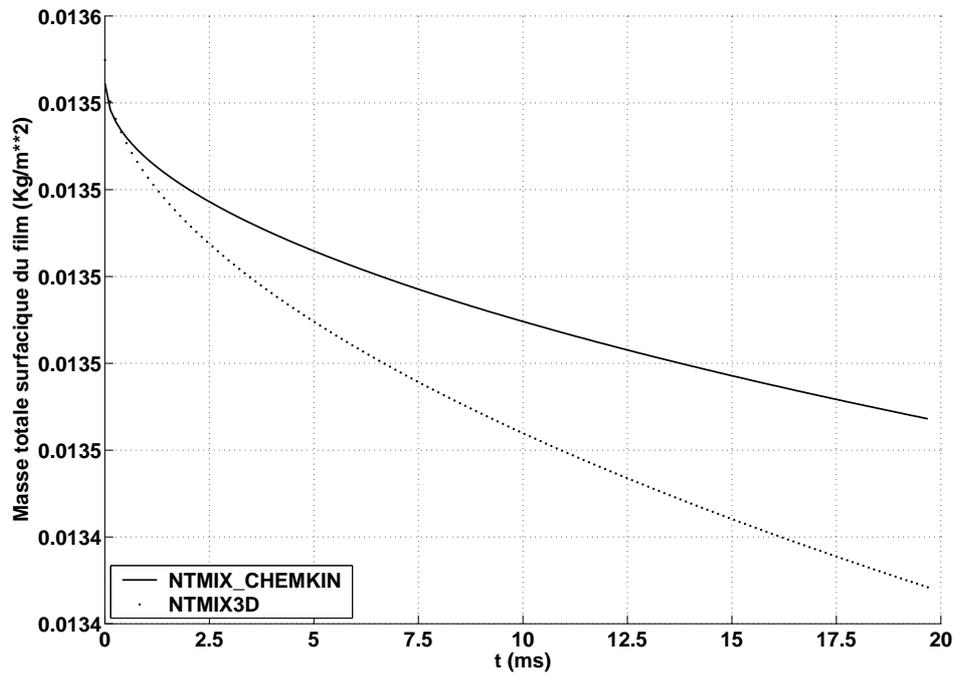


FIG. 4.8 – Evolution temporelle de la masse surfacique du film liquide ($T_P = 300K$).

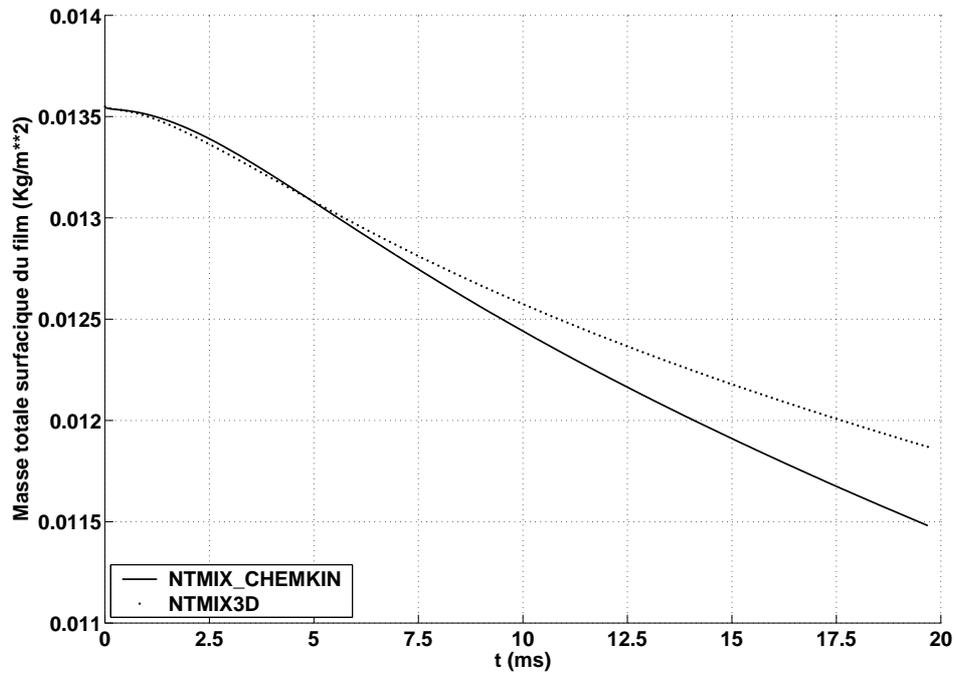


FIG. 4.9 – Evolution temporelle de la masse surfacique du film liquide ($T_P = 370K$).

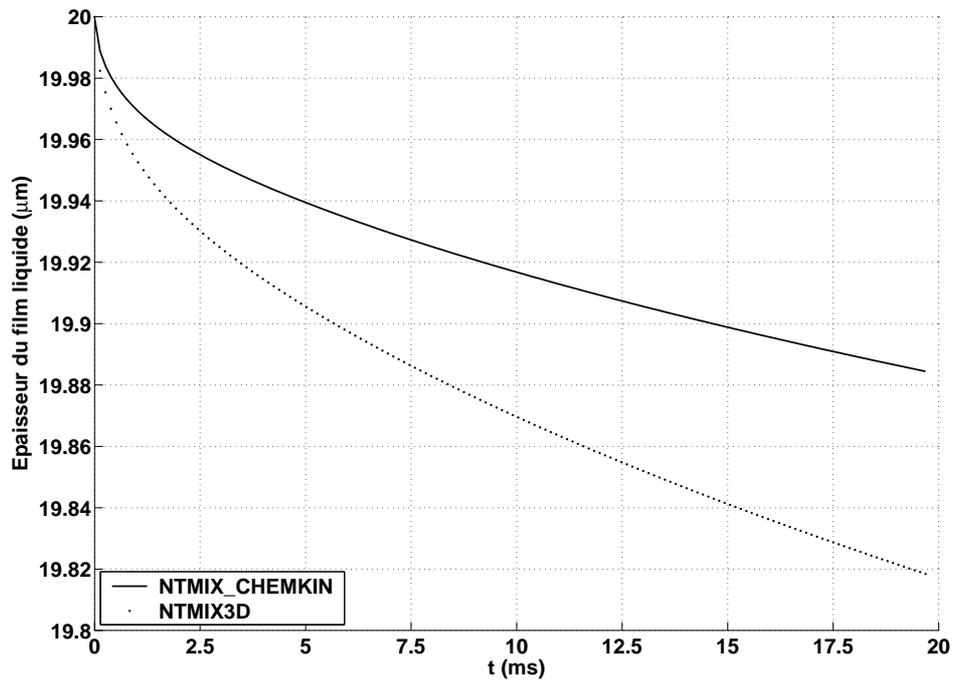


FIG. 4.10 – Evolution temporelle de l'épaisseur du film liquide ($T_P = 300K$).

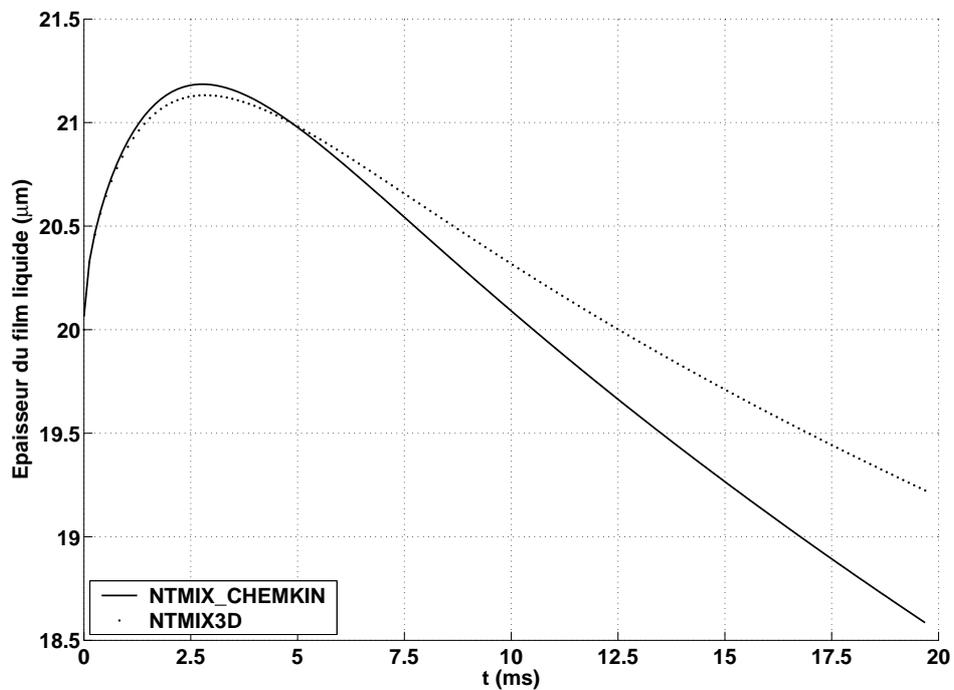


FIG. 4.11 – Evolution temporelle de l'épaisseur du film liquide ($T_P = 370K$).

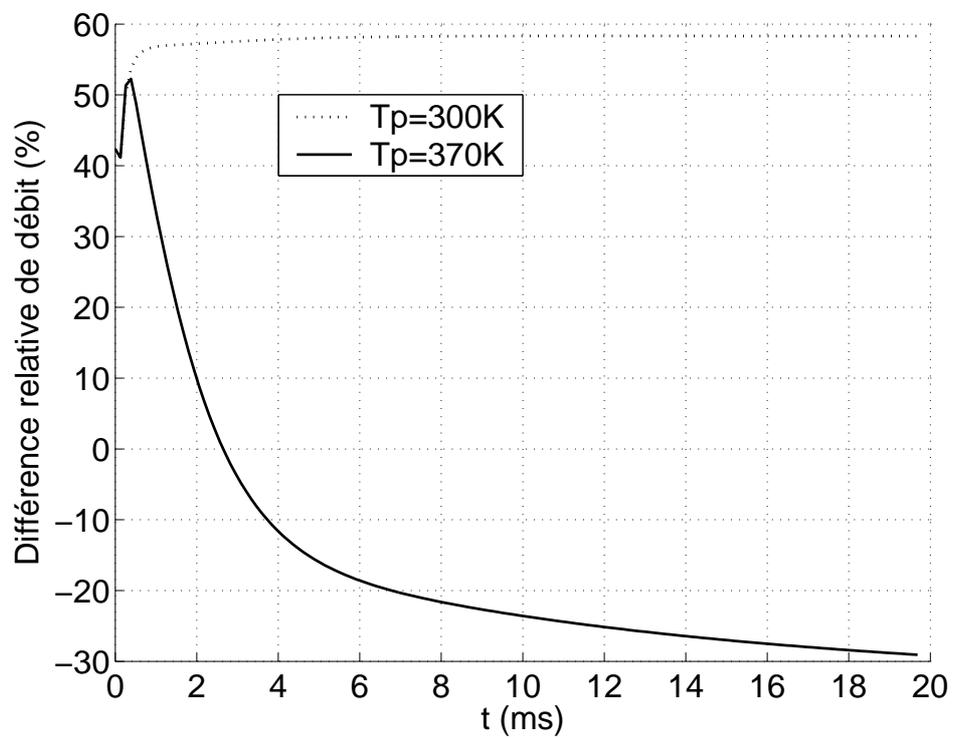


FIG. 4.12 – Evolution temporelle de la différence relative de débit évaporé entre NTMIX3D et NTMIX_CHEMKIN : $\frac{\dot{M}_{nt3d} - \dot{M}_{ntchem}}{M_{ntchem}}$.

Chapitre 5

Validations des modèles de film liquide codés dans NTMIX3D et NTMIX_CHEMKIN pour l'évaporation en configuration monodimensionnelle

Afin de situer le degré de confiance que l'on peut accorder aux résultats des chapitres précédents et à venir, nous avons cherché une configuration simple qui nous permettrait de comparer les résultats d'évaporation issus des codes NTMIX3D et NTMIX_CHEMKIN avec des mesures expérimentales. Après une étude bibliographique conséquente, nous avons constaté qu'il serait très complexe de comparer des mesures instationnaires avec nos calculs. En effet, les mesures disponibles concernent très souvent des temps d'évaporation pour des configurations industrielles complexes ou des gouttes posées sur une plaque plane [59, 40]. Nous en avons donc conclu que le meilleur moyen de faire des comparaisons, serait de trouver des mesures stationnaires de débit évaporé \dot{M} . C'est exactement ce que nous offre l'article de K.J Beverley [9]. De plus, il se trouve que la configuration expérimentale, bien que complexe dans l'absolu, est assimilable à une configuration monodimensionnelle, simple à reproduire numériquement. C'est ce que nous allons découvrir dans la section suivante.

5.1 Mesures expérimentales de Beverley

Le dispositif expérimental présenté dans l'article [9] permet de mesurer les débits d'évaporation de liquides purs par une méthode gravimétrique. Pour se faire, un tube contenant le liquide à évaporer est suspendu par un fil à une balance. Ainsi, le débit évaporé est mesuré par la différence de masse contenue dans le tube entre deux instants. La précision de la mesure vient du fait que le débit évaporé est stationnaire. En effet, le tube n'est pas rempli de liquide mais contient également un mélange de vapeur (issue de l'évaporation du liquide) et d'azote entre le liquide et le bord ouvert du tube (voir figure 5.1). Par ailleurs, un dispositif permet d'injecter de l'azote à 298K, qui coule verticalement autour du tube avec un débit GFR (Gas Flow rate $ml.min^{-1}$) fixé. Ainsi, la fraction

massique de fuel gazeux au niveau du bord ouvert du tube contenant le liquide Y_L^F est stationnaire et directement déterminé par le débit GFR . Enfin, le dispositif expérimental est contenu dans une enceinte thermostatée à 298K. Par conséquent, le débit évaporé \dot{M} est stationnaire, et les mesures de masse de liquide dans le tube peuvent être conduites à des intervalles de temps assez grands pour en déduire des débits évaporés précis. A ce propos, la reproductibilité des mesures montre une incertitude de 2 à 5% dans les mesures. Une vue schématique du dispositif est donnée sur la figure 5.1.

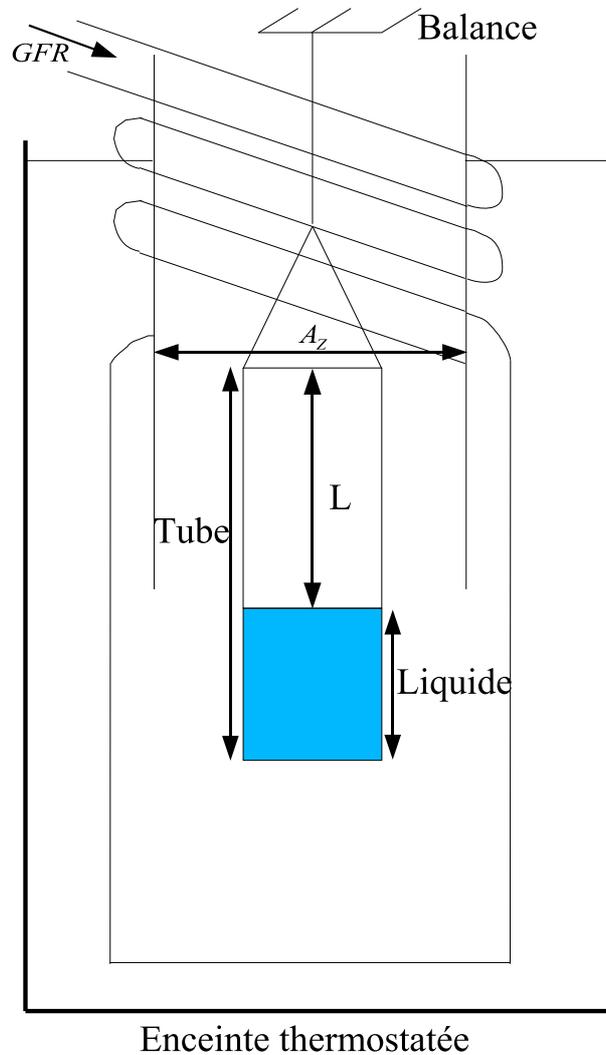


FIG. 5.1 – Vue schématique du dispositif expérimental de l'article de Beverley [9].

Bien que complexe et multidimensionnel, le dispositif expérimental peut être assimilé à une simple configuration monodimensionnelle dans nos simulations numériques. En effet, la partie complexe du dispositif ne sert qu'à assurer un débit évaporé stationnaire en fixant la fraction massique de fuel au bord ouvert du tube dans lequel se trouve le liquide. Par conséquent, dans nos simulations numériques, il suffit donc de considérer une configuration monodimensionnelle correspondant à un volume gazeux de longueur L , dans laquelle le liquide s'évaporant constitue la condition limite gauche du domaine, alors que la sortie du tube, assimilable à un mur poreux, constitue la condition limite droite du domaine. Une telle configuration numérique permet de reproduire le dispositif expérimental dans la mesure où une condition limite de type mur poreux assure bien une composition de mélange ainsi qu'une température fixée tout en laissant passer le gaz. La configuration

utilisée dans nos simulations numériques est donnée sur la figure 5.2.

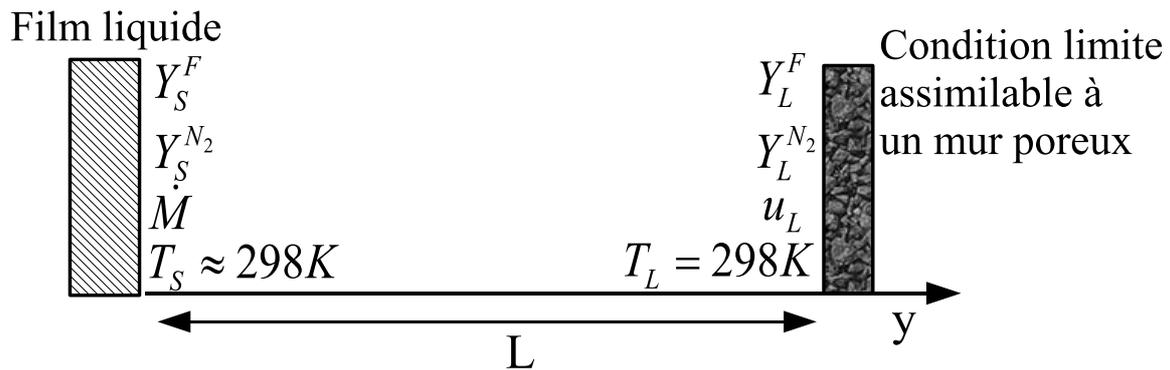


FIG. 5.2 – Configuration utilisée dans nos simulations numériques pour reproduire l'expérience de Beverley.

La difficulté pourrait cependant résider dans le fait de relier la fraction massique de fuel au bord ouvert du tube Y_L^F au débit d'azote GFR injecté dans le dispositif expérimental, mais il n'en est rien. En effet, d'après les mesures de l'article [9], il s'avère que les débits évaporés \dot{M} sont quasiment indépendants du débit d'azote injecté GFR , dès lors que ce dernier dépasse une certaine valeur critique. Nous choisirons donc une valeur de Y_L^F qui correspond à un GFR supérieur à la valeur critique de l'ordre de 1000 (voir figure 5.3), afin de minimiser les incertitudes liées à la correspondance entre Y_L^F et GFR . Par ailleurs, on peut déterminer approximativement la fraction massique Y_L^F associée à une valeur de GFR . C'est ce que nous allons montrer ci-dessous.

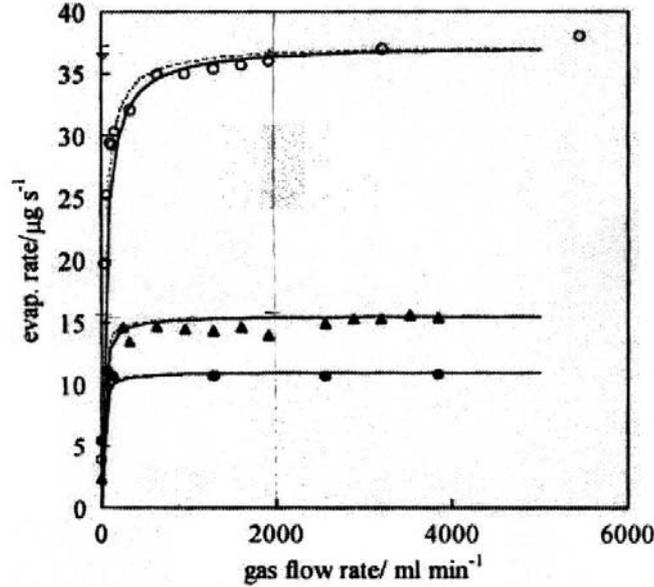


Fig. 3 Variation of heptane evaporation rate at 25°C with gas flow rate for various fixed values of h . In ascending order, the values of h are 34 (●), 24 (▲) and 10 mm (○). The solid and dashed curves are calculated using eqn. (9) with $M = 100$ g, $D = 6.1 \times 10^{-6}$ m² s⁻¹, $P = 45.85$ Torr and $A = 2.49 \times 10^{-4}$ m². The solid curves use the total cross sectional area of the vessel ($A_V = 1.26 \times 10^{-3}$ m²) whereas the dashed curves refer to the vessel area minus that of the sample tube (0.91×10^{-3} m²).

FIG. 5.3 – Mesures expérimentales de Beverley concernant le débit d’heptane évaporé \dot{M} en fonction du GFR [9].

D’après la conservation de la masse en régime stationnaire, le débit surfacique de masse évaporé dans le tube \dot{M} doit être équivalent au débit surfacique de masse qui sort par le bord ouvert du tube. Par conséquent, on peut écrire l’équation approximative 5.1 :

$$\dot{M} = Y_L^F \left(\rho_{N_2} \frac{GFR}{A_Z} + \dot{M} \right)$$

$$\text{d'où } GFR = \frac{\dot{M} (1 - Y_L^F) A_Z}{Y_L^F \rho_{N_2}} \quad (5.1)$$

Dans toute la suite de ce chapitre, le liquide à évaporer est de l’heptane comme c’était le cas dans tous les chapitres précédents. La valeur de la surface A_Z correspond approximativement à la surface de sortie du dispositif expérimental (figure 5.1) : $A_Z = 1.26 \cdot 10^{-3} \text{ m}^2$. La densité de l’azote à 298K est $\rho_{N_2} = 1.145 \text{ kg} \cdot \text{m}^{-3}$. Il convient de mentionner ici que le débit évaporé mesuré \dot{M} , et donc la valeur critique du GFR associée dépend de la distance L entre le liquide et le bord ouvert du tube. Dans nos simulations numériques, on utilisera deux valeurs de L , à savoir :

- $L = 10 \text{ mm}$
- $L = 24 \text{ mm}$

Dans nos calculs, nous avons choisi $Y_L^F = 0.005$. On suppose que cette valeur est assez faible pour que la valeur de GFR associée soit supérieure à la valeur critique. Afin de le

confirmer et ainsi connaître le débit évaporé expérimental \dot{M} associé, on utilise l'équation 5.1 avec les valeurs mentionnées dans l'article de Beverley [9], et le débit expérimental \dot{M} lu sur les paliers de la figure 5.3 pour chacune des valeurs L (h sur la figure). Les résultats sont consignés dans le tableau 5.1. On constate bien que les valeurs de GFR obtenues sont largement supérieures aux valeurs critiques correspondantes à chacune des valeurs de L . Ainsi, l'erreur commise sur la valeur expérimentale du débit évaporé \dot{M} correspondant à Y_L^F est comprise dans les incertitudes de mesure et de lecture du graphique donnant les valeurs de \dot{M} en fonction de GFR .

L en mm	GFR en $ml.min^{-1}$	GFR critique en $ml.min^{-1}$	\dot{M} en $Kg.m^{-2}.s^{-1}$
10	2000	1000	$1.47.10^{-4}$
24	800	500	$6.2.10^{-5}$

TAB. 5.1 – GFR et débit surfacique de masse évaporé \dot{M} expérimental correspondant à $Y_L^F = 0.005$.

Etant donné que la configuration utilisée dans nos simulations numériques est simple, il est possible de trouver une solution analytique du débit évaporé moyennant quelques approximations. C'est l'objet de la section suivante.

5.2 Développement analytique.

Afin de dériver une expression analytique du débit évaporé \dot{M} correspondant à la configuration de la figure 5.2, considérons l'équation monodimensionnelle de diffusion des espèces 5.2 (telle qu'elle est codée dans NTMIX3D), dans laquelle on a enlevé les termes stationnaires et de combustion puisque l'on cherche un débit stationnaire d'évaporation :

$$\frac{\partial}{\partial y} (\rho u Y_F) = \frac{\partial}{\partial y} \left(\rho D_F \frac{\partial Y_F}{\partial y} \right) \quad (5.2)$$

où u désigne la vitesse dans le gaz.

On peut ensuite éliminer ρ de l'équation 5.2. En effet, la température du gaz est pratiquement constante et égale à 298K. Ainsi, si on suppose que la masse volumique ρ ne dépend pas de la composition du mélange, mais que de la température comme c'est le cas dans NTMIX3D, $\rho \approx Cste$. Cette approximation permet également de supposer que la vitesse u est constante puisque le débit surfacique de masse doit être conservé en stationnaire.

L'intégration de l'équation 5.2 dans laquelle on a éliminé ρ et supposé $u \approx Cste$ conduit alors à l'équation 5.3 :

$$u Y_F = D_F \frac{\partial Y_F}{\partial y} + A \quad (5.3)$$

où A désigne une constante d'intégration.

Il suffit ensuite d'intégrer à son tour l'équation 5.3 pour obtenir l'équation 5.4 :

$$uY_F = e^{\frac{uy}{D_F} + Bu} + A \quad (5.4)$$

où B désigne une constante d'intégration.

On obtient les constantes d'intégration en écrivant les conditions limites relatives aux fractions massiques de fuel Y_F :

$$\begin{aligned} Y_F(0) &= Y_S^F \\ Y_F(L) &= Y_L^F \end{aligned}$$

et en les remplaçant dans l'équation 5.4.

On obtient ainsi le profil analytique de fraction massique de fuel Y_F :

$$Y_F = \frac{1}{1 - e^{\frac{uL}{D_F}}} \left[(Y_S^F - Y_L^F) e^{\frac{uy}{D_F}} + Y_L^F - Y_S^F e^{\frac{uL}{D_F}} \right] \quad (5.5)$$

Par ailleurs, on rappelle que l'expression du débit évaporé en diffusion simple (NT-MIX3D) est donnée par :

$$\dot{M} = \rho u = -\frac{\rho D_F (\nabla Y_F)_S}{1 - Y_S^F} \quad (5.6)$$

Par conséquent, en calculant le gradient de fraction massique $(\nabla Y_F)_S$ grâce à l'équation 5.5, et en remplaçant son expression dans l'équation 5.6, on obtient l'expression analytique du débit évaporé propre à la configuration de la figure 5.2 :

$$\dot{M} = \rho u = \frac{\rho D_F}{L} \ln \left(\frac{1 - Y_L^F}{1 - Y_S^F} \right) \quad (5.7)$$

Nous allons maintenant comparer les débits évaporés obtenus de manière expérimentale, analytique et numérique.

5.3 Comparaison des résultats numériques, analytiques et expérimentaux.

5.3.1 Paramètres des différents calculs

Nous avons réalisé quatre séries de calculs afin de valider au mieux l'évaporation de nos modèles de film liquide. Les séries se distinguent par la taille du domaine ($L = 10mm$

ou $L = 24mm$) et le code de calcul employé (NTMIX_CHEMKIN ou NTMIX3D). Chaque série de calcul comporte deux ou trois cas correspondant à différentes initialisations. En effet, comme les calculs sont très longs à converger, il serait tentant d'initialiser les calculs avec des profils qui se rapprochent de la solution à obtenir (profil analytique par exemple). Cependant, en faisant cela, il serait difficile de savoir si le code de calcul converge bien vers la valeur expérimentale puisque la solution est déjà fournie au code. C'est pourquoi, on initialise le profil de Y_F avec la solution analytique de la section précédente, modifiée afin d'obtenir des débits évaporés initiaux qui soient différents de la valeur convergée, tout en permettant une convergence relativement rapide des résultats :

- Initialisation 1 : profil de Y_F linéaire conduisant à un débit évaporé initial supérieur à la valeur convergée
- Initialisation 2 : profil de Y_F légèrement bombé conduisant à un débit évaporé initial inférieur à la valeur convergée
- Initialisation 3 : profil de Y_F proche du profil convergé afin d'obtenir une convergence rapide et donc précise du débit évaporé.

Par ailleurs, tous les calculs ont été effectués avec un maillage de $N_Y = 401$ points même si la longueur du domaine de calcul L varie selon les cas ($L = 10mm$ ou $L = 24mm$). En effet, la convection nettement moins importante dans le cas où $L = 24mm$ compense une finesse de maillage moindre. Différents tests avec des maillages plus raffinés nous ont montré en outre que les résultats étaient indépendants du maillage. Un maillage de 401 points est donc suffisant.

Enfin, le liquide à évaporer reste de l'heptane comme dans tous les chapitres précédents. La valeur du coefficient de diffusion D_F de l'heptane à 298K et 1atm utilisé dans NTMIX3D et le calcul analytique est issue de la littérature [9], qui donne $D_F = 7.3.10^{-6}m^2.s^{-1}$.

Il ne reste alors plus qu'à préciser comment est fixée la condition limite de type mur poreux que l'on utilise à la droite du domaine de calcul (cf figure 5.2). En ce qui concerne la composition du mélange, elle est tout simplement fixée de façon constante avec $Y_L^F = 0.005$ et $Y_L^{N_2} = 1 - Y_L^F = 0.995$ conformément à ce que nous avons précisé dans la première section de ce chapitre. C'est également le cas de la température qui vaut $T_L = 298K$. En ce qui concerne la vitesse u_L , on utilise le fait que la solution du problème numérique à résoudre doit converger vers une solution stationnaire. Ainsi, dans NTMIX3D, on écrit l'extrapolation d'ordre 0 :

$$u_L = \frac{\rho_{N_Y-1} u_{N_Y-1}}{\rho_L} \quad (5.8)$$

Dans NTMIX_CHEMKIN, cette expression s'est avérée instable, c'est pourquoi, on utilise l'expression analogue (en stationnaire) suivante qui elle est stable :

$$u_L = \frac{\dot{M}}{\rho_L} \quad (5.9)$$

5.3.2 Résultats et conclusions

Nous avons tracé l'évolution temporelle du débit évaporé \dot{M} correspondant à chaque série de calcul sur les figures 5.4, 5.5, 5.6 et 5.7.

On constate d'après les figures 5.4 et 5.5 que tous les débits évaporés issus des calculs NTMIX_CHEMKIN convergent vers une valeur égale à celle fournie par l'expérience de Beverley avec moins de 3% d'erreur, ce qui est inférieur aux incertitudes de mesure de l'expérience qui sont comprises entre 2 et 5% d'après l'article [9]. On peut donc affirmer que le modèle d'évaporation de film liquide codé dans NTMIX_CHEMKIN fournit des résultats fiables. En effet, la seule partie du modèle qui ne soit pas vraiment validée par cette expérience concerne le calcul de T_S puisque la température de surface ne varie pas de façon significative (enceinte thermostatée et faibles débits évaporés). Or, le calcul de T_S a plus ou moins été validé dans le chapitre 3 par le fait que les modèles de film liquide MDF et MI donnent des résultats de température de surface T_S très proches alors qu'ils constituent deux approches très différentes du calcul de celle-ci.

De la même façon, on constate d'après les figures 5.6 et 5.7 que tous les débits évaporés issus des calculs NTMIX3D convergent vers la solution analytique. Par contre, il existe une différence entre la valeur expérimentale et la solution analytique approchée du débit évaporé. En effet, la solution analytique surestime le débit évaporé de +16 à +18% par rapport à la valeur expérimentale, pour le coefficient de diffusion de l'heptane utilisé. On retrouve ici la surestimation du débit évaporé \dot{M} obtenue dans le chapitre précédent par NTMIX3D pour les faibles températures de paroi. Le modèle de film liquide codé dans NTMIX3D est néanmoins validé dans la mesure où l'on sait que les écarts observés sont dus aux approximations propres à NTMIX3D (propriétés thermodynamiques indépendantes de la composition du mélange et diffusion simple). On peut d'ailleurs noter, qu'un choix judicieux de D_F aurait permis à NTMIX3D de converger à la fois vers la solution analytique et expérimentale du débit évaporé \dot{M} puisque la composition du mélange ne varie quasiment pas à la surface du film liquide. Cet ajustement n'a pas été fait car les résultats sont prévisibles, et que cela n'aurait pas permis de mettre en évidence les lacunes de NTMIX3D concernant la diffusion lorsque le mélange varie de façon importante tout au long de la simulation.

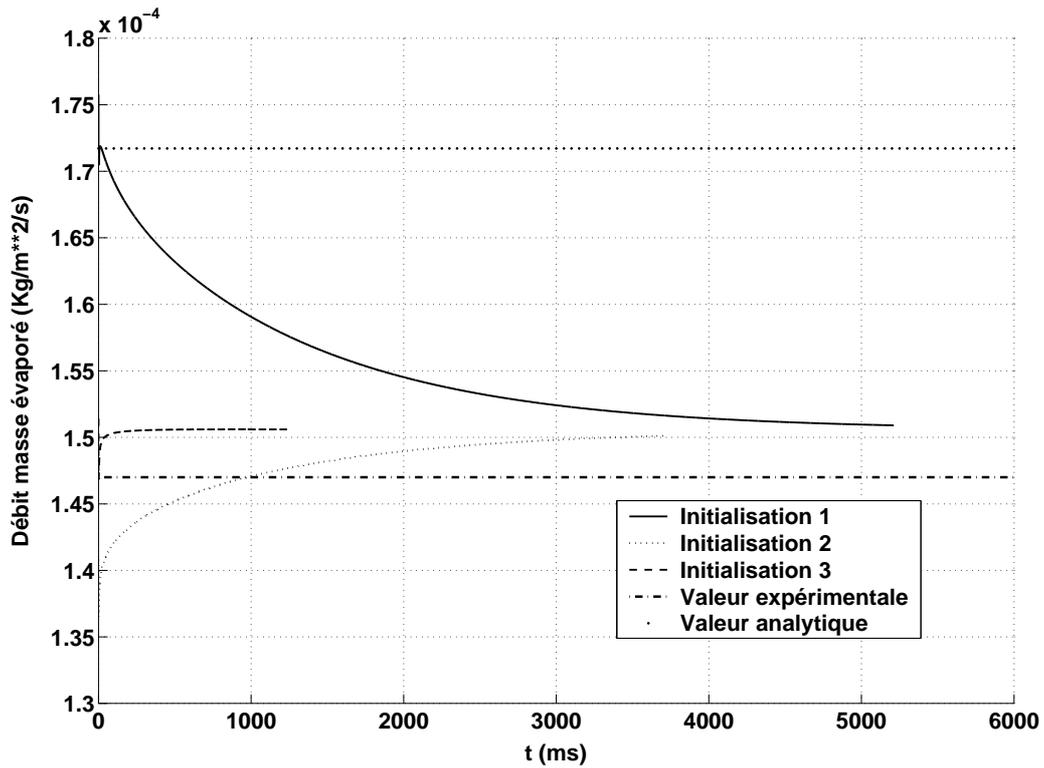


FIG. 5.4 – Comparaison de l'évolution temporelle du débit évaporé \dot{M} entre NTMIX_CHEMKIN (pour différentes initialisations), la valeur expérimentale de Beverley et le calcul analytique pour $L = 10\text{mm}$ et $Y_L^F = 0.005$.

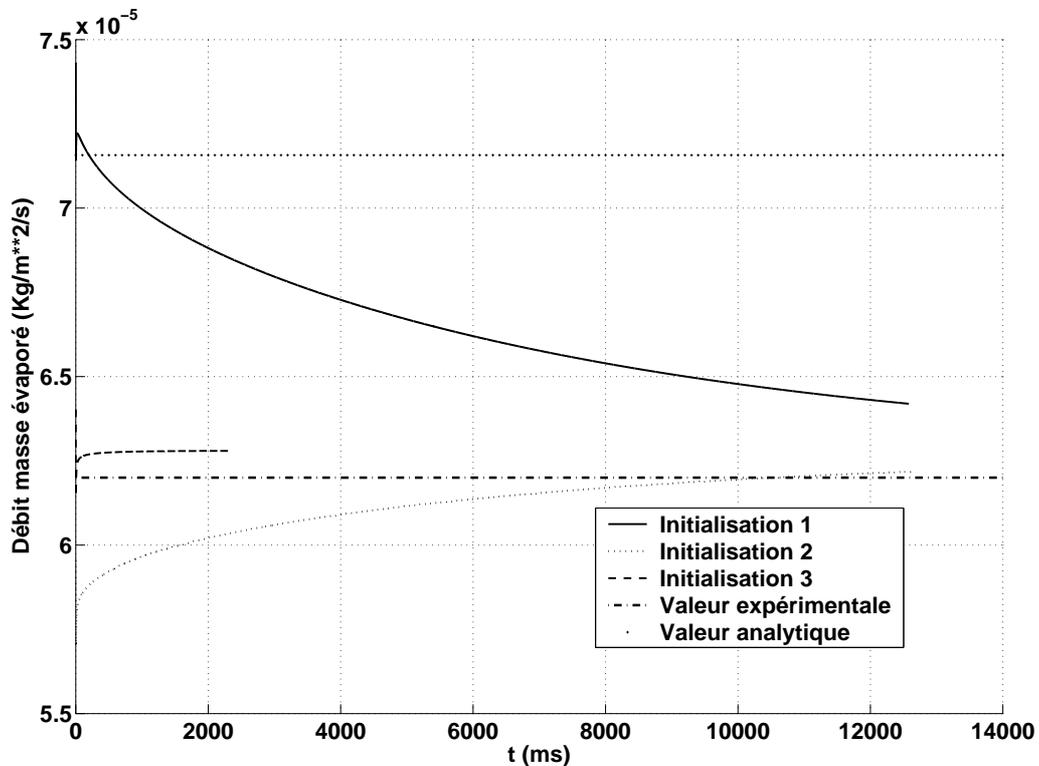


FIG. 5.5 – Comparaison de l'évolution temporelle du débit évaporé \dot{M} entre NTMIX_CHEMKIN (pour différentes initialisations), la valeur expérimentale de Beverley et le calcul analytique pour $L = 24\text{mm}$ et $Y_L^F = 0.005$.

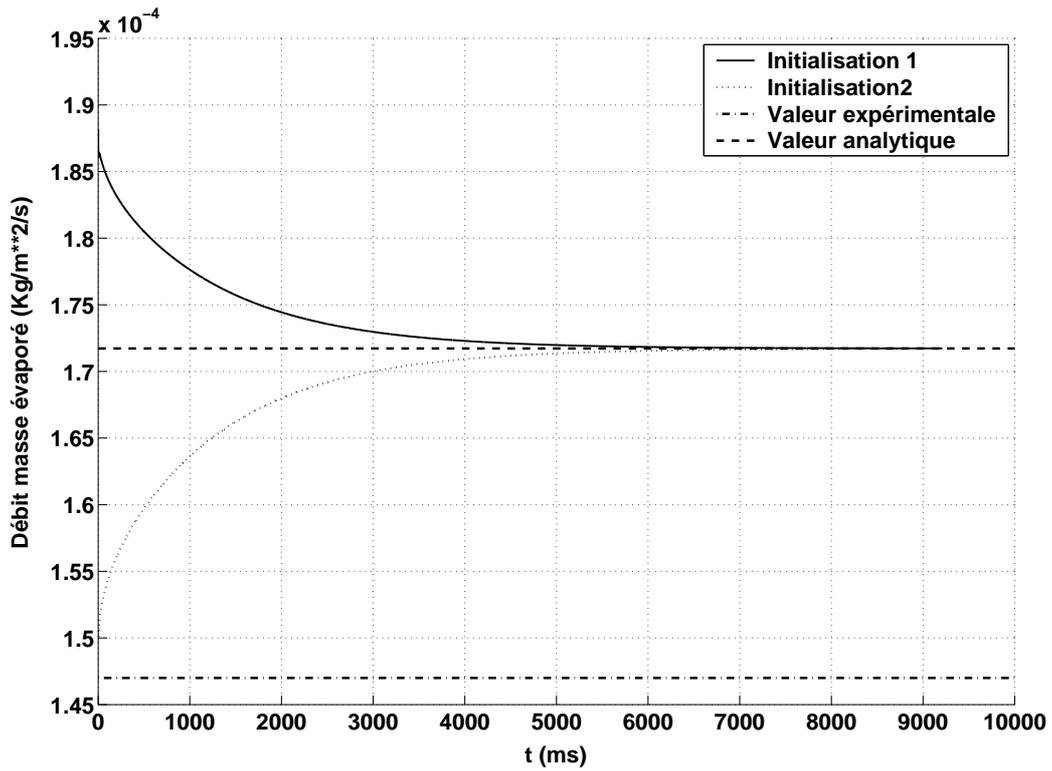


FIG. 5.6 – Comparaison de l'évolution temporelle du débit évaporé \dot{M} entre NTMIX3D (pour différentes initialisations), la valeur expérimentale de Beverley et le calcul analytique pour $L = 10mm$ et $Y_L^F = 0.005$.

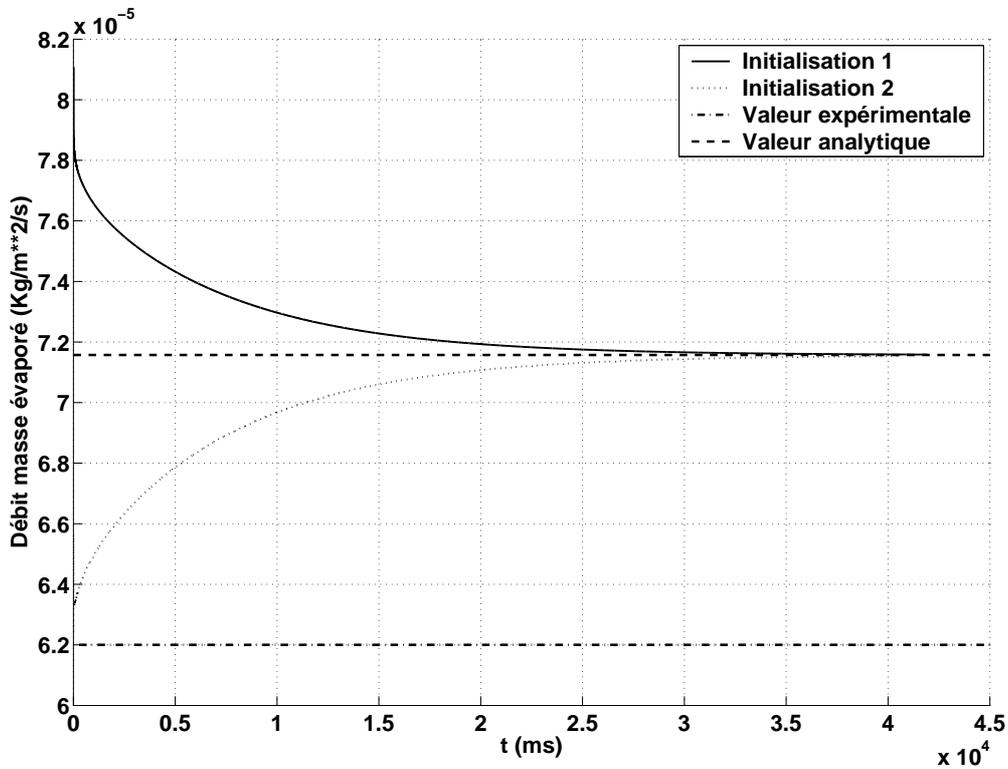


FIG. 5.7 – Comparaison de l'évolution temporelle du débit évaporé \dot{M} entre NTMIX3D (pour différentes initialisations), la valeur expérimentale de Beverley et le calcul analytique pour $L = 24mm$ et $Y_L^F = 0.005$.

Chapitre 6

DNS d'évaporation de film liquide dans un canal 3D turbulent

6.1 Introduction

Comme nous l'avons montré lors des chapitres précédents, l'interaction flamme/film liquide dans un code de calcul de type Reynolds-Average Navier-Stokes (RANS) nécessite un modèle adapté. L'interaction de l'évaporation d'un film liquide avec la couche limite turbulente est un phénomène physique que l'on rencontre dans une large gamme d'applications industrielles comme les procédés de refroidissement et de séchage ou les moteurs automobiles à injection directe. Cependant, le transfert simultané de masse et d'énergie entre un film liquide et un écoulement d'air turbulent n'a pas été beaucoup étudié dans la littérature. La construction de 'lois de paroi' ([11], [12]) prenant en compte le film évaporant doit être basée sur une connaissance approfondie des mécanismes en jeu : c'est l'objectif de ce chapitre.

Une des méthodes la plus utilisée au cours des vingt dernières années et la plus puissante pour établir et valider des lois de paroi est la Simulation Numérique Directe (DNS) [32], [34], [39]. Cette approche consiste à calculer l'écoulement complexe de façon quasi exacte pour comprendre les mécanismes fins et, en utilisant conjointement des arguments théoriques [52], à construire des formules génériques pour les profils des moyennes et des fluctuations de vitesse à proximité des parois. Dans une seconde étape, ces formules peuvent être validées et ajustées sur les calculs DNS. Cette méthodologie a déjà été appliquée à des écoulements turbulents en proche paroi plus ou moins complexes. Ainsi, les effets de l'injection de masse à travers une paroi sur la couche limite ont été étudiés grâce à des DNS et modélisés par Nicoud [43], [44]. De façon similaire, l'influence de cannelures en V à la surface des parois comme sur la peau des requins a été investiguée par Choi et al [18]. Plus récemment, l'écoulement turbulent autour d'une paroi multiperforée a été calculé dans une DNS et les modèles de lois de paroi correspondants ont été dérivés [38]. Les lois de parois courantes sont généralement soumises à des hypothèses restrictives. Dans le cas des lois de paroi thermiques par exemple, la différence de température entre l'écoulement et la paroi doit être faible afin que la masse volumique et la viscosité laminaire restent quasiment constantes à travers tout le canal [50]. Dans de nombreuses applications, cette hypothèse n'est pas vérifiée et la DNS a ainsi été utilisée afin d'étendre les lois de paroi classiques à des situations fortement anisothermes [22], [30], [41], [42]. Une

autre hypothèse communément utilisée est que l'écoulement gazeux est constitué d'une seule espèce. Cette hypothèse n'est pas valable dans la majorité des applications en combustion où des réactions chimiques ont lieu dans la phase gazeuse mais également parfois au niveau de la paroi elle-même. L'interaction de la combustion avec les parois dans un canal turbulent a également été modélisée par Bruneaux [11], [12] ou Alshaaan & Rutland [1] à partir de DNS. Le cas où cette interaction conduit à l'ablation de la paroi a été étudié par Artal et al [7].

L'objectif de l'étude présentée dans ce chapitre est d'utiliser cette méthodologie basée sur la DNS et la théorie pour étudier la structure de la couche limite turbulente d'un écoulement en canal sous l'influence de l'évaporation d'un film liquide. Dans cette interaction à double sens, l'évaporation du film liquide est influencée par les gradients d'espèces à proximité de l'interface liquide-gaz alors que le débit de masse évaporé souffle la couche limite modifiant ainsi sa structure [43], [47], [56]. La DNS de l'écoulement couplé avec un modèle d'évaporation de film liquide permet d'étudier la physique du couplage en termes de profils moyens et de fluctuations de vitesse, de température et d'espèces mais également de contrainte de cisaillement moyenne, de flux thermique et de masse évaporée. Ces résultats sont à la base de nouvelles lois de paroi tenant compte aussi bien des effets des forts gradients de densité et viscosité que de la vitesse de Stephan engendrée par l'évaporation.

Ce chapitre est organisé de la façon suivante : la section 6.2 présente les méthodes numériques et la configuration utilisés pour effectuer les DNS, suivie à la section 6.3 par une brève validation des outils numériques dans le cas classique du 'minimum channel' de Jiménez et Moin [32] (écoulement isotherme sans évaporation). La section 6.4 présente une DNS d'un écoulement anisotherme sans évaporation afin de montrer l'influence des gradients de densité et de viscosité sur la structure de la couche limite, puis la section 6.5 présente une série de cinq calculs DNS d'écoulements anisothermes en canal turbulent avec des films liquides en évaporation. A partir de ces résultats, la section 6.7 décrit la construction de nouvelles lois de paroi pour un écoulement sous l'influence de l'évaporation d'un film liquide. Finalement, la section 6.6 décrit les changements provoqués par l'évaporation du film sur la structure de l'écoulement.

6.2 Simulation Numérique Directe d'un canal turbulent

6.2.1 Outils numériques

Tous les calculs présentés dans ce chapitre ont été réalisés avec le code de calcul AVBP [53] and [8] du CERFACS. Il s'agit d'un code de calcul volumes finis qui résout les équations de Navier-Stokes compressibles sur des maillages structurés ou non pour les variables conservatives (masse volumique, moments et énergie totale). La thermochimie utilisée dans le code de calcul AVBP est une thermochimie intermédiaire entre celles utilisées dans les codes de calcul NTMIX3D et NTMIX_CHEMKIN. Ainsi, les équations qui gouvernent le transport des espèces sont les mêmes que celles de NTMIX_CHEMKIN. Elles sont donc basées sur les fractions molaires des espèces. Par contre, les coefficients de diffusion laminaire des espèces sont simplement calculés avec un nombre de Schmidt laminaire comme dans NTMIX3D. Le code AVBP est dédié aux simulations numériques directes (DNS) et aux simulations numériques aux grandes échelles (LES) et dispose de plusieurs schémas numériques. Toutes les DNS montrées dans ce chapitre ont été réalisées avec le schéma numérique TTGC [20] d'ordre 3 en espace et en temps.

6.2.2 Configuration

La configuration choisie pour effectuer nos DNS est similaire à celle du 'minimum channel' de Jiménez et Moin [32]. Un schéma du domaine de calcul et du système de coordonnées est représenté sur la figure 6.1. Il s'agit d'un canal périodique selon les directions x et z , de longueur πh , de largeur $0.3\pi h$ et de hauteur $2h$. Les conditions limites en haut et en bas de la boîte de calcul sont soit des parois isothermes avec des conditions d'adhérence, soit les surfaces libres d'un film liquide. L'écoulement gazeux est constitué d'un mélange inhomogène d'air et d'heptane (voir la figure 6.47 de la section 6.7 par exemple) avec une pression moyenne d'environ un bar alors que le film liquide est constitué d'heptane pur. Par ailleurs, dans toutes nos simulations la vitesse moyenne de l'écoulement principal (selon la direction x) sur l'axe central du canal \overline{U}_c est proche de $50m.s^{-1}$ (valeur variant légèrement selon les DNS réalisées).

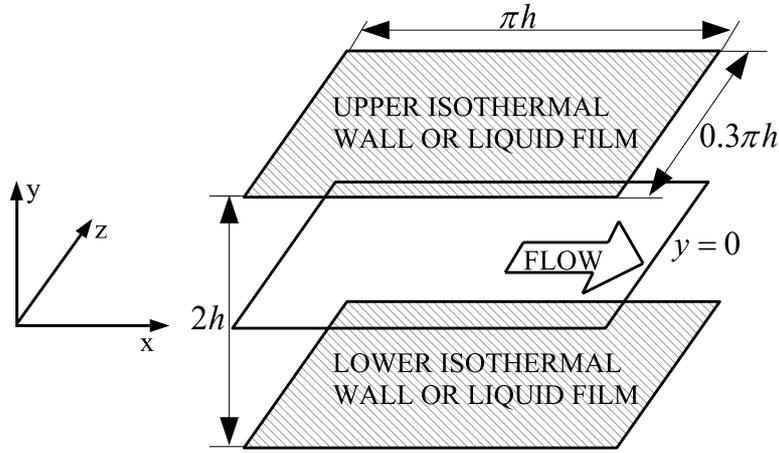


FIG. 6.1 – Domaine de calcul et système de coordonnées. Les conditions limites sont périodiques selon les directions x et z .

Le nombre de Reynolds du canal Re basé sur \overline{U}_c , la viscosité cinématique du gaz sur l'axe central ν_c et la demi hauteur du canal h et défini par :

$$Re = \frac{\overline{U}_c h}{\nu_c} \quad (6.1)$$

Il varie entre 2600 et 3300 suivant les cas alors que le nombre de Reynolds pariétal Re_τ basé sur h , la viscosité cinématique du gaz à la surface de la paroi (ou du film liquide selon les simulations) $\nu_{g,s}$ et la vitesse de frottement $u_\tau = \sqrt{\tau_{g,s}/\rho_{g,s}}$ est défini par :

$$Re_\tau = \frac{u_\tau h}{\nu_{g,s}} \quad (6.2)$$

Il est supérieur à 100 dans tous les calculs effectués. $\tau_{g,s} = \nu_{g,s} \rho_{g,s} \left. \frac{\partial \bar{u}}{\partial y} \right|_s$ et $\rho_{g,s}$ désignent respectivement la contrainte de cisaillement et la masse volumique du gaz à la surface de la paroi (ou du film liquide selon les cas). \bar{u} représente le profil de vitesse moyenne de l'écoulement selon la direction x .

Les unités pariétales classiques sont définies par :

$$x^+ = \frac{u_\tau x}{\nu_{g,s}} ; \quad y^+ = \frac{u_\tau y}{\nu_{g,s}} ; \quad z^+ = \frac{u_\tau z}{\nu_{g,s}} \quad (6.3)$$

La configuration 'minimum channel' que nous avons choisie pour effectuer nos DNS d'évaporation de film liquide présente l'avantage d'être beaucoup plus simple et beaucoup moins coûteuse en temps de calcul qu'une configuration complète de canal. Jiménez et Moin [32] ont prouvé que les statistiques de la turbulence pour les moments d'ordre peu élevés obtenues dans cette configuration sont en bon accord avec les mesures expérimentales dans la région de proche paroi à condition que le domaine de calcul soit suffisamment grand. En particulier, ils ont montré que pour un écoulement isotherme la boîte doit être plus large et plus longue que respectivement 100 et 350 unités pariétales. Les nombres de Reynolds pariétaux utilisés dans nos calculs correspondent à des dimensions du domaine exprimées en unités pariétales L_x^+ , L_y^+ et L_z^+ vérifiant :

$$L_x^+ \geq 314 \quad ; \quad L_y^+ \geq 200 \quad ; \quad L_z^+ \geq 94 \quad (6.4)$$

Les valeurs du nombre de Reynolds pariétal Re_τ conduisant aux valeurs exactes de L_x^+ , L_y^+ et L_z^+ seront précisées dans les sections suivantes pour chacune des DNS présentées dans cette étude. Bien qu'ils n'en soient pas très éloignés, on constate que tous nos domaines de calcul ne respectent pas rigoureusement ce critère. Nous verrons néanmoins qu'ils sont toujours suffisamment larges pour contenir un nombre de structures turbulentes garantissant des moments statistiques d'ordre peu élevé en bon accord avec les expériences. Cela n'est pas vraiment surprenant dans la mesure où l'évaporation et les gradients de densité et de viscosité affectent la structure de la couche limite turbulente et donc probablement la largeur de boîte nécessaire pour effectuer un calcul pleinement turbulent correct.

Dans toute la suite de ce chapitre, on notera que toutes les quantités avec exposant + sont exprimées en unités pariétales alors que celles affectées d'une barre – au dessus représentent une moyenne à la fois temporelle et spatiale dans le plan (x, z) .

Les maillages utilisés dans chacun des cas traités dans ce chapitre sont tous différents. Cependant, la grille de calcul est toujours régulière dans les directions x et z avec une résolution $\Delta x^+ \approx 35$ et $\Delta z^+ \approx 5$ afin de résoudre la structure allongée de la turbulence. Par ailleurs, un facteur d'étirement est utilisé dans la direction y afin de réduire la taille des mailles près de la paroi ou de la surface du film et ainsi résoudre la sous-couche visqueuse de la couche limite. Les maillages sont générés de manière à avoir Δy_w^+ compris entre 0.3 et 1 à la surface de la paroi ou du film liquide et $\Delta y_c^+ \approx 5$ au voisinage de l'axe central du canal.

6.2.3 Termes sources

Afin de comprendre l'écoulement turbulent et établir des statistiques, on cherche à établir une solution stationnaire. Ainsi, comme le calcul est périodique dans la direction de l'écoulement, des termes sources sont ajoutés aux équations de la quantité de mouvement, de l'énergie et de la masse volumique de l'heptane gazeux afin de compenser le frottement et le flux de chaleur à la surface de la paroi ou du film liquide ainsi que la masse d'heptane évaporée par le film liquide. Le tableau 6.1 fournit un résumé de ces différents termes sources. $E_{int,F}$ et E_c représentent respectivement l'énergie interne de l'heptane et l'énergie cinétique.

Le terme source constant S assimilable à une force est ajouté à l'équation de quantité de mouvement selon la direction de l'écoulement principal. Il est donné par :

$$S = K \frac{\rho_{g,s} U_{max}^2}{h} \quad (6.5)$$

	Terme source compensant le frottement à la surface de la paroi ou du film	Terme source compensant le flux de chaleur à la surface de la paroi ou du film	Terme source compensant l'évaporation à la surface du film liquide
Equation de la quantité de mouvement selon x	S		$S_M \cdot u$
Equation de la quantité de mouvement selon y			$S_M \cdot v$
Equation de la quantité de mouvement selon z			$S_M \cdot w$
Equation de l'énergie totale du gaz	$S \cdot u$	S_E	$S_M \cdot [E_{int,F} + E_c]$
Equation de la masse volumique de l'heptane			S_M

TAB. 6.1 – Termes sources ajoutés aux équations de transport du gaz.

où $U_{max} = 50m.s^{-1}$ et K est une constante ajustée dans le but d'obtenir $\overline{U}_c = U_{max}$. De manière consistante, un terme source $S \cdot u$ associé à S est ajouté à l'équation de l'énergie totale du gaz.

Le terme source de chaleur S_E ajouté à l'équation de l'énergie totale du gaz est défini par rapport à la température cible T_{target} :

$$S_E = \langle \rho C_v \rangle \frac{(T_{target} - \langle T \rangle)}{\tau_s} \quad (6.6)$$

où C_v est la capacité calorifique massique à volume constant du gaz. $\langle \rangle$ est une moyenne spatiale sur tout le domaine de calcul. $\tau_s \approx \frac{1}{2} \frac{h}{u_\tau}$ est un temps caractéristique de la diffusion turbulente.

Le terme source de masse S_M ajouté à l'équation de la masse volumique d'heptane gazeux est également défini par rapport à une valeur cible $Y_{F,target}$:

$$S_M = \langle \rho \rangle \frac{\left(Y_{F,target} - \frac{\langle \rho Y_F \rangle}{\langle \rho \rangle} \right)}{\tau_s} \quad (6.7)$$

De façon consistante, les termes sources de quantité de mouvement $S_M \cdot u_i$ et d'énergie $S_M \cdot [E_{int,FF} + E_c]$ sont ajoutés respectivement à chacune des équations de quantité de mouvement et à l'équation d'énergie totale du gaz. On notera que le terme S_M est toujours négatif puisqu'il doit compenser la masse introduite dans le domaine de calcul par l'évaporation du film liquide.

6.2.4 Modélisation du film liquide

La figure 6.2 montre une représentation schématique du domaine de calcul avec conditions limites de film liquide. Puisque l'objectif principal des calculs DNS est d'aider à établir des lois de paroi, il est nécessaire que les simulations atteignent un état stationnaire.

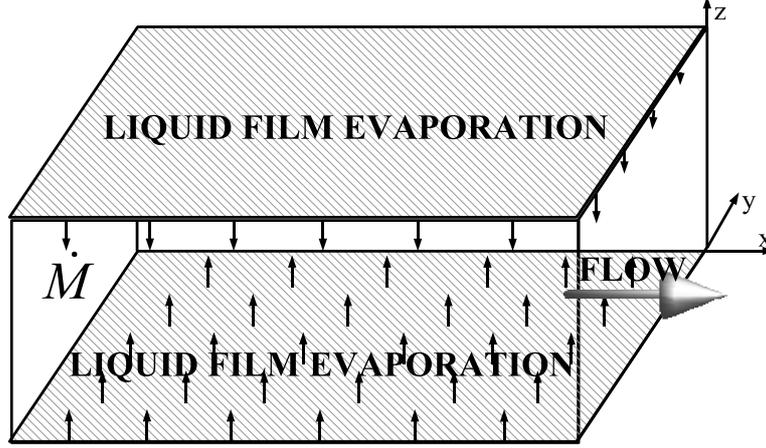


FIG. 6.2 – Domaine de calcul avec conditions limites de film liquide.

Pour cela, le film liquide est modélisé comme une condition limite d'interface isotherme et infiniment mince et non pas explicitement résolu. De plus, la composition chimique à la surface du film est imposée à la valeur de saturation d'un mélange d'air et d'heptane à un bar. Le tableau 6.2 fournit une synthèse de la condition limite de film liquide utilisée pour les DNS de ce chapitre. Cette représentation du film est nécessaire et suffisante pour établir des lois de paroi quasi-stationnaires. Il convient dès lors de préciser que la DNS n'est valable que pour l'écoulement gazeux.

$T_s = Cste$	$Y_F^s = Cste$	$Y_{O_2}^s = \frac{1-Y_F^s}{4.29}$	$Y_{N_2}^s = 1 - Y_F^s - Y_{O_2}^s$	$v_s = \frac{\dot{M}}{\rho_{g,s}}$	$u_s = w_s = 0$
--------------	----------------	------------------------------------	-------------------------------------	------------------------------------	-----------------

TAB. 6.2 – Condition limite de film liquide.

Le débit de masse de fuel évaporé a été calculé au chapitre 4 (Eq 6.8) et est reporté ici :

$$\dot{M} = \frac{\rho_{g,s} Y_F^s V_F^s}{1 - Y_F^s} = \frac{\rho_{g,s} Y_F^s}{1 - Y_F^s} \left[-\frac{D_F^s}{W_s Y_F^s} \cdot \left(\frac{\partial W Y_F}{\partial y} \right)_s + \sum_{k=1}^{N_{spec}} \frac{D_k^s}{W_s} \cdot \left(\frac{\partial W Y_k}{\partial y} \right)_s \right] \quad (6.8)$$

où V_F^s est la vitesse de diffusion de l'heptane à l'interface liquide-gaz selon la direction y . N_{spec} et W désignent respectivement le nombre d'espèces et la masse molaire du mélange gazeux. Le coefficient de diffusion D_k de l'espèce k dans le mélange est donné par l'approximation suivante :

$$D_k = \frac{\nu_g}{S_{c,k}} \quad (6.9)$$

où le nombre de Schmidt $S_{c,k}$ pour chacune des espèces k est supposé constant à la fois en espace et en temps. Sa valeur dépend du cas traité comme nous le verrons dans les sections suivantes.

6.3 Écoulement isotherme sans évaporation

Cette section décrit les résultats de DNS pour un écoulement isotherme sans évaporation qui correspond exactement au 'minimum channel' simulé par de nombreux auteurs. L'objectif est de vérifier la précision des outils numériques. Pour ce faire, les résultats de cette section sont systématiquement comparés aux résultats de Kim, Moin et Moser [34] (référencés par KMM par la suite) qui constituent une référence dans la mesure où ils sont très proches des données expérimentales.

6.3.1 Description paramétrique

Les conditions limites en haut et en bas du domaine de calcul sont des parois isothermes non glissantes à la température T_s de 300K. Les propriétés thermodynamiques et de transport du mélange gazeux sont données dans le tableau 6.3.

$\overline{T} = 300K$	$\overline{Y}_F = 0.2$	$\overline{Y}_{O_2} = 0.186$	$\overline{Y}_{N_2} = 0.614$
$S_{c,F} = 1.91$	$S_{c,N_2} = 0.566$	$S_{c,O_2} = 0.645$	$P_{rl} = 0.78$

TAB. 6.3 – Propriétés thermodynamiques et de transport du mélange gazeux.

P_{rl} désigne le nombre de Prandtl laminaire. La demi-hauteur du canal est $h = 7.7031e^{-4}m$, conduisant aux nombres de Reynolds $Re = 3300$ et $Re_\tau = 180$ comme dans la DNS de KMM [34]. La grille de calcul est constituée de $18 \times 120 \times 36$ noeuds de calcul avec un étirement dans la direction perpendiculaire aux parois. La résolution du maillage correspondante exprimée en unités pariétales est $\Delta x^+ \approx 33.4$, $\Delta y_w^+ \approx 1.0$, $\Delta y_c^+ \approx 4.9$ et $\Delta z^+ \approx 4.9$.

6.3.2 Résultats

Les statistiques présentées dans cette section ont été calculées sur une durée correspondant à $790h/\overline{U}_c$.

A - Spectre d'énergie cinétique turbulente et fonctions d'auto-corrélation spatiale de vitesse

Des exemples de spectre d'énergie cinétique turbulente obtenus en $y^+ = 35$ à partir des profils de vitesse selon les axes x et z sont présentés sur la figure 6.3. Ils affichent un comportement raisonnable aux hautes fréquences, ce qui prouve que les petites échelles de la turbulence sont correctement représentées. La figure 6.4 montre des fonctions d'auto-corrélation spatiale de vitesse à deux points dans la région de proche paroi. On constate que ces fonctions d'auto-corrélation n'atteignent pas zéro pour les séparations les plus grandes. Cependant, les niveaux atteints sont plus proches de zéro que dans les DNS de Jiménez et Moin [32]. De plus, le minimum de la fonction d'autocorrélation selon la direction z est négatif, ce qui démontre que le domaine de calcul est suffisamment large pour contenir au moins deux "streaks" [17] et fournir ainsi des statistiques de la turbulence en proche paroi acceptables.

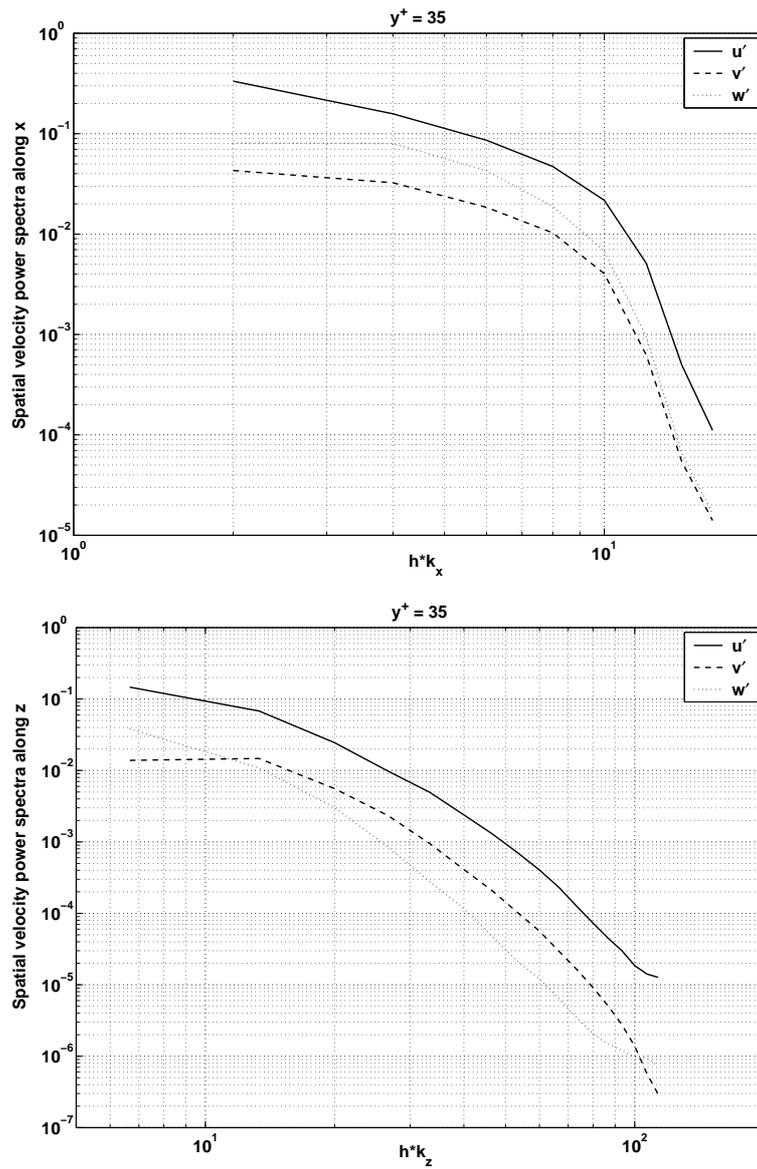


FIG. 6.3 – Spectre d'énergie cinétique turbulente, selon les axes x et z, en $y^+ = 35$.

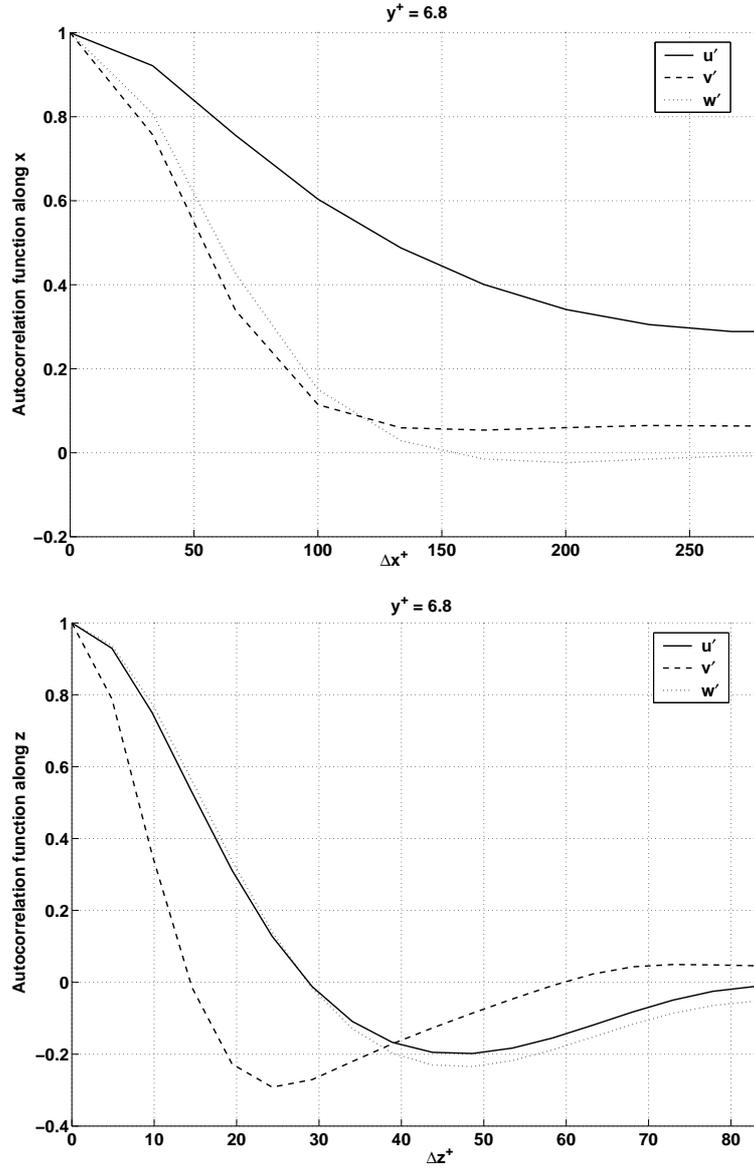


FIG. 6.4 – Fonction d’auto-corrélation spatiale à deux points sur les champs de vitesse, selon les axes x et z , dans la région de proche paroi en $y^+ = 6.8$. Dans les deux cas, seule une moitié du domaine de calcul est représentée.

B - Champs moyens

Le profil de vitesse axiale moyenne adimensionnelle \bar{u}^+ exprimée en unités pariétales est défini par l’équation 6.10 suivante :

$$\bar{u}^+ = \frac{\bar{u} - u_s}{u_\tau} \quad (6.10)$$

Il est présenté sur la figure 6.5. On constate qu’il est correctement modélisé par une loi de paroi classique et exhibe un très bon accord avec la DNS de KMM [34]. Par ailleurs, pour l’écoulement de canal turbulent pleinement développé considéré dans cette section, la

contrainte de cisaillement totale τ exprimée en unités pariétales devrait être une fonction linéaire de y^+ :

$$\tau^+ = \tau_{turb}^+ + \tau_{lam}^+ = -\frac{\overline{u'v'}}{u_\tau^2} + \frac{\nu_{g,s}}{u_\tau^2} \frac{\partial \bar{u}}{\partial y} = -\overline{u'v'}^+ + \frac{\partial \bar{u}^+}{\partial y^+} = -\frac{y^+}{h^+} \quad (6.11)$$

La figure 6.6 montre que la relation ci-dessus est très bien satisfaite, ce qui signifie que l'écoulement a atteint un état statistiquement stationnaire. De plus, la contrainte de cisaillement turbulente τ_{turb}^+ est en excellent accord avec la DNS de KMM [34].

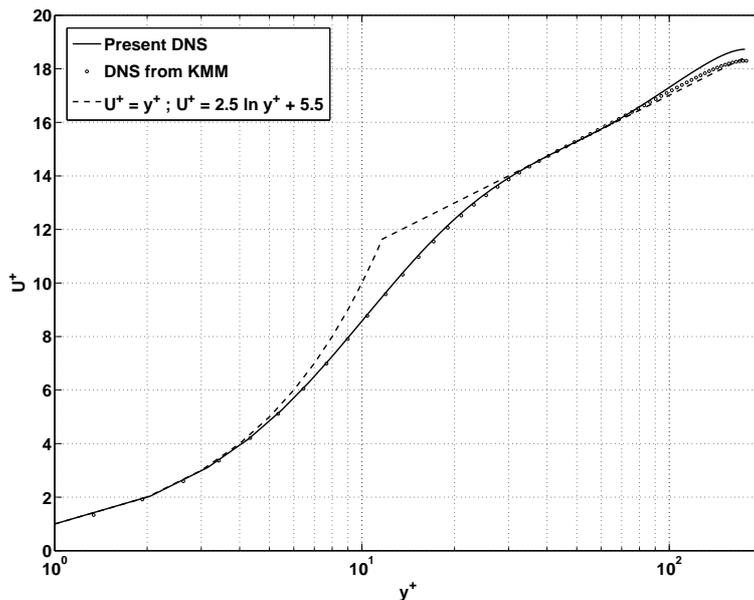


FIG. 6.5 – Profil de vitesse axiale moyenne adimensionnelle \bar{u}^+ .

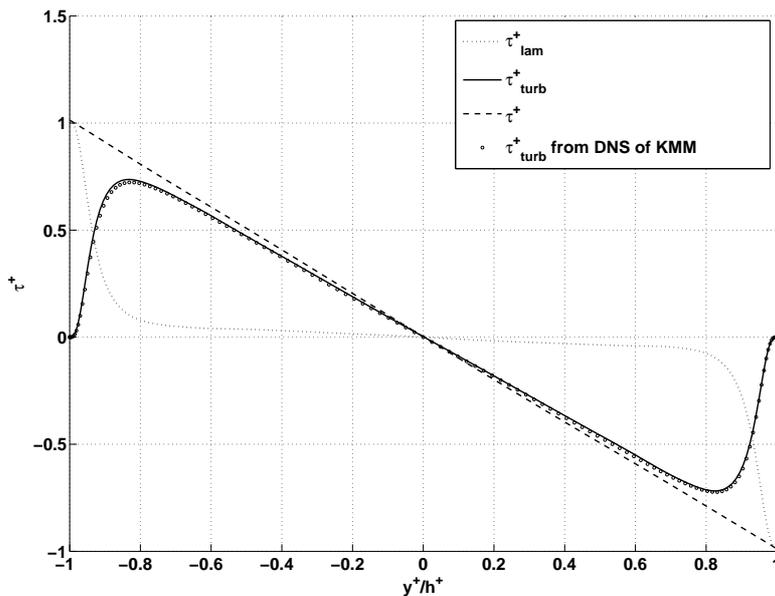


FIG. 6.6 – Contrainte de cisaillement normalisée par la vitesse de frottement τ^+ .

C - Fluctuations

Les profils des fluctuations r.m.s (root-mean-square) de vitesse exprimées en unités pariétales $u_{rms}^+ = \sqrt{u'^2}/u_\tau$, $v_{rms}^+ = \sqrt{v'^2}/u_\tau$ et $w_{rms}^+ = \sqrt{w'^2}/u_\tau$ ont été tracés sur la figure 6.7. On constate que les fluctuations de vitesse axiale u_{rms}^+ et normale v_{rms}^+ présentent un bon accord quantitatif avec la DNS de KMM, en particulier près de la paroi. Par contre, l'accord est seulement qualitatif en ce qui concerne la fluctuation de vitesse w_{rms}^+ selon z . Les différences observées proviennent essentiellement des dimensions du domaine plus petites, particulièrement dans sa largeur, et de la faible résolution du maillage au niveau de l'axe central du canal. La figure 6.8 nous montre le profil des fluctuations r.m.s de pression normalisées par la contrainte de cisaillement pariétale $p_{rms}^+ = p_{rms}/\rho u_\tau^2$. On remarque une légère dissymétrie sur le profil qui provient certainement de la durée un peu faible de l'échantillon temporel utilisé pour effectuer les statistiques et un écart maximum d'environ 7% par rapport aux données de KMM. Les fluctuations r.m.s de vorticit  normalis es $w_{i,rms}^+ = w_i\nu/u_\tau^2$ sont pr sent es sur la figure 6.9. La comparaison avec les DNS de KMM montre une sous-estimation  vidente des fluctuations de vorticit  avec une erreur maximale d'environ 30% entre $y^+ = 15$ et $y^+ = 30$, mais un comportement qualitatif identique. Cela met en relief les limites de la configuration de 'minimum channel' et de la faible r solution du maillage utilis  dans notre cas pour obtenir des moments statistiques d'ordres  lev s.

Puisque le domaine de calcul est p riodique selon les directions x et z , l' quation de transport de l' nergie cin tique turbulente moyenne \bar{k} s' crit :

$$\frac{\partial \bar{k}}{\partial t} + \bar{v} \frac{d\bar{k}}{dy} = -\overline{u'_i v'} \frac{d\bar{u}_i}{dy} - \frac{1}{\rho} \frac{d\rho \bar{v}' k}{dy} + \frac{1}{\rho} \frac{d}{dy} \left[\frac{\rho \nu d\bar{k}}{dy} \right] - \frac{1}{\rho} \frac{d\bar{p}' v'}{dy} + \nu \frac{\partial u'_i}{\partial x_j} \frac{\partial u'_i}{\partial x_j} \quad (6.12)$$

Sur la figure 6.10, nous avons trac  tous les termes de l' quation de \bar{k} d crits par ailleurs dans le tableau 6.4. On constate un bonne concordance quantitative avec les r sultats de KMM pour tous les termes except  pour la dissipation ϵ . En effet, l' quilibre   la paroi $\epsilon \approx D_k$ est bien repr sent . Par contre, la dissipation est sous-estim e dans tout le canal avec une erreur d'environ 20% pr s de la paroi et 40% en $y^+ = 12$ qui correspond   l'endroit o  la production atteint son maximum. La dissipation d' nergie cin tique turbulente  tant fortement reli e aux modes hautes fr quences, la sous-estimation de la dissipation turbulente ϵ provient certainement du sch ma num rique centr  utilis  dans nos calculs, et dans une moindre mesure de la faible r solution du maillage.

$P_k = -\overline{u'_i v'} \frac{d\bar{u}_i}{dy}$	Terme de production
$\epsilon = \nu \frac{\partial u'_i}{\partial x_j} \frac{\partial u'_i}{\partial x_j}$	Terme de dissipation
$T_k = -\frac{1}{\rho} \frac{d\rho \bar{v}' k}{dy}$	Terme de transport turbulent
$D_k = \frac{1}{\rho} \frac{d}{dy} \left[\frac{\rho \nu d\bar{k}}{dy} \right]$	Terme de diffusion visqueuse
$\Pi_k = -\frac{1}{\rho} \frac{d\bar{p}' v'}{dy}$	Terme de corr�lation pression-vitesse

TAB. 6.4 – Termes dans le budget de l' nergie cin tique turbulente moyenne.

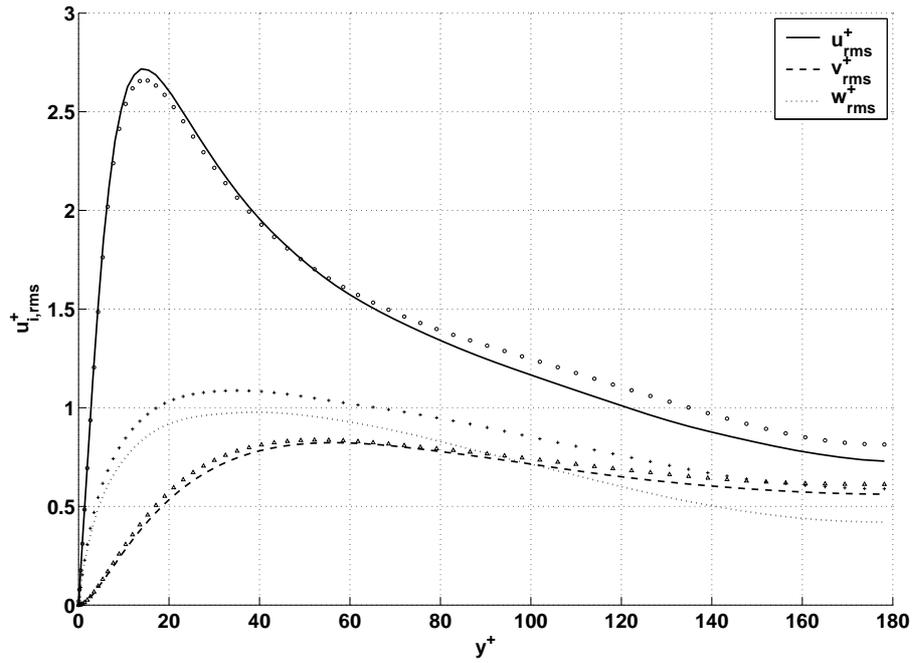


FIG. 6.7 – Fluctuations r.m.s (root-mean-square) de vitesse normalisées par la vitesse de cisaillement à la paroi. Les symboles représentent les données numériques issues des DNS de KMM.

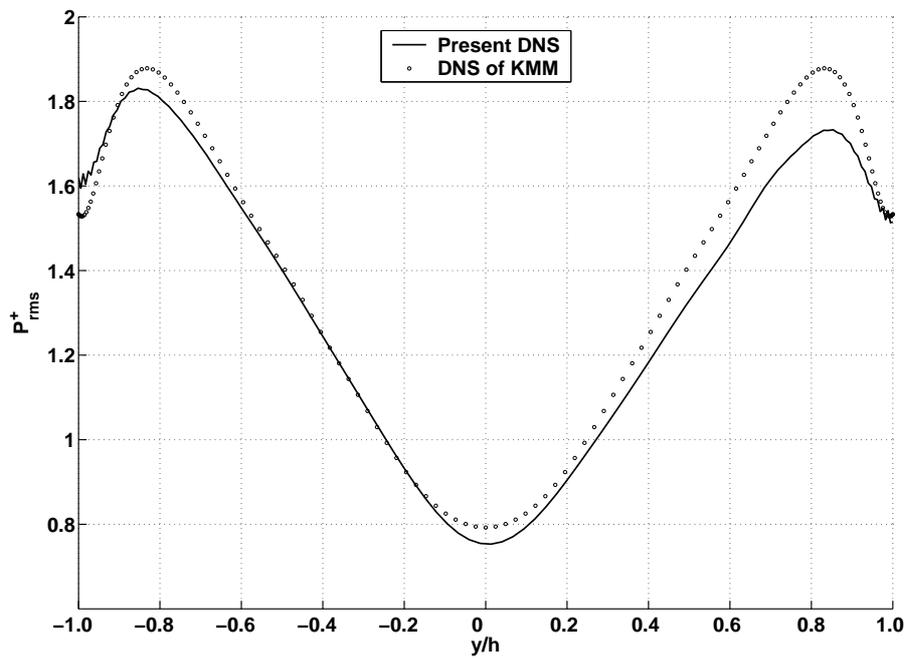


FIG. 6.8 – Fluctuations r.m.s de pression normalisées par ρu_τ^2 . Les symboles représentent les données numériques issues des DNS de KMM.

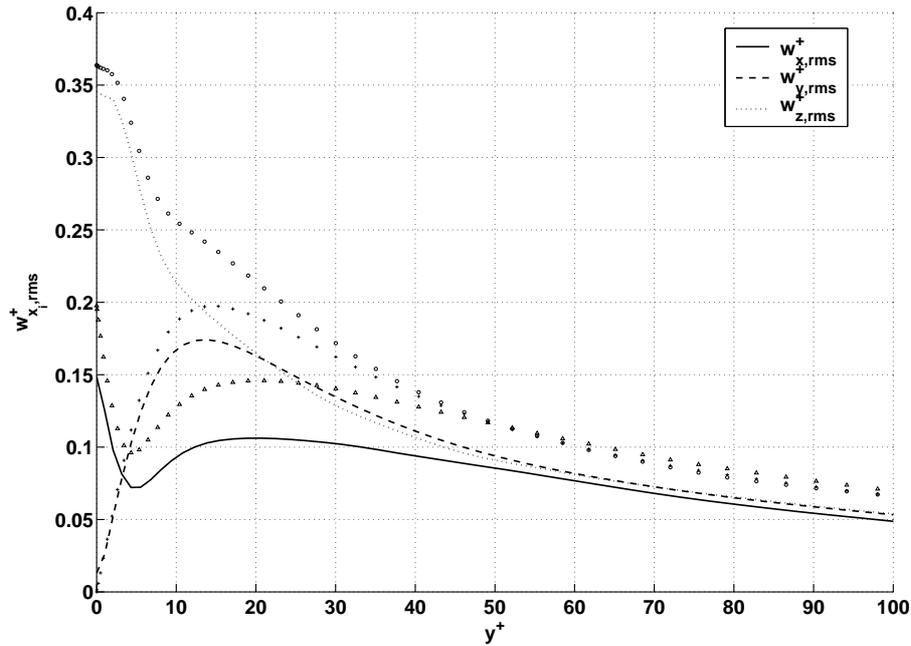


FIG. 6.9 – Fluctuations r.m.s de vorticité normalisées par $\frac{u_{\tau}^2}{\nu}$. Les symboles représentent les données numériques issues des DNS de KMM.

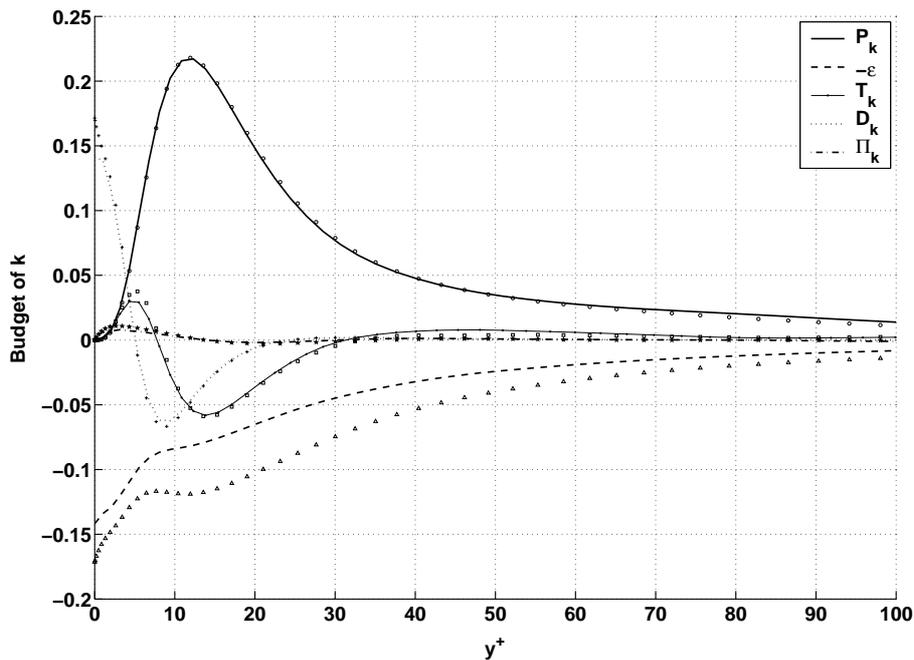


FIG. 6.10 – Termes de l'équation de l'énergie cinétique turbulente moyenne exprimée en unités pariétales. P_k = Production, ϵ = Dissipation, T_k = Transport turbulent, D_k = Diffusion, Π_k = Corrélation vitesse-pression. Les symboles représentent les données numériques issues des DNS de KMM.

6.3.3 Conclusion

La comparaison avec des solutions de référence montre que les outils et méthodes numériques utilisés pour réaliser nos DNS sont parfaitement adaptés et offrent une précision

suffisante à condition de ne pas chercher à extraire des informations statistiques d'ordre élevé.

6.4 Écoulement anisotherme sans évaporation

Cette section décrit les résultats de DNS d'un écoulement chaud entre deux parois sèches et froides. L'objectif de cette simulation est d'étudier l'influence des gradients de viscosité et de densité sur la structure de la couche limite.

6.4.1 Description paramétrique

Les conditions limites en haut et en bas du domaine de calcul sont des murs isothermes à la température $T_s = 360K$ avec des conditions d'adhérence. Les propriétés thermodynamiques et de transport du mélange gazeux sont données dans le tableau 6.5.

$\overline{T}_c = 600K$	$\overline{Y}_F = 0.2$	$\overline{Y}_{O_2} = 0.186$	$\overline{Y}_{N_2} = 0.614$
$S_{c,F} = 1.91$	$S_{c,N_2} = 0.566$	$S_{c,O_2} = 0.645$	$P_{rl} = 0.78$

TAB. 6.5 – Propriétés thermodynamiques et de transport du mélange gazeux.

\overline{T}_c désigne la température moyenne sur l'axe central du canal. La demi hauteur du canal est $h = 2.3731e^{-3}m$, conduisant aux nombres de Reynolds $Re \approx 3000$ et $Re_\tau \approx 300$. La grille de calcul est constituée de $19 \times 150 \times 38$ noeuds de calcul avec un étirement dans la direction perpendiculaire aux parois. La résolution du maillage correspondante exprimée en unités pariétales est $\Delta x^+ \approx 52.6$, $\Delta y_w^+ \approx 0.8$, $\Delta y_c^+ \approx 7.7$ et $\Delta z^+ \approx 7.7$.

6.4.2 Résultats

Les statistiques présentées dans cette section ont été calculées sur une durée correspondant à $560h/\overline{U}_c$.

A - Spectre d'énergie cinétique turbulente et fonctions d'auto-corrélation spatiale de vitesse

Des exemples de spectre d'énergie cinétique turbulente et de fonctions d'auto-corrélation spatiale à deux points sur les champs de vitesse dans la région de proche paroi sont présentés respectivement sur les figures 6.11 et 6.12. Les comportements et les valeurs observés sont similaires au cas isotherme présenté dans la section précédente, démontrant que le domaine de simulation est assez large et la résolution du maillage suffisamment fine pour obtenir des statistiques de la turbulence en proche paroi satisfaisantes.

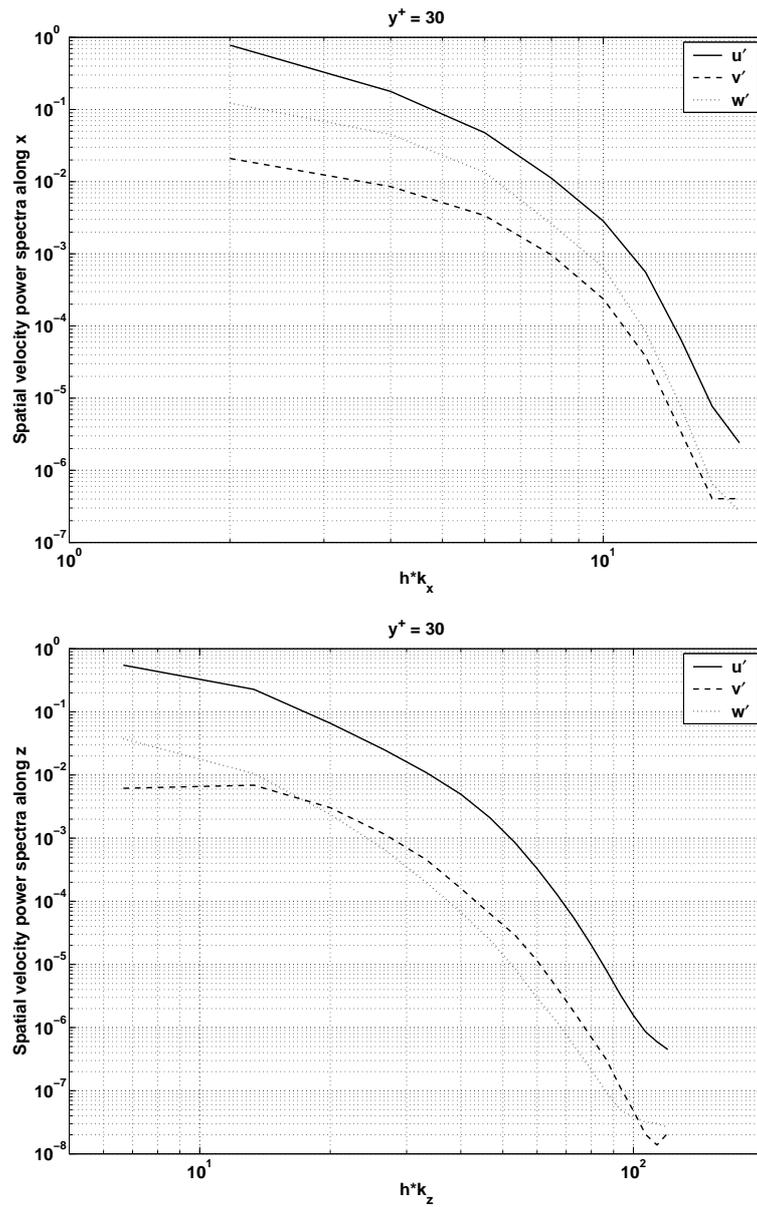


FIG. 6.11 – Spectre spatial d'énergie cinétique turbulente, selon les axes x et z, en $y^+ = 30$, pour un écoulement anisotherme.

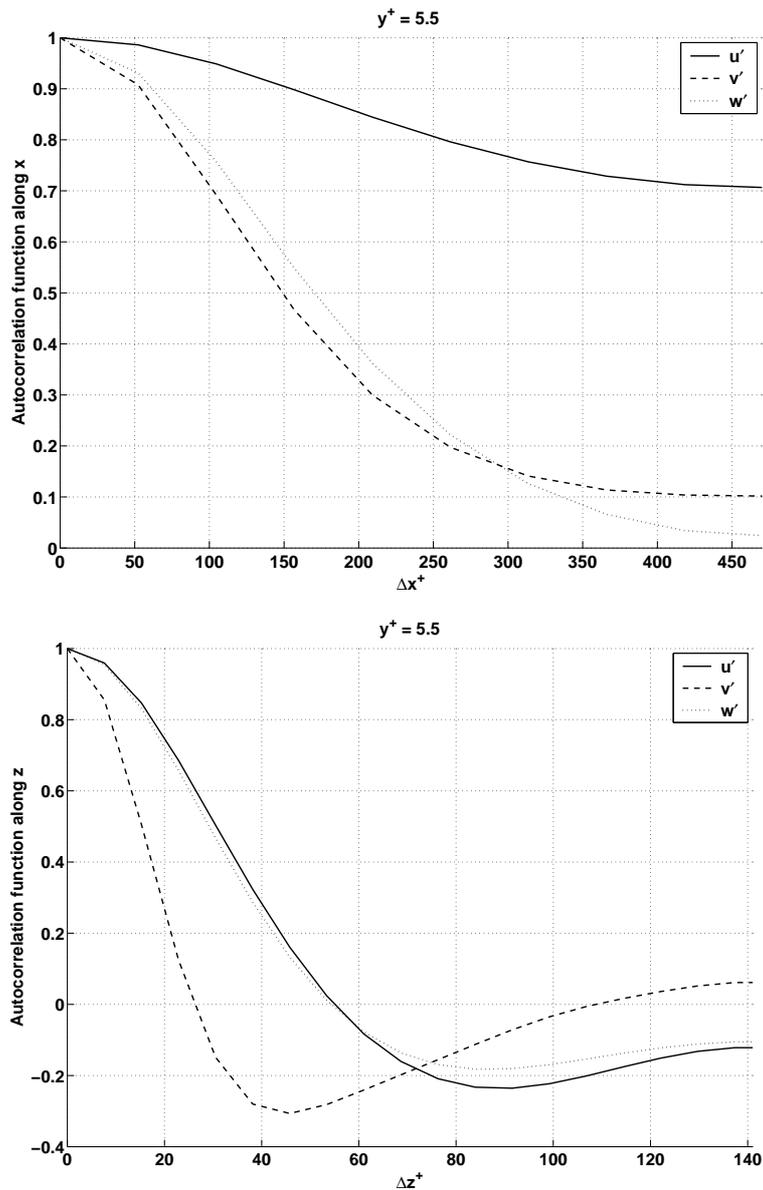


FIG. 6.12 – Fonction d’auto-corrélation spatiale à deux points sur les champs de vitesse, selon les axes x et z , dans la région de proche paroi en $y^+ = 5.5$, pour un écoulement anisotherme. Dans les deux cas, seule une moitié du domaine de calcul est représentée.

B - Champs moyens

Pour des écoulements turbulents isothermes en canal, la loi de paroi "log" classique est connue pour être une représentation raisonnable de l’écoulement en proche paroi comme cela a été montré dans la section précédente et dans de nombreuses publications. Cependant, lorsqu’il existe une grande différence (un facteur 1.7 pour la DNS présentée dans cette section) entre la température des parois et celle sur l’axe central du canal, les forts gradients de masse volumique et de viscosité qui en résultent rendent invalides les hypothèses de la loi "log". Ainsi, des améliorations ou des extensions de la loi de paroi

classique sont nécessaires [50], comme le modèle LnKc proposé par Angelberger [6] et utilisé ici pour comparaison avec les résultats de DNS. Le modèle LnKc consiste à définir un nouvel adimensionnement des "variables pariétales" qui tient compte des gradients de densité et de viscosité induits par les gradients de température :

$$d\eta^+ = \frac{\nu_{g,s}}{\nu} dy^+, \quad d\phi^+ = \frac{\rho}{\rho_{g,s}} du^+, \quad d\theta^+ = \frac{\rho}{\rho_{g,s}} dT^+ \quad (6.13)$$

La température T^+ exprimée en unités pariétales classiques est définie par :

$$T^+ = -\frac{(T - T_s) \rho_{g,s} C_p u_\tau}{\varphi_{g,s}} \quad (6.14)$$

où C_p et $\varphi_{g,s}$ désignent respectivement la capacité calorifique massique à pression constante et le flux de chaleur entre l'écoulement gazeux et la paroi ou le film liquide.

Il convient de préciser que dans toute cette étude on définit la transition laminaire-turbulent comme étant la position de raccord entre l'évolution linéaire de la sous-couche visqueuse et l'évolution logarithmique de la sous-couche inertielle.

Les figures 6.13 et 6.14 nous montrent respectivement les profils de vitesse axiale et de température moyenne exprimées à la fois en unités pariétales classiques et en variables LnKc. Tout d'abord, on constate que la sous couche visqueuse est plus large que dans le cas isotherme. En effet, la distance y_{lt}^+ , exprimée en unités pariétales, entre la paroi et la transition laminaire-turbulent pour la couche limite dynamique est de 11.6 dans le cas isotherme (Figure 6.5 de la section 6.3) contre 16.4 dans le cas anisotherme (Figure 6.13). De plus, la vitesse de cisaillement u_τ et la viscosité cinématique laminaire du gaz à la paroi $\nu_{g,s}$ valent respectivement 2.75 et 1, 17.10⁻⁵m².s⁻¹ pour le cas isotherme et respectivement 2, 06m.s⁻¹ et 1, 63.10⁻⁵m².s⁻¹ pour le cas anisotherme. Ainsi, la distance entre la paroi et la transition laminaire-turbulent y_{lt} est deux fois et demi plus grande pour le cas anisotherme que pour le cas isotherme. Ensuite, un comportement logarithmique est obtenu dans la sous couche inertielle turbulente pour les profils exprimés en variables LnKc alors que c'est moins évident avec les variables pariétales classiques. Par contre, la constante additive C qui apparaît dans la loi de paroi $\bar{\phi}^+ = 2.44 \ln(\eta^+) + C$ et de ce fait, la distance de transition laminaire-turbulent sont différentes de celles utilisées par Angelberger [6]. Cela semble en accord avec les travaux de Nicoud [41], [42] et Huang & Coleman [30] qui suggèrent que la constante C dépend du flux de chaleur réduit B_q défini par :

$$B_q = \frac{\varphi_{g,s}}{\rho_{g,s} C_p u_\tau T_s} \quad (6.15)$$

Le flux de chaleur réduit B_q vaut ici 0.0354, ce qui conduit aux lois de paroi suivantes (afin d'être en accord avec la DNS) :

$$Dynamique : \begin{cases} \eta^+ \leq 13.4 : \phi^+ = \eta^+ \\ \eta^+ \geq 13.4 : \phi^+ = 2.44 \ln(\eta^+) + 7.07 \end{cases} \quad (6.16)$$

$$Thermique : \begin{cases} \eta^+ \leq 13.0 : \theta^+ = Pr_l \eta^+ \\ \eta^+ \geq 13.0 : \theta^+ = 2.075 \ln(\eta^+) + 4.82 \end{cases} \quad (6.17)$$

Comme dans la section précédente, pour l'écoulement de canal turbulent anisotherme pleinement développé considéré dans cette section, la contrainte de cisaillement totale τ

exprimée en unités pariétales devrait être une fonction linéaire de y^+ à condition cette fois ci que la masse volumique du mélange soit prise en compte :

$$\tau^+ = \tau_{turb}^+ + \tau_{lam}^+ = -\frac{\overline{\rho u'v'}}{\rho_{g,s} u_\tau^2} + \frac{\rho\nu}{\rho_{g,s} u_\tau^2} \frac{\partial \bar{u}}{\partial y} = -\rho^+ \overline{u'v'}^+ + \rho^+ \nu^+ \frac{\partial \bar{u}^+}{\partial y^+} = -\frac{y^+}{h^+} \quad (6.18)$$

La figure 6.15 montre que la relation 6.18 est bien satisfaite, excepté au voisinage des parois où la contrainte de cisaillement totale τ s'écarte légèrement de chaque côté du profil théorique linéaire, ce qui signifie que l'écoulement a presque atteint un état statistiquement stationnaire. De plus, on constate que les cas isothermes et anisothermes conduisent à des résultats quasiment identiques en ce qui concerne les contraintes de cisaillement laminaires τ_{lam}^+ et turbulentes τ_{turb}^+ , ce qui prouve que l'anisothermicité est essentiellement un effet lié à la densité et à la viscosité.

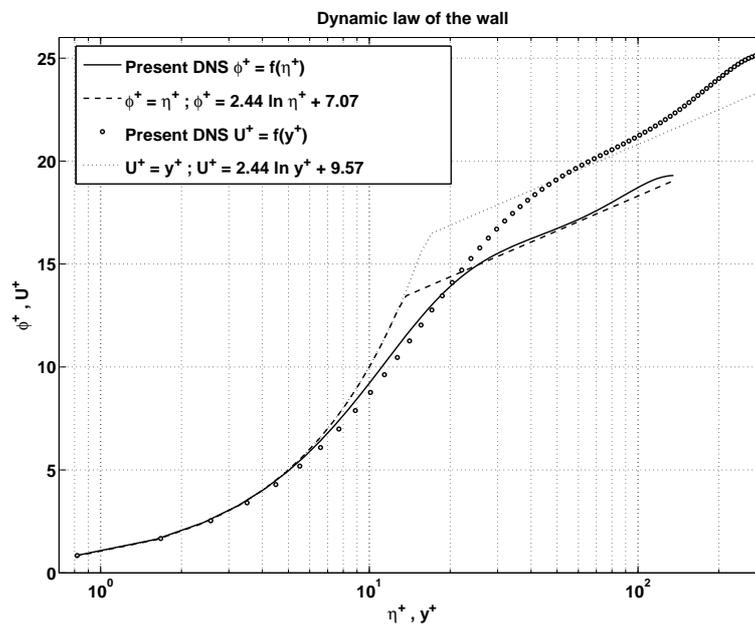


FIG. 6.13 – Vitesse axiale moyenne exprimée en unités pariétales (\bar{u}^+, y^+) et avec les variables LnKc ($\bar{\phi}^+, \eta^+$).

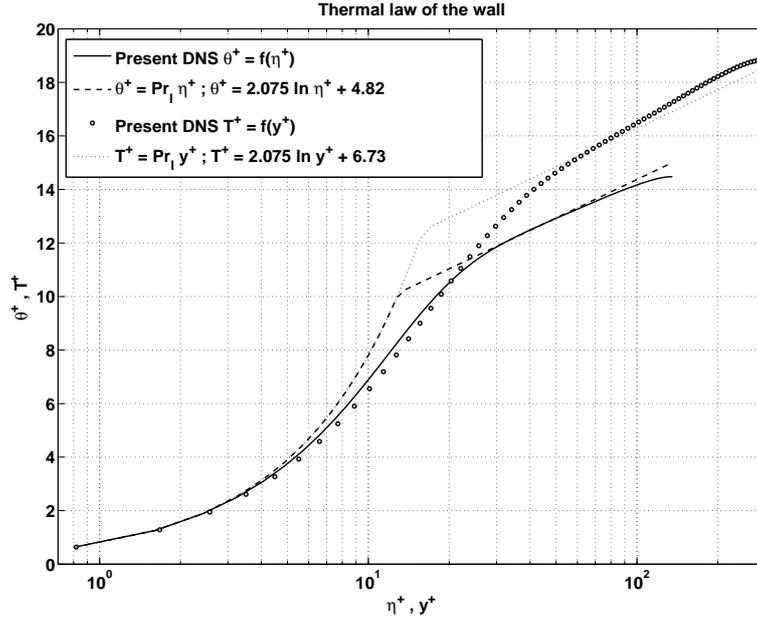


FIG. 6.14 – Temperature moyenne exprimée en unités pariétales (\bar{T}^+, y^+) et avec les variables $\text{LnKc} (\bar{\theta}^+, \eta^+)$.

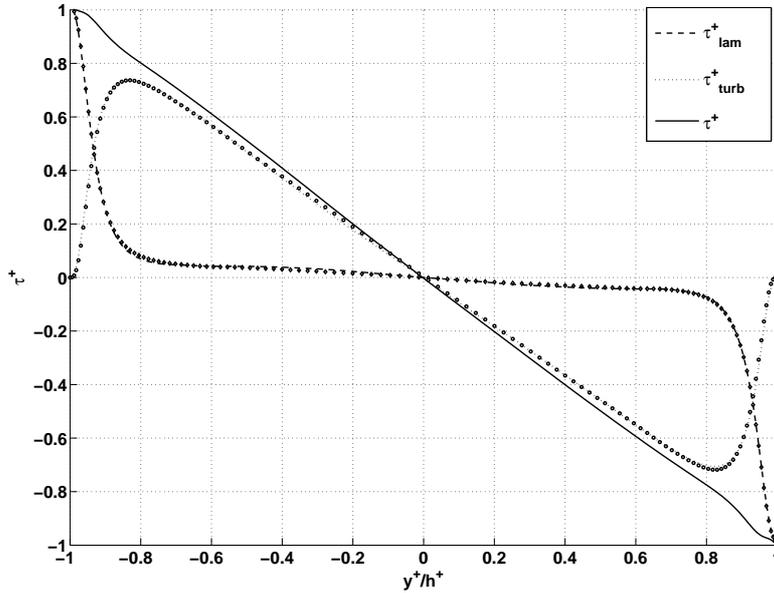
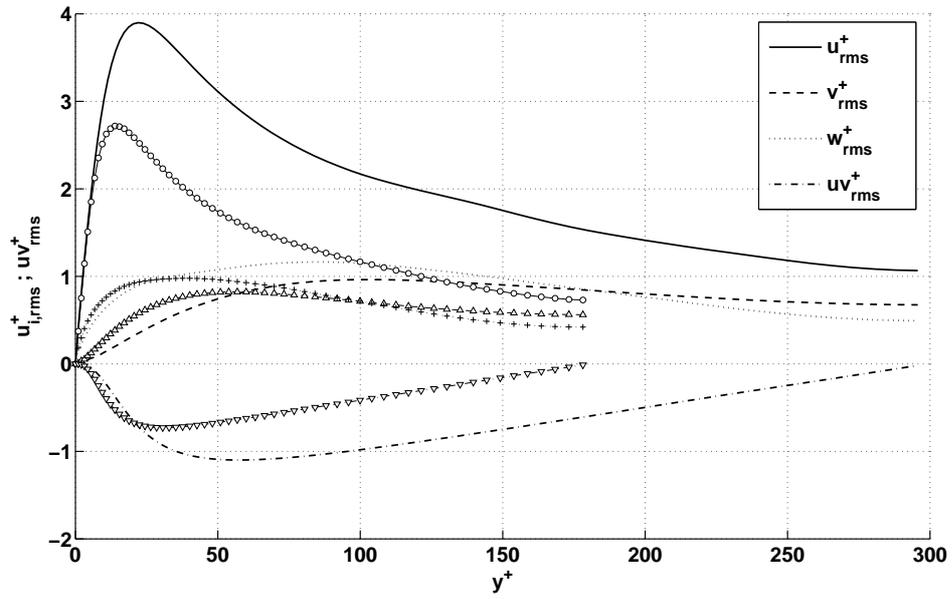


FIG. 6.15 – Profils de contrainte de cisaillement τ^+ normalisée par la vitesse de frottement pariétale. Les traits et les marqueurs représentent respectivement les DNS anisothermes et isothermes.

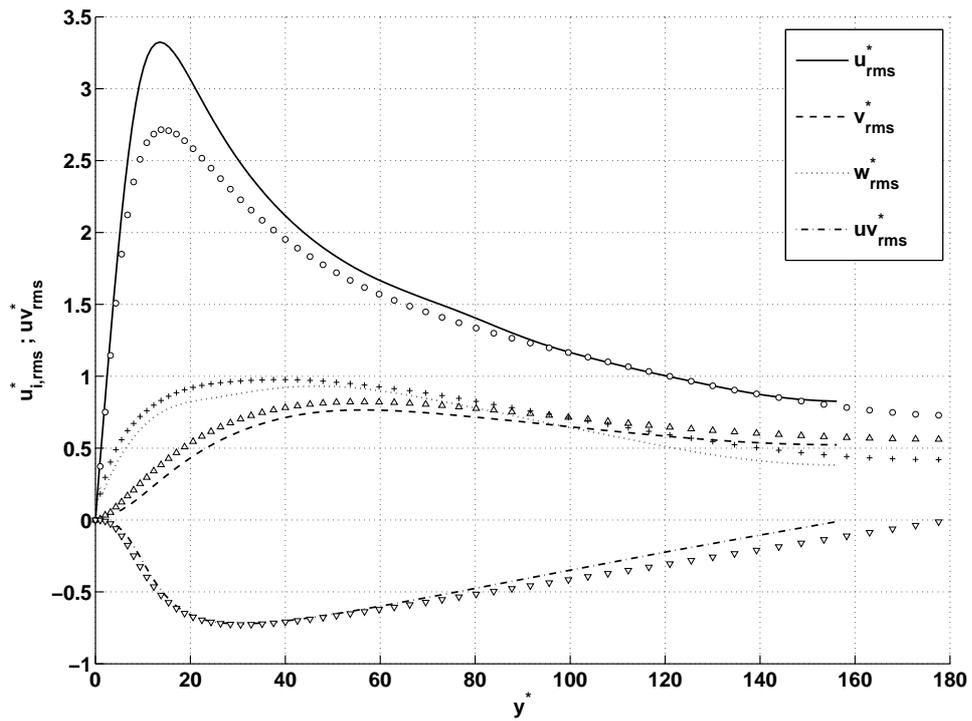
C - Fluctuations de vitesse

Comme suggéré par Huang et al. [31], un adimensionnement semi-local peut être utilisé afin d'effectuer des comparaisons entre un écoulement isotherme et anisotherme avec une meilleure concordance des résultats qu'en utilisant un adimensionnement en

unités pariétales classiques. Cet adimensionnement semi-local est obtenu en remplaçant $\rho_{g,s}$ par $\rho(y)$, $\nu_{g,s}$ par $\nu(y)$ et $u_\tau = \sqrt{\tau_{g,s}/\rho_{g,s}}$ par $u_\tau^* = \sqrt{\tau_{g,s}/\rho(y)}$ et en définissant var^* et y^* de manière similaire à var^+ et y^+ , où var désigne n'importe quelle variable. Les fluctuations r.m.s de vitesse $u_{i,rms}$ et la composante $uv_{rms} = \overline{u'v'}$ du tenseur de Reynolds ont été tracées en unités pariétales classiques et en unités semi-locales sur la figure 6.16. Exprimées en unités pariétales classiques, on constate que les niveaux de fluctuations de la turbulence du cas anisotherme sont plus élevés que ceux du cas isotherme et que les maximums s'éloignent de la paroi alors que la correspondance des résultats est plutôt bonne en utilisant un adimensionnement semi-local, excepté pour la valeur maximale de u_{rms}^+ qui reste environ 20% plus élevée pour l'écoulement anisotherme. Les autres fluctuations de vitesse sont légèrement plus faibles que celles du cas isotherme. Ces résultats confirment que l'anisothermicité joue essentiellement par un effet de densité et de viscosité variables sur la couche limite mais suggèrent également comme observé par Dailey & Pletcher [21] que toutes les différences entre un écoulement isotherme et anisotherme ne peuvent pas se réduire à un simple effet de densité moyenne. L'utilisation de l'adimensionnement semi-local pour les fluctuations de vorticit e trac ees sur la figure 6.17 et les termes de l' equations de l' energie cin etique turbulente moyenne \bar{k} pr esent ees sur la figure 6.18 am elior e  egalement la correspondance des r esultats entre l' ecoulement isotherme et anisotherme. Les profils deviennent en effet similaires sauf pour le terme de fluctuations r.m.s de vorticit e axiale $w_{x,rms}$ pour lequel les diff erences entre les deux cas atteignent 25% au maximum contre moins de 15% pour tous les autres profils.

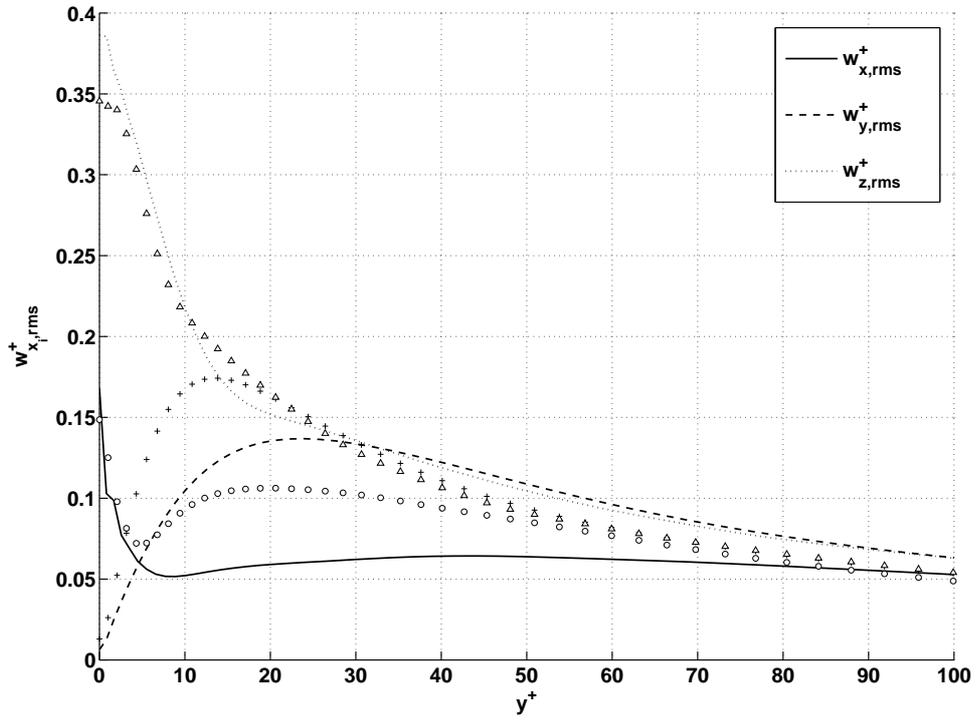


(a)

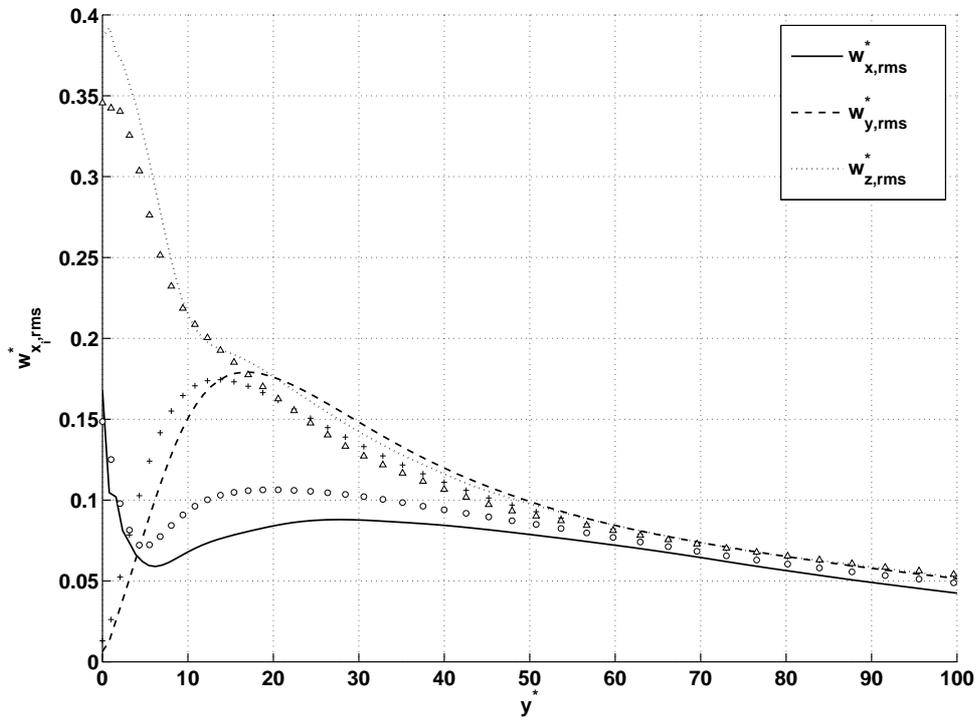


(b)

FIG. 6.16 – Fluctuations r.m.s (root-mean-square) de vitesse normalisées par la vitesse de cisaillement à la paroi. (a) : Unités classiques ; (b) : Unités semi-locales. Les traits et les symboles représentent respectivement les DNS anisothermes et isothermes.

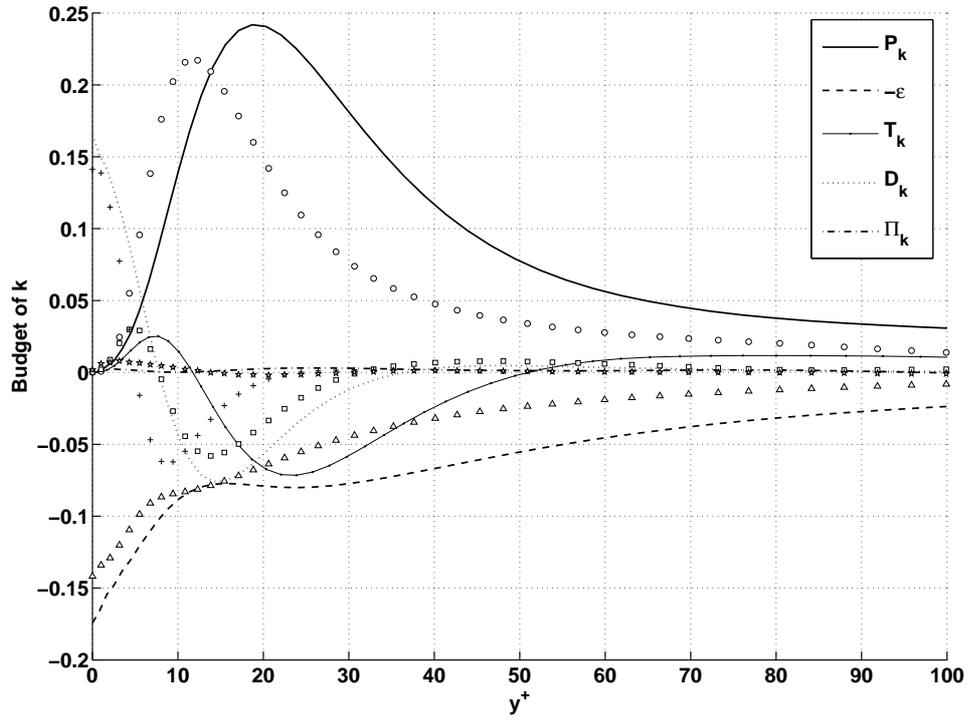


(a)

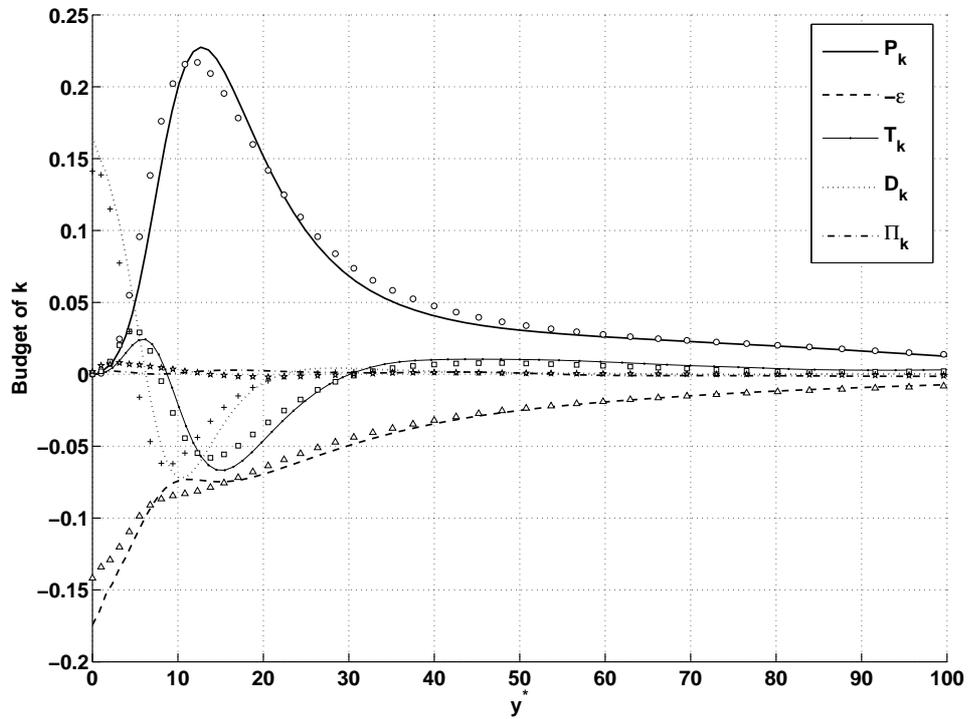


(b)

FIG. 6.17 – Fluctuations r.m.s de vorticit  normalis es par $\frac{u_{\tau}^2}{\nu_{g,s}}$. (a) : Unit s classiques ; (b) : Unit s semi-locales. Les traits et les symboles repr sentent respectivement les DNS anisothermes et isothermes.



(a)



(b)

FIG. 6.18 – Termes de l'équation de l'énergie cinétique turbulente moyenne exprimée en unités pariétales. P_k = Production, ϵ = Dissipation, T_k = Transport turbulent, D_k = Diffusion, Π_k = Corrélation vitesse-pression. (a) : Unités classiques; (b) : Unités semi-locales. Les traits et les symboles représentent respectivement les DNS anisothermes et isothermes.

6.4.3 Conclusion

L'analyse des résultats obtenus pour un écoulement turbulent anisotherme en canal montre que :

- l'anisothermicité modifie la structure de la couche limite turbulente, notamment en changeant l'épaisseur de la sous couche visqueuse (épaisseur plus importante dans le cas d'une masse volumique plus élevée à la paroi que dans le coeur du domaine).
- l'anisothermicité joue essentiellement par un effet de densité et de viscosité variables.
- les effets des gradients de densité et de viscosité sur la couche limite turbulente peuvent être correctement modélisés par un changement de variable tel que proposé dans le modèle LnKc par exemple.

6.5 Présentation des cas d'écoulements avec évaporation d'un film liquide

Nous allons maintenant étudier l'effet de l'évaporation d'un film liquide sur la couche limite d'un écoulement turbulent en canal. Pour ce faire, les résultats de DNS pour cinq des neuf cas calculés d'écoulement gazeux entre deux films liquides qui s'évaporent sont analysés. Afin d'établir les corrélations nécessaires à la construction des lois de paroi spécifiques à l'évaporation d'un film liquide, que l'on présente également dans ce chapitre, les résultats des neuf cas ont été utilisés. L'évaporation d'un film liquide s'accompagne nécessairement de gradients de densité et de viscosité ainsi que d'une vitesse de soufflage normale à la surface du film liquide appelée vitesse de Stephan : ce sont essentiellement ces phénomènes physiques qui sont décrits dans les sections suivantes.

6.5.1 Description paramétrique

Les propriétés thermodynamiques et de transport du mélange gazeux pour chacun des cas étudiés sont données dans le tableau 6.6. Les propriétés des écoulements et des maillages sont quant à elles fournies dans le tableau 6.7. Les indices ou exposants s et c désignent respectivement la surface du film liquide et l'axe central du canal. t_{sple} correspond à la durée sur laquelle les moyennes temporelles qui ont servi à établir les statistiques de la turbulence ont été calculées. Chaque cas diffère par la température de surface de film liquide T_S ainsi que par la température et la composition du gaz sur l'axe central du canal. Cela implique des intensités d'évaporation et des propriétés de mélange différentes pour chacun des cas. Par contre, nous avons choisi un nombre de Reynolds de canal assez proche pour chaque calcul (tableau 6.7). Ainsi, les dimensions du domaine ont été adaptés afin de conserver une vitesse axiale moyenne \overline{U}_c voisine de $50m.s^{-1}$.

Variables	Cas 1	Cas 2	Cas 3	Cas 4	Cas 5
$T_s [K]$	309.4	333.0	360.0	368.0	370.0
Y_F^s	0.30	0.60	0.90	0.98	0.99
$\bar{T}_c [K]$	401.9	503.2	598.2	319.1	499.3
$\bar{P}_c [Pa]$	99860	99750	100640	101840	101960
$\bar{U}_c [m.s^{-1}]$	48.2	51.7	50.4	51.6	50.0
$\bar{Y}_{F,c}$	0.097	0.189	0.210	0.560	0.237
$\bar{Y}_{O_2,c}$	0.211	0.192	0.184	0.108	0.181
$\bar{Y}_{N_2,c}$	0.692	0.619	0.606	0.332	0.582
$S_{c,F}$	1.83	1.40	1.00	0.85	0.85
S_{c,O_2}	0.60	0.45	0.30	0.25	0.25
S_{c,N_2}	0.54	0.40	0.30	0.24	0.24
P_{rl}	0.75	0.78	0.83	0.74	0.74
$\nu_{g,s} [m^2.s^{-1}]$	$1.04e^{-5}$	$6.35e^{-6}$	$3.57e^{-6}$	$2.39e^{-6}$	$2.32e^{-6}$
$\nu_c [m^2.s^{-1}]$	$2.33e^{-5}$	$2.98e^{-5}$	$3.84e^{-5}$	$6.26e^{-6}$	$2.77e^{-5}$

TAB. 6.6 – Propriétés thermodynamiques et de transport du mélange gazeux.

Variables	Cas 1	Cas 2	Cas 3	Cas 4	Cas 5
$h[m]$	$1.2382e^{-3}$	$1.5612e^{-3}$	$2.0936e^{-3}$	$3.3485e^{-4}$	$1.7239e^{-3}$
Re_e	2560	2710	2750	2760	3100
Re_τ	242	374	351	96	196
Δx^+	36.2	56.0	52.4	14.3	29.3
Δy_w^+	0.92	0.89	0.76	0.41	0.27
Δy_c^+	5.29	8.29	7.75	2.10	4.30
Δz^+	5.31	8.39	7.68	2.10	4.29
<i>Maillage</i>	$22 \times 155 \times 44$	$22 \times 172 \times 43$	$22 \times 176 \times 44$	$22 \times 150 \times 44$	$22 \times 196 \times 44$
$t_{sple} [h/\bar{U}_c]$	675	692	775	982	245

TAB. 6.7 – Propriétés de l'écoulement et du maillage.

Le cas 4 est le plus éloigné des critères requis pour calculer une configuration de type 'minimum channel' avec de bonnes statistiques de la turbulence. En effet, son nombre de Reynolds pariétal est le plus faible comme le montre le tableau 6.7. Sa valeur conduit à $L_z^+ = 90$ alors que le minimum requis est normalement de 100. Des exemples de spectre d'énergie cinétique turbulente (pour $y^+ = 34.2$) et de fonctions d'auto-corrélation spatiale à deux points sur les champs de vitesse dans la région de proche paroi ($y^+ = 7.2$) sont présentés respectivement sur les figures 6.19 et 6.20 pour ce cas. On constate que les comportements et les valeurs observés sont similaires à ceux des cas isotherme et anisothermes présentés dans les sections 6.3 et 6.4, démontrant ainsi que les domaines de simulation sont assez larges et la résolution des maillages suffisamment fine pour obtenir des statistiques de la turbulence en proche paroi acceptables pour les cas avec évaporation.

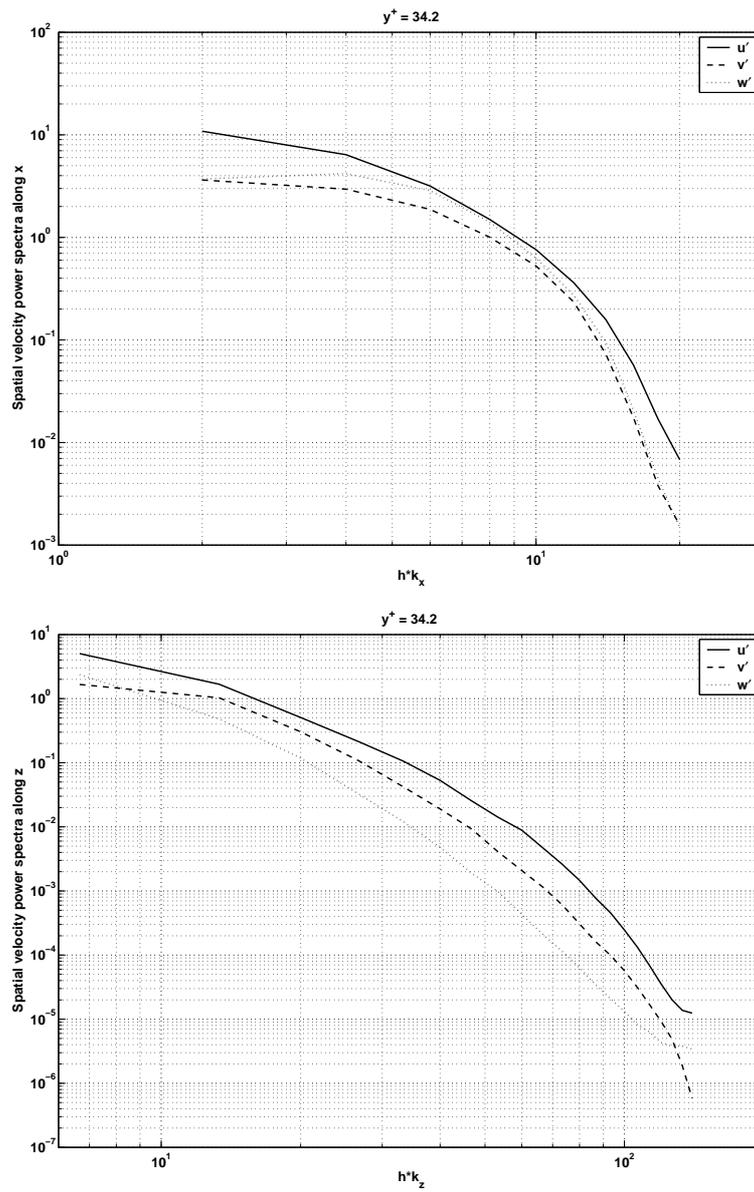


FIG. 6.19 – Exemple de spectre spatial d'énergie cinétique turbulente, selon les axes x et z , en $y^+ = 34.2$, pour un écoulement anisotherme sous l'influence de l'évaporation d'un film liquide pour le cas 4.

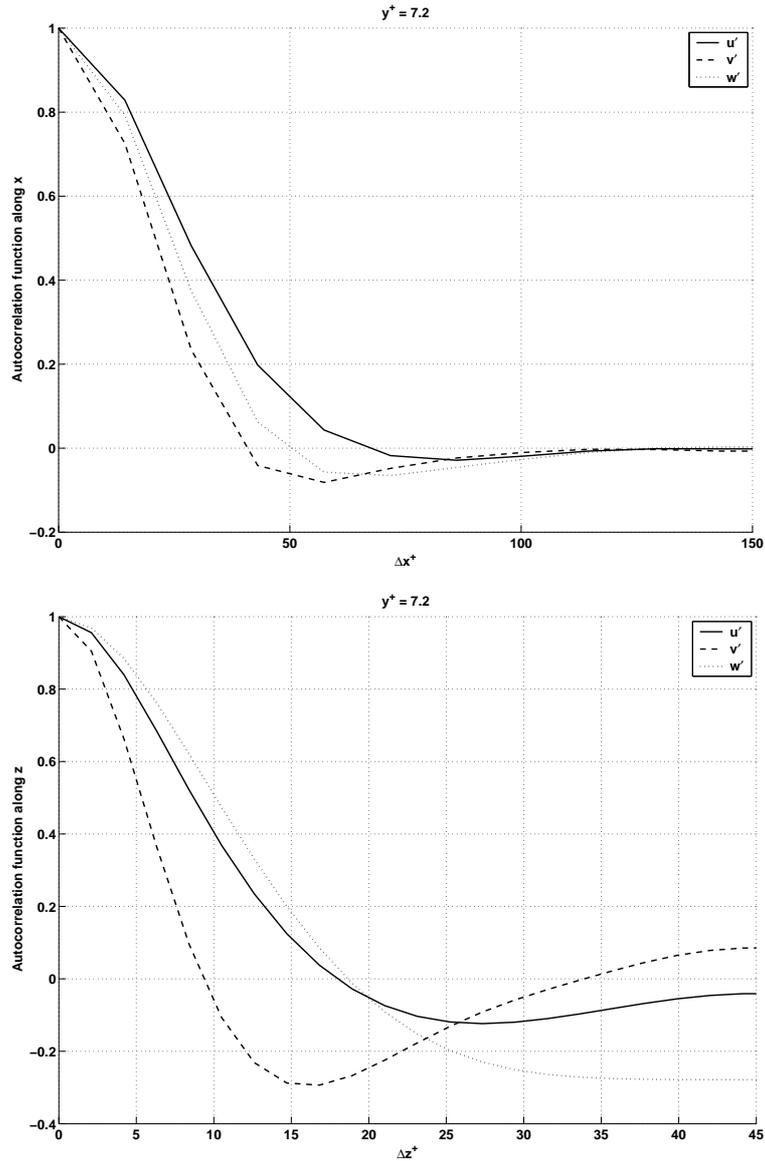


FIG. 6.20 – Exemple de fonction d’auto-corrélation spatiale à deux points sur les champs de vitesse, selon les axes x et z , dans la région de proche paroi en $y^+ = 7.2$, pour un écoulement anisotherme sous l’influence de l’évaporation d’un film liquide pour le cas 4. Dans les deux cas, seule la moitié du domaine de calcul est représentée.

6.5.2 Caractérisation des différents cas d’évaporation présentés

Le tableau 6.8 montre, pour les 5 cas d’évaporation présentés dans ce chapitre, la vitesse de frottement à la surface du film liquide u_τ , le flux thermique entre le gaz et le film à l’interface liquide-gaz $\varphi_{g,s}$, le débit de masse évaporée \dot{M} , la vitesse de Stephan ou vitesse normale à la surface du film liquide induite par l’évaporation normalisée par la vitesse de cisaillement $v_s^+ = \frac{v_s}{u_\tau}$ ainsi que le rapport entre la masse volumique du gaz à la transition laminaire-turbulent pour la couche limite massique et la masse volumique à l’interface liquide-gaz $\rho_{lt}^+ = \frac{\rho_{g,lt}}{\rho_{g,s}}$. On note tout d’abord que le débit évaporé \dot{M} augmente

du cas 1 au cas 4. Par contre, bien que l'on aurait pu s'attendre à ce que l'évaporation soit la plus intense dans le cas 5 puisqu'il possède la température de surface T_s la plus grande, il n'en est rien à cause des gradients de densité et de viscosité plus élevés qui limitent l'évaporation. En effet, ces gradients affectent la couche limite en diminuant la vitesse de cisaillement u_τ et les gradients de température et d'espèces chimiques. Cette affirmation sera démontrée lors de l'analyse des résultats. Ensuite, on retiendra que la vitesse de Stephan adimensionnelle v_s^+ augmente du cas 1 au 5. Enfin, le tableau 6.8 montre que la vitesse de cisaillement à la surface du film liquide u_τ diminue lorsque le débit de masse évaporé \dot{M} ou les gradients de densité augmentent. Dans le cas le plus extrême (cas 5), la vitesse de frottement u_τ est divisée par un facteur 10 en comparaison de sa valeur dans les mêmes conditions mais sans évaporation ni gradients de densité (cas isotherme de la section 6.3 dans laquelle $u_\tau = 2.75$). Il est donc nécessaire de garder ces valeurs à l'esprit lorsque l'on analyse des variables exprimées en unités pariétales, surtout en comparaison du cas isotherme de la section 6.3.

Variabiles	Cas 1	Cas 2	Cas 3	Cas 4	Cas 5
$u_\tau [m.s^{-1}]$	2.04	1.52	0.60	0.69	0.26
$\varphi_{g,s} [kJ.m^{-2}.s^{-1}]$	17.2	24.4	9.93	-3.58	1.36
$\dot{M} [kg.m^{-2}.s^{-1}]$	$2.89e^{-2}$	$9.63e^{-2}$	$4.02e^{-1}$	2.54	1.29
v_s^+	0.010	0.035	0.249	1.164	1.508
ρ_{tt}^+	0.789	0.610	0.474	0.830	0.555

TAB. 6.8 – Paramètres caractéristiques de la couche limite située au dessus d'un film liquide : évaporation, flux thermique et vitesse de cisaillement.

6.6 Résultats : analyse physique du couplage mutuel entre l'évaporation d'un film liquide et la couche limite turbulente

6.6.1 Profils de vitesse moyenne axiale

Les profils issus de la DNS, de la vitesse moyenne axiale exprimée en unités pariétales u^+ ont été tracés sur la figure 6.21 pour chaque cas d'évaporation. Ces profils ne sont pas logarithmiques dans la zone pleinement turbulente de la couche limite. Il devient même difficile de déterminer une transition nette entre la sous-couche visqueuse et inertielle. De plus, les disparités sont très importantes suivant les cas d'évaporation observés. Par exemple, il y a un ordre de grandeur de différence sur u^+ entre le cas 1 qui constitue le cas d'évaporation le plus proche d'un cas anisotherme classique et le cas 5 qui constitue notre cas le plus éloigné. On constate donc que les unités pariétales classiques ne sont plus adaptées pour le développement de lois de paroi avec évaporation.

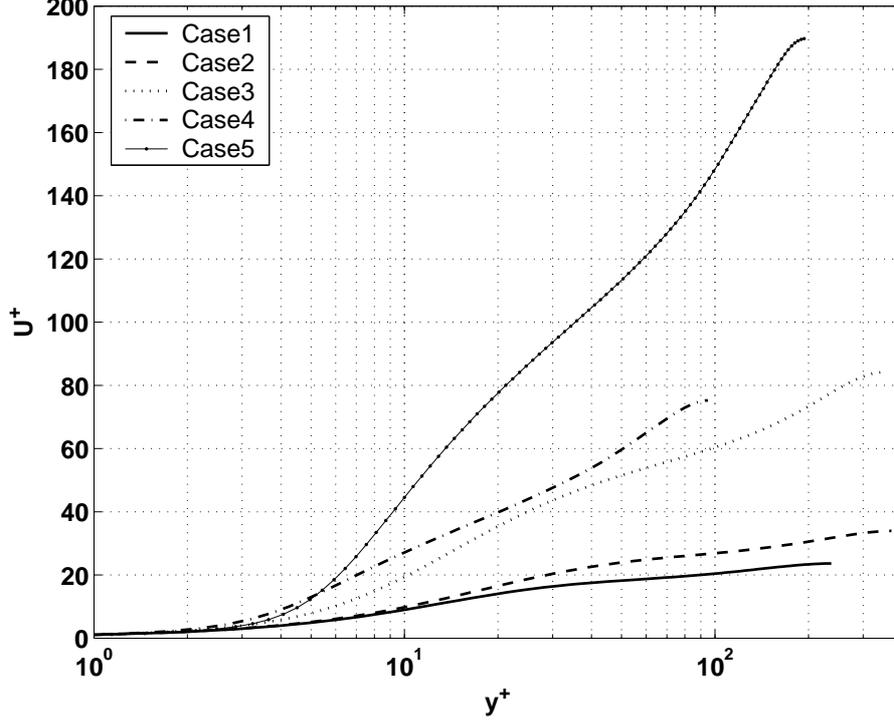


FIG. 6.21 – Vitesse axiale moyenne exprimée avec les unités pariétales classiques (\bar{u}^+, y^+).

6.6.2 Analyse de l'équation de quantité de mouvement axiale moyenne

Les figures 6.22 et 6.23 montrent que l'équation de quantité de mouvement axiale moyenne 6.18 utilisée dans la section anisotherme 6.4 n'est pas satisfaite par la contrainte de cisaillement totale τ^+ définie dans la section 6.4. En effet, les maximums de la contrainte de cisaillement laminaire et totale ne sont pas localisés à la surface du film liquide ou à la paroi comme dans un écoulement isotherme ou anisotherme sans évaporation. Le rapport entre la valeur maximale de la contrainte de cisaillement et sa valeur à la surface du film est d'autant plus élevé que l'évaporation et les gradients de densité sont forts. Ce rapport atteint un maximum très élevé d'environ 100 dans le cas 5.

En fait, pour l'écoulement de canal turbulent pleinement développé avec évaporation, l'équation de quantité de mouvement axiale moyenne exprimée en unités pariétales peut se réduire à l'expression suivante :

$$\begin{aligned}
 \bar{\rho}^+ \bar{u}^+ \bar{v}^+ + 1 - \int_0^{y^+} \bar{S}_x^+ dy^+ &= \rho^+ \nu^+ \frac{\partial \bar{u}^+}{\partial y^+} - \left[\bar{\rho}^+ \overline{u'v'}^+ + \bar{u}^+ \overline{\rho'v'}^+ + \bar{v}^+ \overline{\rho'u'}^+ \right] \\
 &= \tau_{lam}^+ + \tau_{turbmod}^+ = \tau_{mod}^+
 \end{aligned} \tag{6.19}$$

dans laquelle l'intégrale du terme source de quantité de mouvement axiale moyenne exprimée en unités pariétales $\int_0^{y^+} \bar{S}_x^+ dy^+$ s'écrit (cf définition des termes sources de la section 6.2) :

$$\int_0^{y^+} \bar{S}_x^+ = \frac{\int_0^y \left[S + \overline{S_M(l_y) \cdot u(l_y)} \right] dl_y}{\rho_{g,s} u_\tau^2} \tag{6.20}$$

Les figures 6.24, 6.26 et 6.28 montrent que le terme $-\bar{u}^+\overline{\rho'v'^+}$ ne peut être négligé lorsque un écoulement turbulent comporte à la fois de forts gradients de densité et une vitesse normale à l'écoulement principal comme cela est le cas pour l'évaporation d'un film liquide dans un écoulement turbulent. Ce terme compense la contrainte de cisaillement turbulente usuelle $\tau_{turb}^+ = \bar{\rho}^+\overline{u'v'^+}$ et sa contribution semble d'autant plus importante que les gradients de densité sont forts par rapport à la vitesse normale. C'est pourquoi le rapport entre le terme $\bar{u}^+\overline{\rho'v'^+}$ et τ_{turb}^+ est plus faible dans le cas 4 (voir la figure 6.26) que dans les cas 2 et 5 (voir les figures 6.24 et 6.28), puisque l'évaporation est très forte et les gradients de densité plutôt faibles dans le cas 4 comparé aux cas 2 et 5 (voir tableau 6.8 de la section 6.5). Par ailleurs, on voit que le terme $-\bar{v}^+\overline{\rho'u'^+}$ est souvent petit. Cependant, il n'est pas toujours négligeable comme le montre la figure 6.28 dans le cas 5. Ainsi, la contrainte de cisaillement turbulente modifiée $\tau_{turbmod}^+$ par rapport à celle utilisée usuellement et que l'on doit considérer pour la couche limite avec évaporation est la suivante :

$$\tau_{turbmod}^+ = - \left[\bar{\rho}^+\overline{u'v'^+} + \bar{u}^+\overline{\rho'v'^+} + \bar{v}^+\overline{\rho'u'^+} \right] \quad (6.21)$$

Les figures 6.25, 6.27 et 6.29 montrent que la contrainte de cisaillement totale modifiée τ_{mod}^+ n'est plus maximale à la surface du film liquide comme dans les écoulements classiques isothermes ou anisothermes sans évaporation, mais à proximité de celle-ci. L'endroit où la contrainte de cisaillement turbulente modifiée $\tau_{turbmod}^+$ devient prépondérante devant la contrainte laminaire τ_{lam}^+ est situé d'autant plus près de la surface du film liquide et la transition est d'autant plus marquée que l'évaporation est plus forte ($y^+ < 5$ dans les cas 4 et 5 sur les figures 6.27 et 6.29 en comparaison de $y^+ > 30$ dans le cas 2 sur la figure 6.25). Ainsi, on comprend la difficulté de construction de lois de paroi valables pour une large gamme d'évaporation puisque la structure et le comportement de la couche limite dépendent très fortement du débit évaporé et des gradients de densité. C'est pourquoi, les lois de paroi développées dans la section 6.7 s'éloignent des profils fournis par les DNS de façon différente dans la zone tampon et les distances entre la surface du film liquide et les transitions laminaire-turbulent η_{lt} , $\eta_{lt,T}$ et $\eta_{lt,m}$ sont différentes suivant les cas d'évaporation considérés.

Le terme source total $\overline{S_x} = S + \overline{S_M.u}$ ajouté à l'équation de quantité de mouvement axiale moyenne dépend de y^+ lorsque le débit évaporé devient si important que le terme source $\overline{S_M.u}$ n'est plus négligeable devant le terme source constant S . C'est pourquoi le profil du terme $1 - \int_0^{y^+} \overline{S_x}^+ dy^+$ est presque linéaire (comme dans les écoulements isothermes et anisothermes) uniquement dans le cas d'évaporation 2 comme on le voit sur la figure 6.25 mais pas dans les cas 4 et 5 comme on le voit sur les figures 6.27 et 6.29. Par ailleurs, le terme $\bar{\rho}^+\bar{u}^+\bar{v}^+$ augmente de façon évidente avec l'augmentation de la vitesse de Stephan et des gradients de densité. Ainsi, le profil de contrainte de cisaillement totale modifiée τ_{mod}^+ n'est jamais linéaire pour un écoulement turbulent en canal avec évaporation.

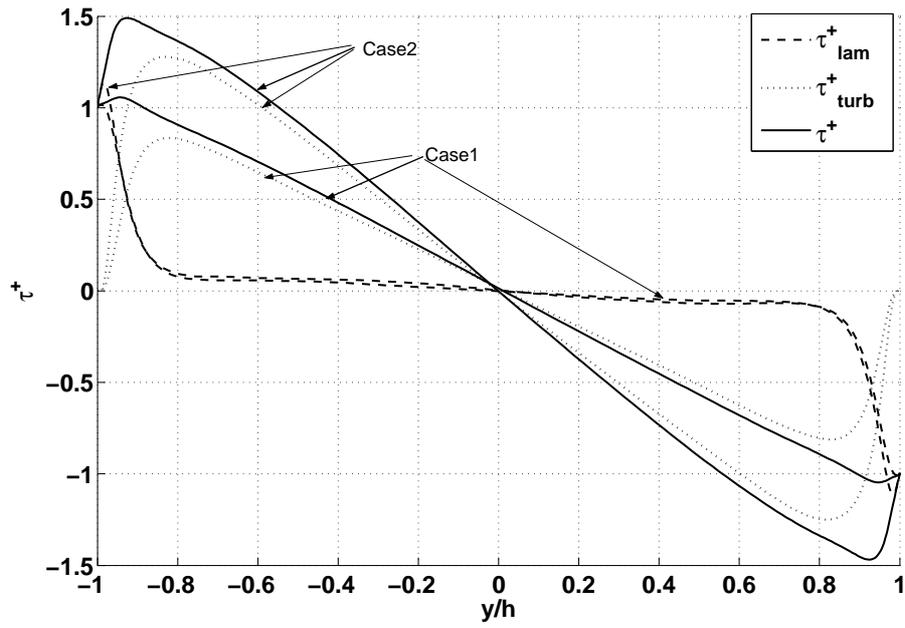


FIG. 6.22 – Profils de contrainte de cisaillement τ^+ normalisée par la vitesse de frottement pour les cas 1 et 2.

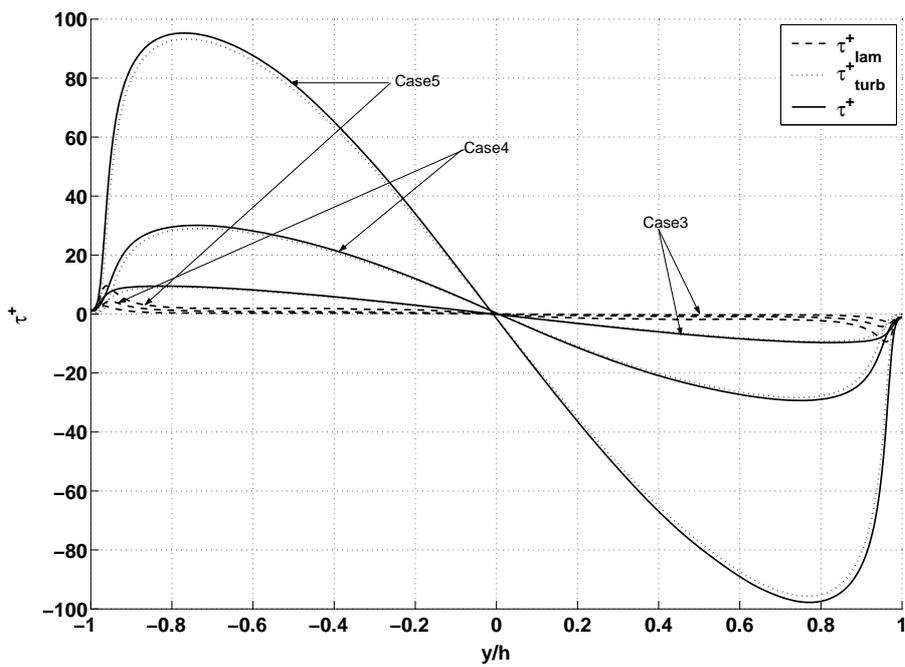


FIG. 6.23 – Profils de contrainte de cisaillement τ^+ normalisée par la vitesse de frottement pour les cas 3,4 et 5.

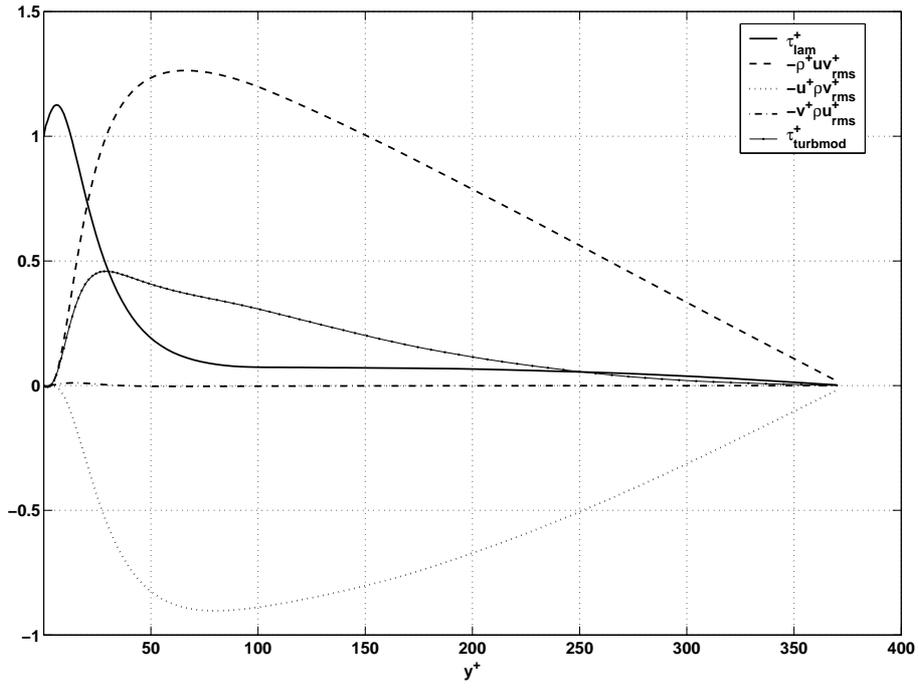


FIG. 6.24 – Différents termes composant la contrainte de cisaillement turbulente modifiée $\tau_{turbmod}^+$ en tenant compte des fluctuations de densité et normalisée par la vitesse de frottement pour le cas 2.

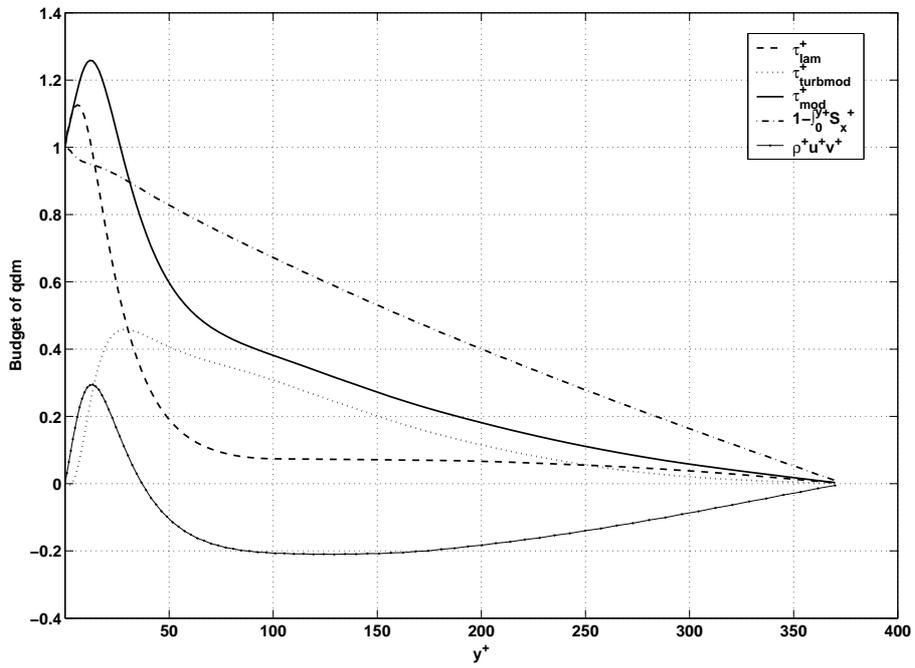


FIG. 6.25 – Termes de l'équation de quantité de mouvement axiale moyenne exprimée en unités pariétales pour le cas 2.

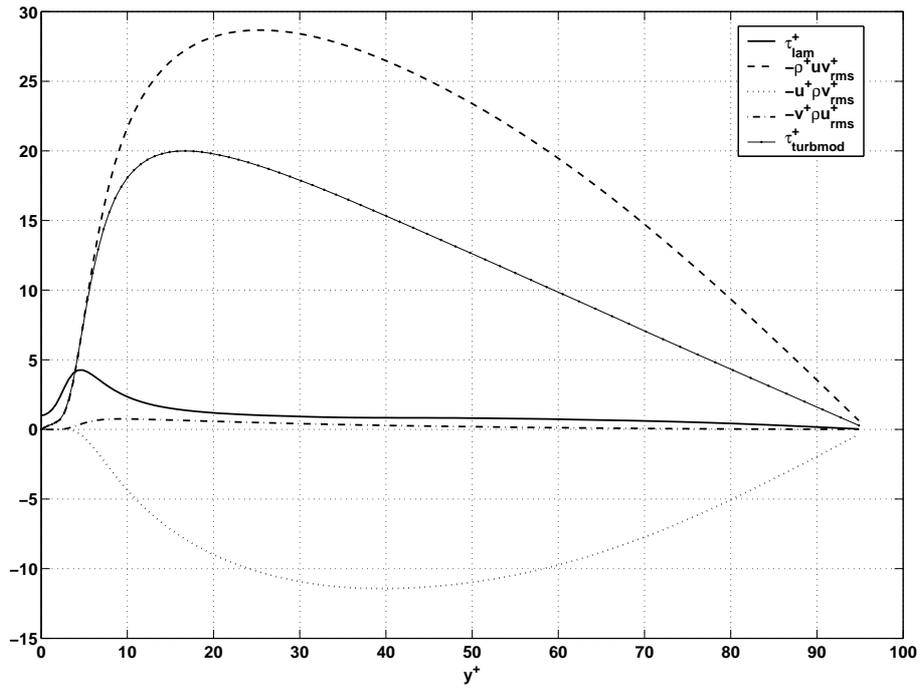


FIG. 6.26 – Différents termes composant la contrainte de cisaillement turbulente modifiée $\tau_{turbmod}^+$ en tenant compte des fluctuations de densité et normalisée par la vitesse de frottement pour le cas 4.

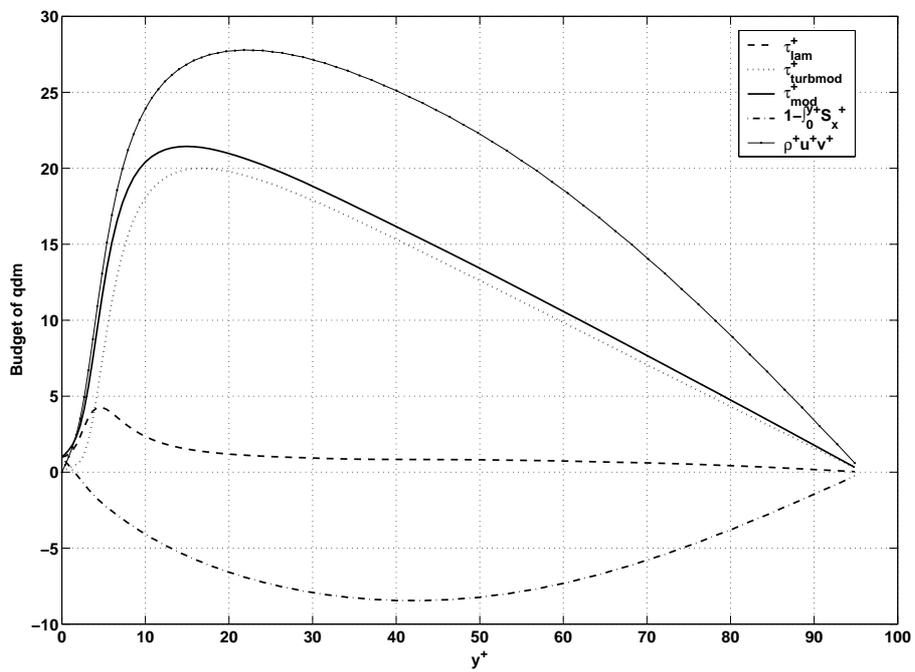


FIG. 6.27 – Termes de l'équation de quantité de mouvement axiale moyenne exprimée en unités pariétales pour le cas 4.

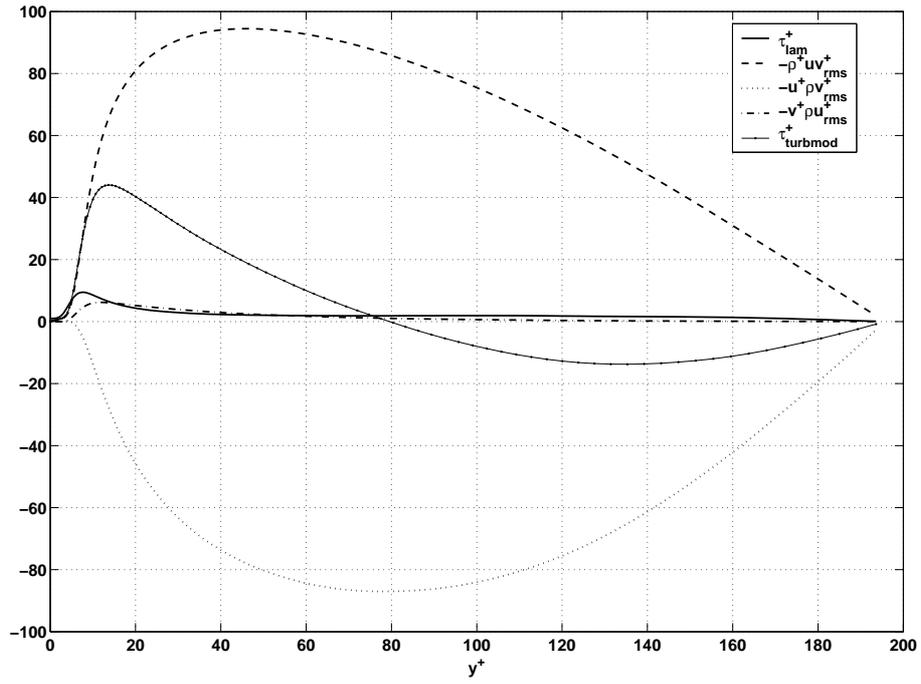


FIG. 6.28 – Différents termes composant la contrainte de cisaillement turbulente modifiée $\tau_{turbmod}^+$ en tenant compte des fluctuations de densité et normalisée par la vitesse de frottement pour le cas 5.

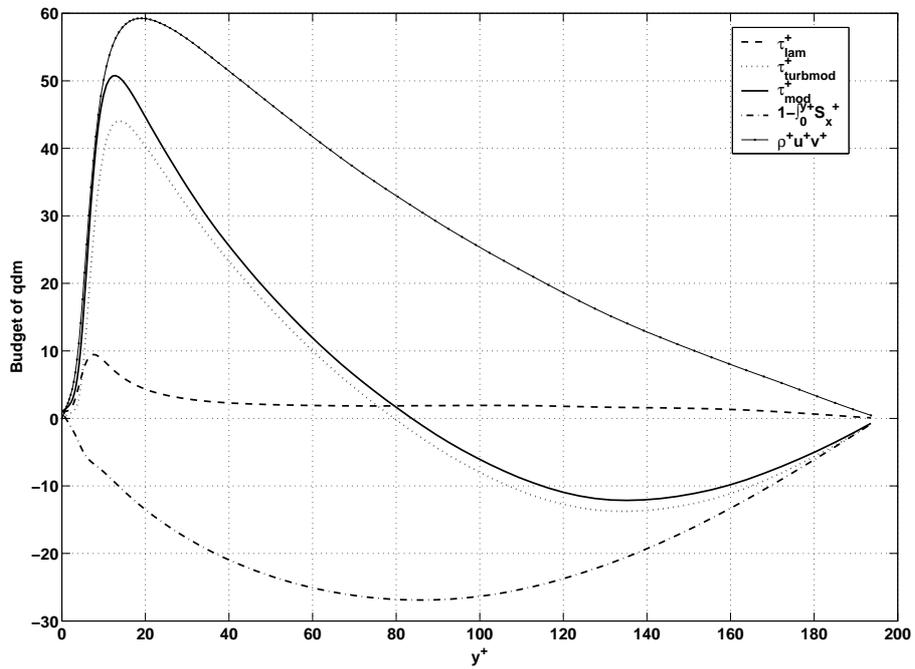


FIG. 6.29 – Termes de l'équation de quantité de mouvement axiale moyenne exprimée en unités pariétales pour le cas 5.

6.6.3 Fluctuations

A - Fluctuations de vitesse

Les profils des fluctuations r.m.s de vitesse normalisées respectivement par la vitesse de cisaillement u_τ propre à chaque cas d'évaporation et u_{τ_0} propre au cas isotherme de la section 6.3 sont présentés respectivement sur les figures 6.30, 6.32, 6.34 et les figures 6.31, 6.33, 6.35. Tout d'abord, les valeurs extrêmement élevées des niveaux de fluctuations de vitesse normalisées par u_τ pour les cas d'évaporation avec une vitesse de Stephan adimensionnelle v_s^+ élevée et des gradients de masse volumique importants proviennent essentiellement des faibles valeurs des vitesses de cisaillement u_τ . En effet, comme on peut le voir sur la figure 6.31, la valeur maximale des fluctuations r.m.s de vitesse axiale est à peu près la même pour tous les cas d'évaporation et pour le cas isotherme lorsque on utilise une normalisation constante basée sur u_{τ_0} . Par contre, la position et la largeur des maximums dépendent de chaque cas d'évaporation. D'une manière générale, le pic est d'autant plus large que l'évaporation et les gradients de densité sont forts. Tout cela est en adéquation avec le fait que la structure de la couche limite est modifiée et que les maximums des contraintes de cisaillement $\tau_{turbmod}^+$ and τ_{lam}^+ (qui sont directement liées au terme de production d'énergie cinétique turbulente moyenne) ne sont pas localisés à la surface du film liquide comme nous l'avons observé précédemment lors de l'analyse de l'équation de la quantité de mouvement axiale moyenne. La figure 6.33 montre que les fluctuations r.m.s de vitesse normale adimensionnées par u_{τ_0} sont de façon logique d'autant plus élevées que l'évaporation est forte. La position du maximum dépend quant à elle de chaque cas d'évaporation alors que les profils suivent tous les mêmes tendances. Le fait que le cas 1 présente des fluctuations de vitesse normale plus faibles que le cas isotherme provient sans doute des gradients de masse volumique et de viscosité. Finalement, la figure 6.35 montre que les observations effectuées sur les fluctuations de vitesse normale sont également applicables aux fluctuations de vitesse transversales.

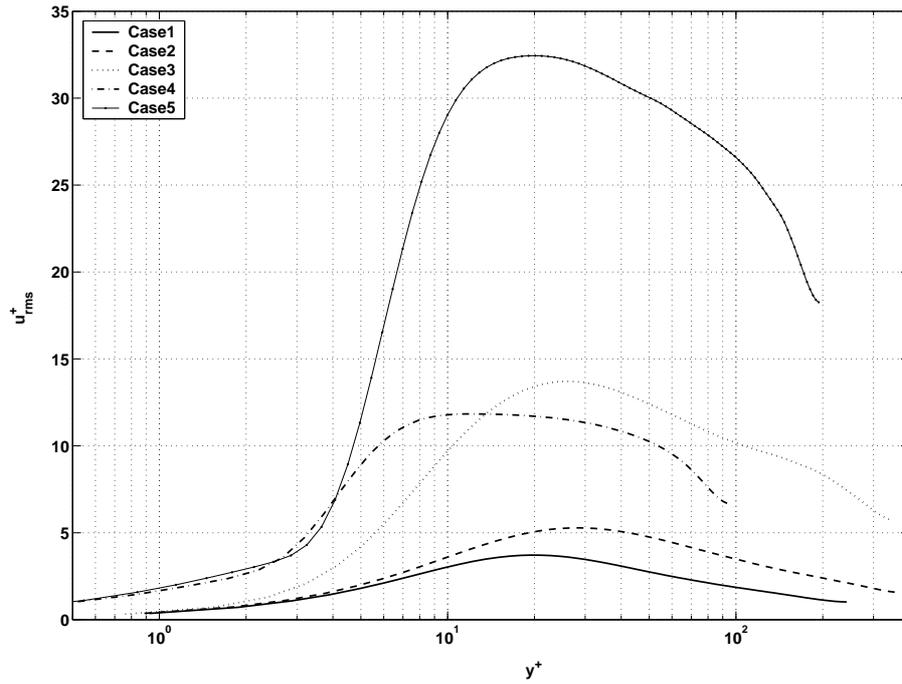


FIG. 6.30 – Profils des fluctuations r.m.s de vitesse axiale normalisées par la vitesse de cisaillement propre à chaque cas d'évaporation $\frac{\sqrt{u'^2}}{u_\tau}$.

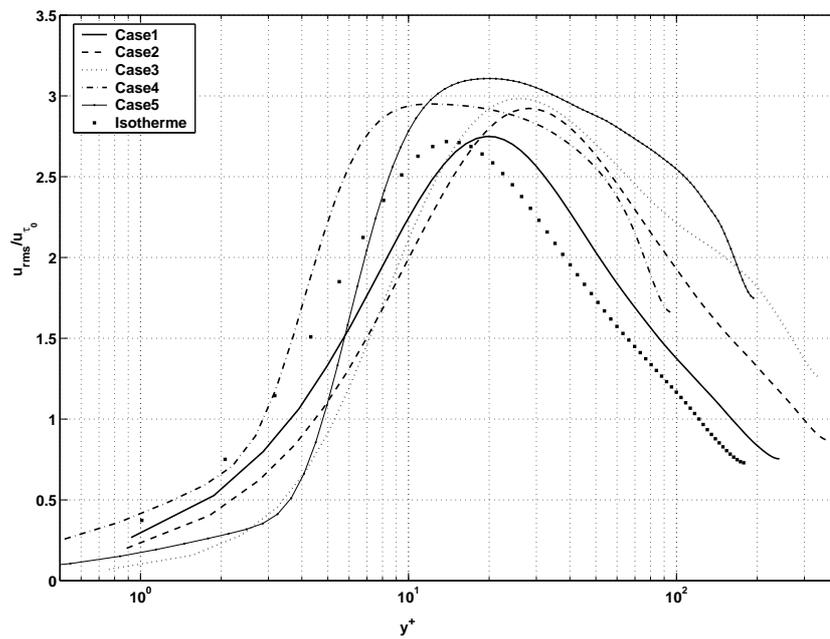


FIG. 6.31 – Profils des fluctuations r.m.s de vitesse axiale normalisées par la vitesse de cisaillement propre au cas isotherme $\frac{\sqrt{u'^2}}{u_{\tau_0}}$.

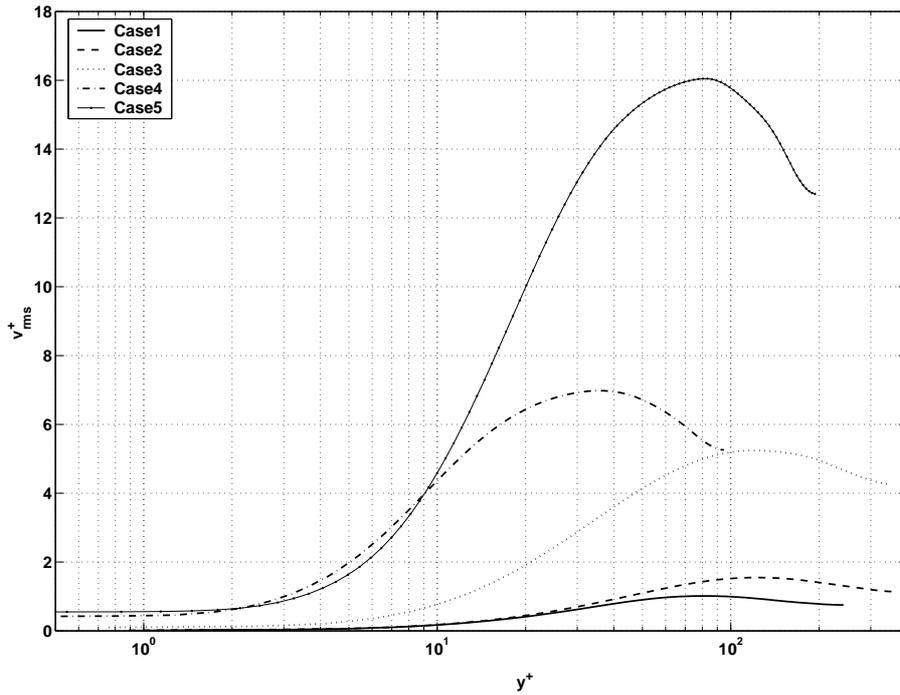


FIG. 6.32 – Profils des fluctuations r.m.s de vitesse normale normalisées par la vitesse de cisaillement propre à chaque cas d'évaporation $\frac{\sqrt{v'^2}}{u_\tau}$.

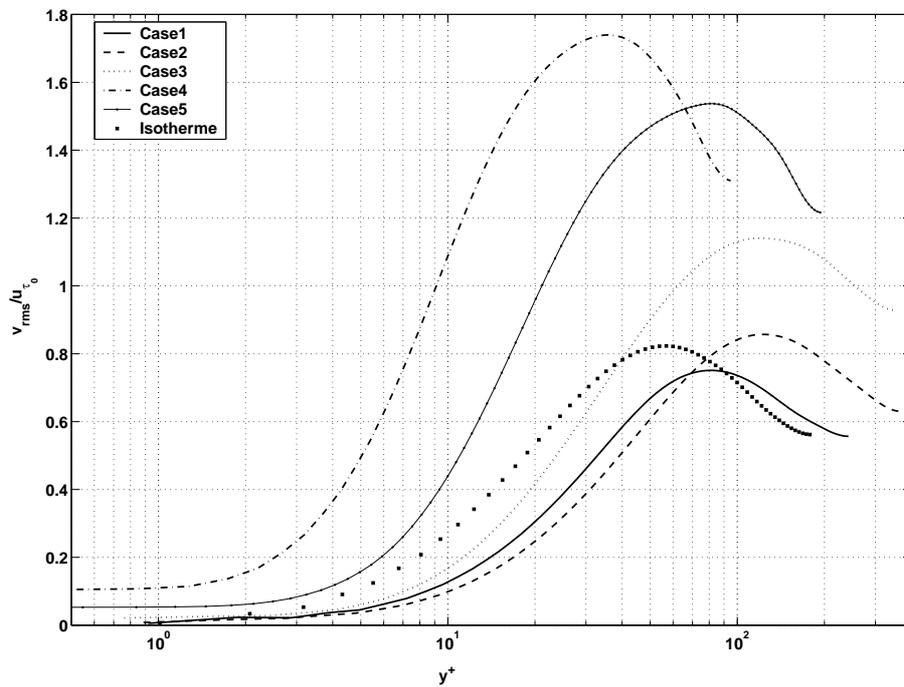


FIG. 6.33 – Profils des fluctuations r.m.s de vitesse normale normalisées par la vitesse de cisaillement propre au cas isotherme $\frac{\sqrt{v'^2}}{u_{\tau_0}}$.

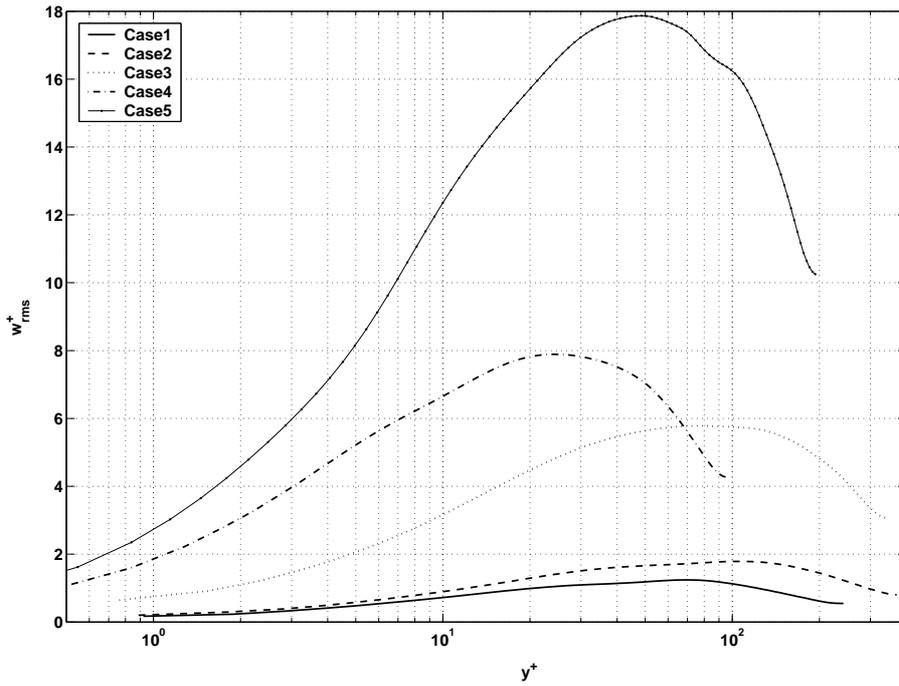


FIG. 6.34 – Profils des fluctuations r.m.s de vitesse transversale normalisées par la vitesse de cisaillement propre à chaque cas d'évaporation $\frac{\sqrt{w'^2}}{u_\tau}$.

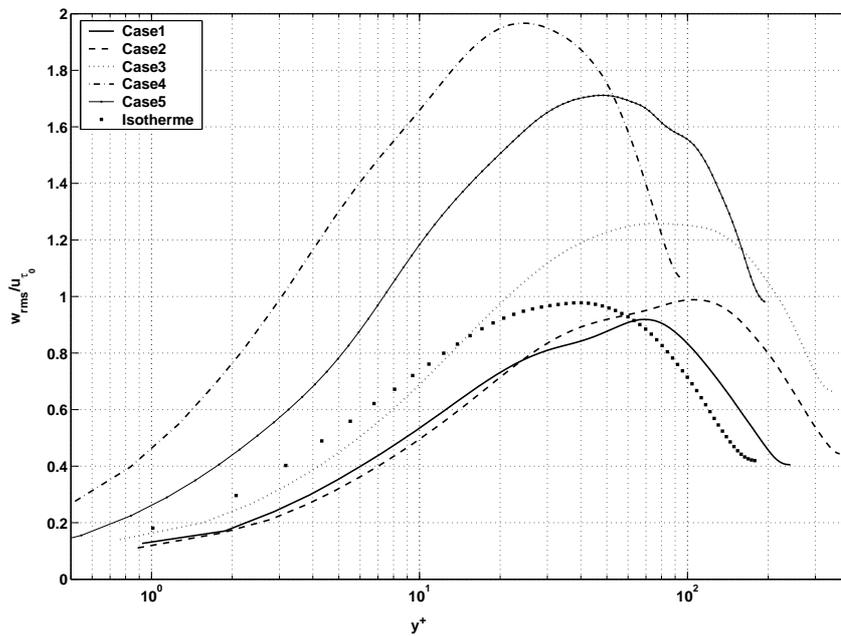


FIG. 6.35 – Profils des fluctuations r.m.s de vitesse transversale normalisées par la vitesse de cisaillement propre au cas isotherme $\frac{\sqrt{w'^2}}{u_{\tau_0}}$.

B - Fluctuations de température et de fraction massique de fuel

Par analogie avec l'expression de la température adimensionnelle T^+ donnée par l'équation 6.14 de la section 6.4, on définit les fluctuations r.m.s adimensionnelles de

température T_{rms}^+ par la relation suivante :

$$T_{rms}^+ = \sqrt{T'^2} \left| \frac{\rho_{g,s} C_p u_\tau}{\varphi_{g,s}} \right| \quad (6.22)$$

De la même façon, par analogie entre les expressions de T_{eff}^+ et $Y_{F_{eff}}^+$ données respectivement par les équations 6.73 et 6.74 de la section 6.7, les fluctuations r.m.s adimensionnelles de fraction massique de fuel $Y_{F_{rms}}^+$ sont définies par la relation suivante :

$$Y_{F_{rms}}^+ = \frac{\sqrt{Y_F'^2}}{(1 - Y_F^s) v_s^+} \quad (6.23)$$

La figure 6.36 montre que les profils de fluctuations r.m.s adimensionnelles de température T_{rms}^+ suivent les mêmes tendances que ceux de vitesse axiale de la figure 6.30. De plus, les niveaux des maximums sont également presque identiques. Cela signifie que les champs de température se comportent statistiquement de façon très similaires aux champs de vitesse et que donc le maximum du flux de chaleur n'est certainement pas localisé non plus à la surface du film liquide. Par contre, cela ne signifie pas que les champs instantanés de température et de vitesse sont fortement corrélés. La figure 6.37 montre quant à elle que les profils de fluctuations r.m.s adimensionnelles de fraction massique de fuel $Y_{F_{rms}}^+$ ressemblent beaucoup à ceux de température T_{rms}^+ , mais que les niveaux des maximums sont largement différents. En particulier, les valeurs de $Y_{F_{rms}}^+$ pour les cas 1 et 2 sont proportionnellement beaucoup plus élevées que celles de T_{rms}^+ . Ces différences s'expliquent par le fait que la vitesse de Stephan v_s^+ (qui est utilisée dans l'expression de $Y_{F_{rms}}^+$) est proportionnelle à $\frac{1}{S_{cl,0}}$. En effet, le nombre de Schmidt laminaire corrigé du fuel dans un mélange air-fuel à la surface du film liquide $S_{cl,0}$ donné par l'équation 6.80 de la section 6.7 varie de 0.2486 dans le cas 5 à 1.4496 dans le cas 1, alors que les fluctuations de fraction massique de fuel ne dépendent pas de façon significative de $S_{cl,0}$. Par exemple, dans le cas 5, $S_{cl,0}$ est environ trois fois plus faible que P_{rl} . Cela explique pourquoi le maximum de $Y_{F_{rms}}^+$ est trois fois moins élevé que celui de T_{rms}^+ dans le cas 5. Ainsi, si $S_{cl,0}$ était le même pour tous les cas d'évaporation comme c'est le cas pour P_{rl} alors les fluctuations de fraction massique de fuel $Y_{F_{rms}}^+$ seraient du même niveau que celles de température T_{rms}^+ . Cela signifie que les champs de fraction massique de fuel se comportent également statistiquement de façon très similaire aux champs de vitesse.

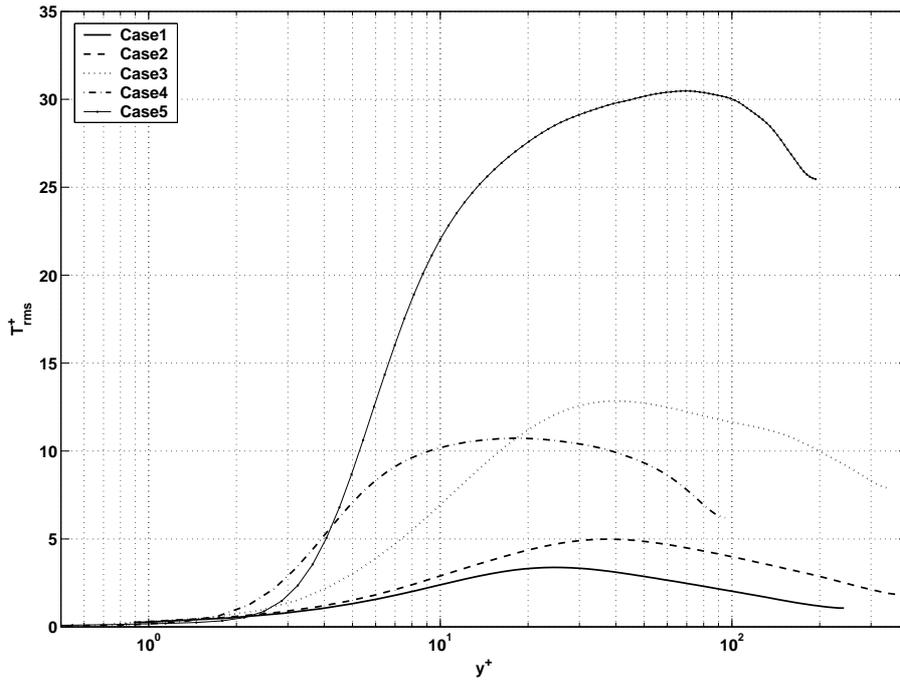


FIG. 6.36 – Profils de fluctuations r.m.s adimensionnelles de température $\sqrt{T'^2} \left| \frac{\rho_{g,s} C_p u_\tau}{\varphi_{g,s}} \right|$.

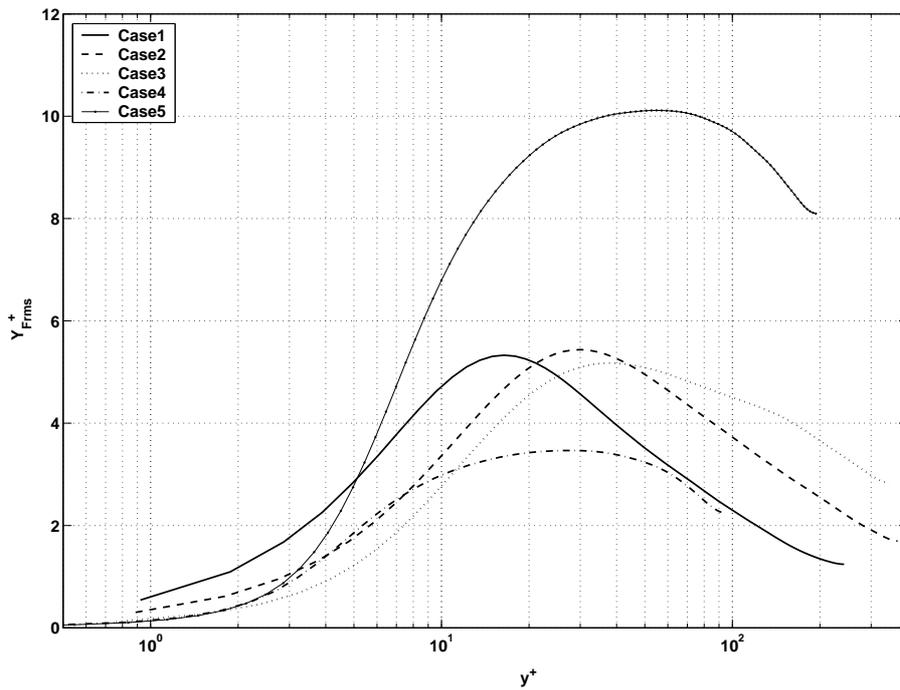


FIG. 6.37 – Profils de fluctuations r.m.s adimensionnelles de fraction massique de fuel $\frac{\sqrt{Y_F'^2}}{(1-Y_F^s)v_s^+}$.

C - Fluctuations de vorticité

Tout d'abord, les figures 6.38, 6.39 et 6.40 montrent que les fluctuations r.m.s de vorticité normalisées par $\frac{u_\tau^2}{\nu_{g,s}}$ sont beaucoup plus élevées dans les cas avec évaporation que

dans le cas isotherme de la section 6.3 (voir figure 6.9). Leurs valeurs augmentent du cas 1 au 5, c'est à dire avec l'augmentation du débit de masse évaporé et des gradients de densité et de viscosité. On peut partiellement expliquer ce comportement par la grande disparité de valeurs prises par l'adimensionnement $\frac{u_\tau^2}{\nu_{g,s}}$ selon les cas de DNS considérés, mais ce n'est pas la seule raison. En effet, le terme $\frac{u_\tau^2}{\nu_{g,s}}$ est environ deux fois plus grand dans le cas 4 que dans le cas 3 alors que les fluctuations r.m.s de vorticité normalisées sont beaucoup plus élevés dans le cas 4 que dans le cas 3. Par ailleurs, selon la figure 6.38, on constate que la vitesse de Stephan engendrée par l'évaporation semble accentuer les creux et les bosses des profils de fluctuations r.m.s de vorticité axiale normalisées $w_{x,rms}^+$ (voir les cas 4 et 5) alors que les gradients de densité et de viscosité semblent les aplanir (voir le cas 3) comme on peut également le voir sur la figure 6.17 du cas anisotherme de la section 6.4. Ensuite, comme le montrent les figures 6.39 et 6.17, la forme des profils de fluctuations r.m.s adimensionnelles de vorticité normale $w_{y,rms}^+$ est identique pour tous les cas traités (avec et sans évaporation), sauf à proximité de la surface du film liquide où la pente des profils est plus petite pour les cas à forte évaporation. Enfin, la figure 6.40 montre que les profils de fluctuations r.m.s adimensionnelles de vorticité transversale $w_{z,rms}^+$ avec évaporation sont totalement différents des profils isothermes classiques (voir figure 6.9 de la section 6.3). En effet, un pic, d'autant plus important que l'évaporation et les gradients de densité sont forts, est observé entre la surface du film liquide et $y^+ = 10$. Ce maximum de fluctuations r.m.s de vorticité transversale correspond au maximum de la contrainte de cisaillement laminaire qui n'est plus localisée à l'interface liquide-gaz lorsque le film s'évapore.

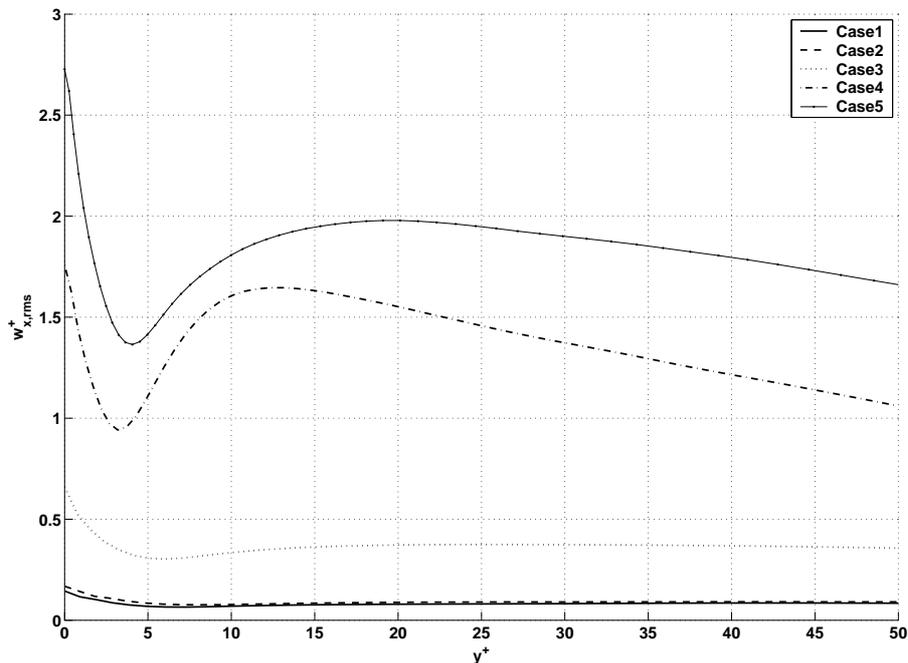


FIG. 6.38 – Profils de fluctuations r.m.s de vorticité axiale normalisées par $\frac{u_\tau^2}{\nu_{g,s}}$.

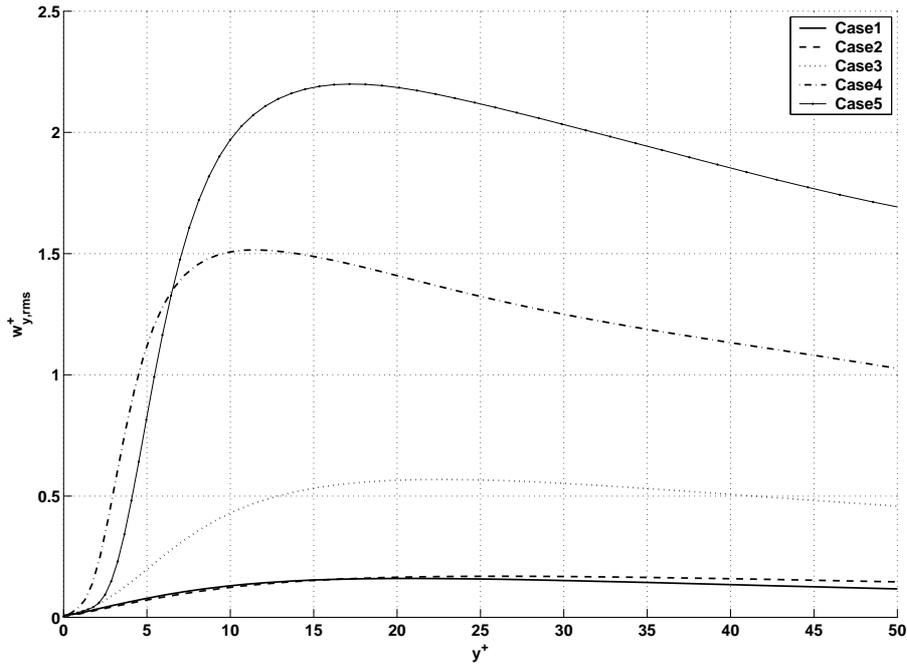


FIG. 6.39 – Profils de fluctuations r.m.s de vorticité normale normalisées par $\frac{u_\tau^2}{\nu_{g,s}}$.

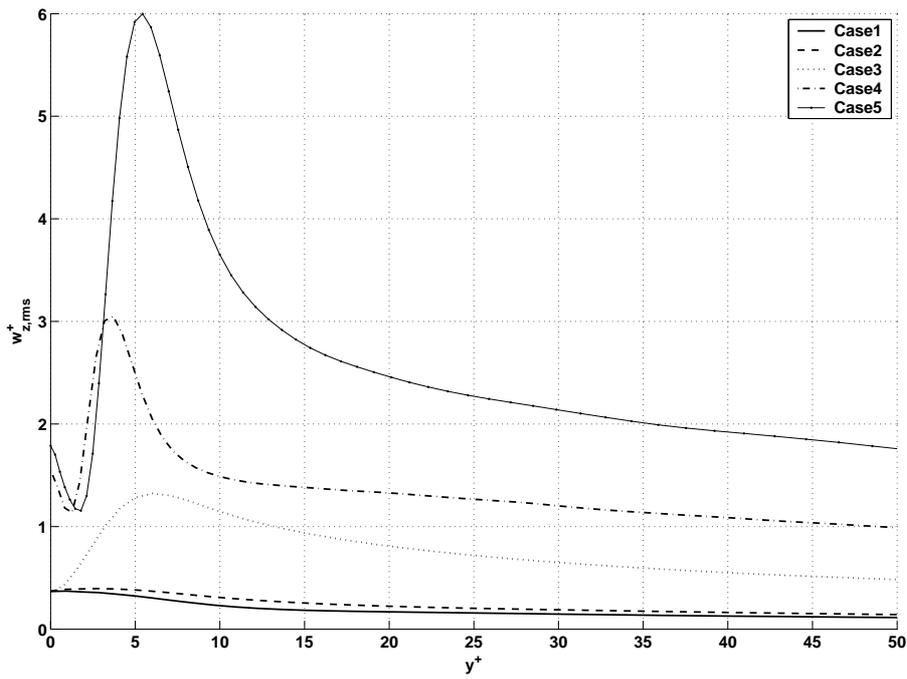


FIG. 6.40 – Profils de fluctuations r.m.s de vorticité transversale normalisées par $\frac{u_\tau^2}{\nu_{g,s}}$.

En raison des termes de fluctuations de densité qui deviennent non négligeables, il serait assez fastidieux et délicat de présenter et d'analyser les différents termes de l'équation de l'énergie cinétique turbulente. En revanche, au regard de ce qui a été montré sur la contrainte de cisaillement, on peut affirmer qu'il ne faut pas utiliser sa valeur à la paroi pour modéliser la production d'énergie cinétique turbulente dans la maille paroi d'un code de calcul de type Reynolds-Average Navier-Stokes (RANS). Comme par ailleurs, il a été montré que les niveaux des fluctuations de vitesse, bien que souvent quantitativement plus

élevés, sont généralement du même ordre de grandeur que dans un écoulement isotherme, la modélisation la plus adéquate de l'énergie cinétique turbulente dans la maille paroi d'un code RANS dans laquelle se trouve un film liquide consiste à utiliser la même modélisation de la production et de la dissipation de l'énergie cinétique turbulente et la même contrainte de cisaillement que pour un écoulement isotherme, en l'absence d'informations plus détaillées. C'est la modélisation que nous avons utilisée dans le code de calcul IFP-C3D dans lequel a été implanté un nouveau modèle d'évaporation de film liquide basé sur les lois de paroi développées dans ce chapitre et qui sera présenté au chapitre suivant. Pour terminer cette parenthèse, il convient de préciser que la contrainte de cisaillement calculée pour un écoulement isotherme ne doit être utilisée que dans le terme de production de la turbulence et non pas dans l'équation de la quantité de mouvement moyenne.

6.6.4 Analyse de la corrélation des fluctuations de vortacité avec la vitesse de Stephan

Dans le but de mesurer la dépendance entre le débit de masse évaporé et la vortacité transversale W_z , un facteur de corrélation Fvw_z entre la vitesse normale et la vortacité transversale est défini de la façon suivante :

$$Fvw_z = \frac{\overline{v' \cdot W'_z}}{\sqrt{\overline{v'^2} \cdot \overline{W'_z{}^2}}} \quad (6.24)$$

La figure 6.41 montre une forte corrélation entre le débit de masse évaporé et la vortacité transversale pour les cas avec faible évaporation (cas 1 et 2) puisque le facteur Fvw_z est presque égal à 1 à la surface du film liquide. Par contre, on constate également que le facteur de corrélation Fvw_z diminue lorsque le débit évaporé augmente (cas 3) pour devenir négatif dans les cas à forte évaporation (cas 4 et 5). La comparaison entre un exemple de champ instantané de vortacité transversale et de vitesse normale à la surface du film liquide situé en bas du domaine pour le cas 2, donnés respectivement par les figures 6.42 et 6.43, confirme la forte corrélation pour les cas à faible évaporation. Une comparaison identique effectuée pour le cas 4 grâce aux figures 6.44 et 6.45 ne montre aucun lien entre la vitesse de Stephan et la vortacité transversale. Les valeurs négatives du facteur de corrélation Fvw_z à la surface du film liquide peuvent éventuellement être expliquées par le fait que la vortacité transversale est parfois négative pour les fortes évaporations comme on le voit sur la figure 6.42 alors que cela ne se produit jamais pour les cas avec une évaporation faible à moyenne (cases 1, 2 et 3). Tout cela signifie finalement que les champs de gradient de fraction massique de fuel ne sont pas corrélés avec les champs de gradient de vitesse à la surface du film sauf lorsque l'évaporation est faible. En effet, la vitesse de Stephan est proportionnelle au gradient de fraction massique de fuel à l'interface liquide-gaz.

Pour terminer cette étude, un exemple de champ tridimensionnel de fraction massique de fuel sur lequel on voit également la vitesse de Stephan est montré sur la figure 6.46 afin que l'on puisse se rendre compte des disparités spatiales d'évaporation causées par la turbulence. Les figures 6.43 et 6.45 montrent également des exemples du niveau des fluctuations spatiales de l'évaporation. On constate que les disparités spatiales sont très importantes puisqu'il existe respectivement un facteur 3 et 4 entre la plus faible vitesse de Stephan et la plus forte respectivement dans l'exemple de la figure 6.43 et 6.45.

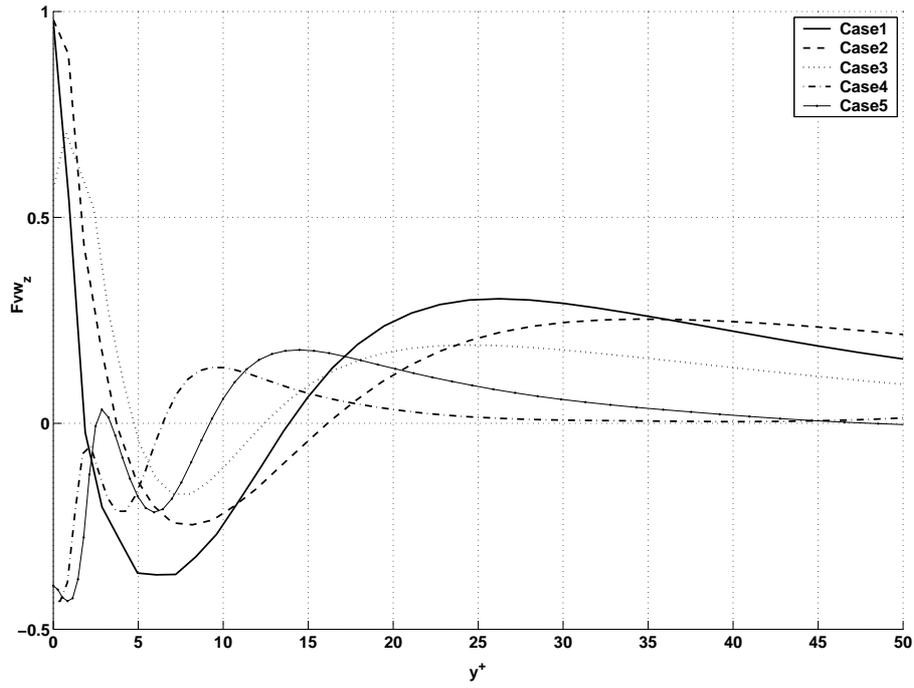


FIG. 6.41 – Facteur de corrélation entre la vitesse normale et la vorticité transversale $Fvw_z = \frac{\overline{v' \cdot W'_z}}{\sqrt{\overline{v'^2} \cdot \overline{W_z'^2}}}$.

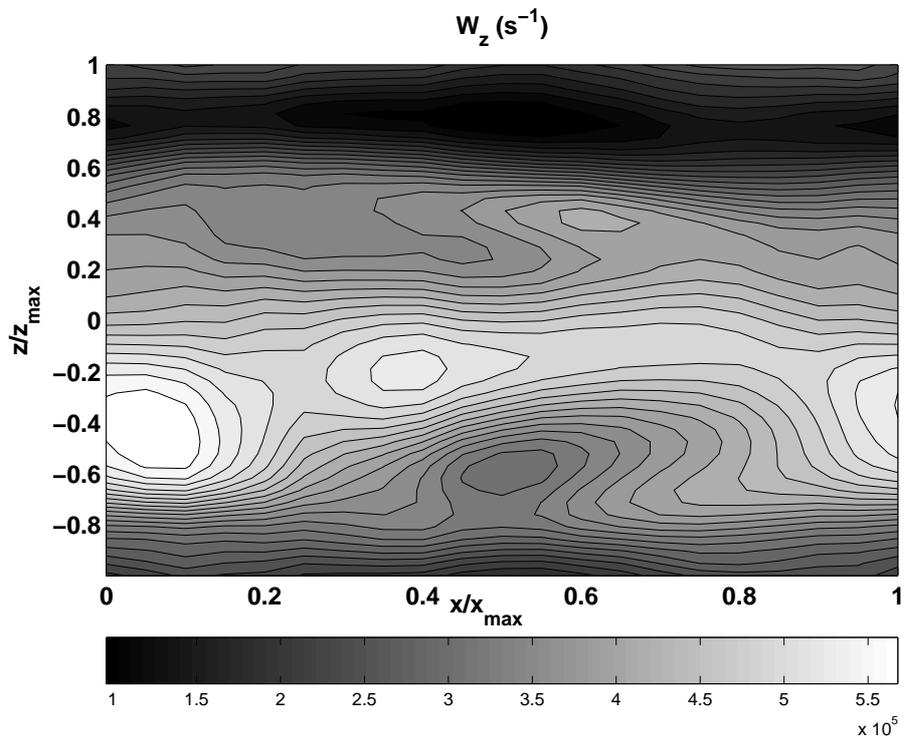


FIG. 6.42 – Exemple de champ instantané de vorticité transversale à la surface du film liquide situé en bas du domaine pour le cas 2.

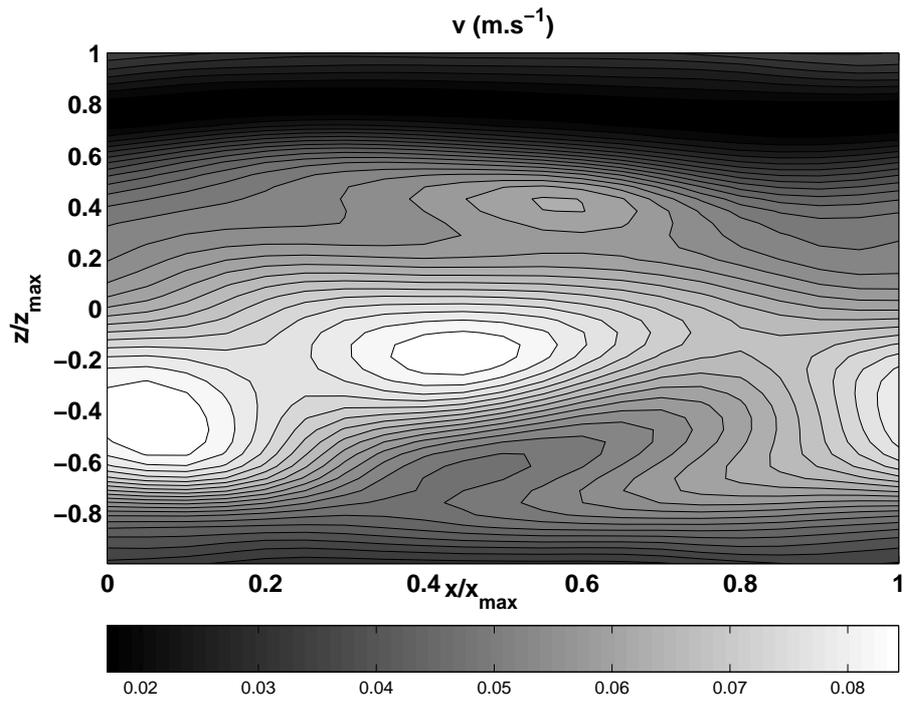


FIG. 6.43 – Exemple de champ instantané de vitesse normale à la surface du film liquide (vitesse de Stephan) situé en bas du domaine pour le cas 2.

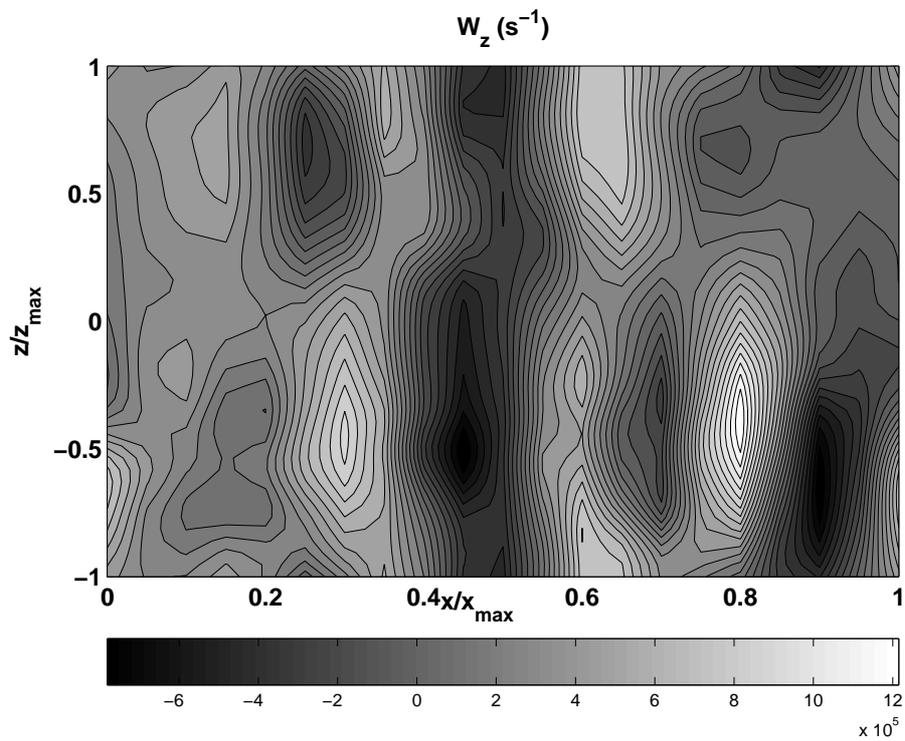


FIG. 6.44 – Exemple de champ instantané de vorticité transversale à la surface du film liquide situé en bas du domaine pour le cas 4.

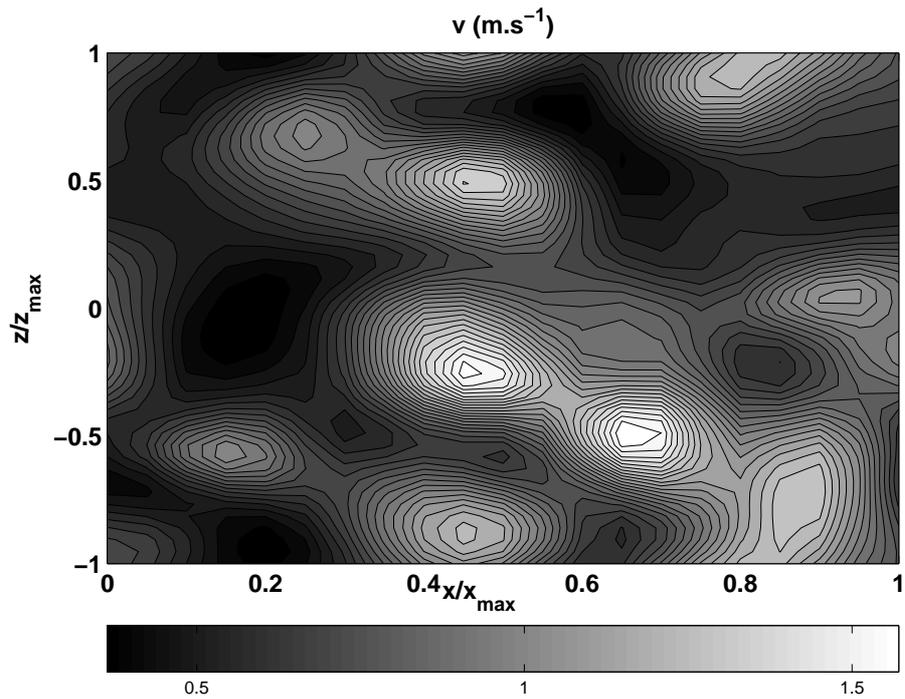


FIG. 6.45 – Exemple de champ instantané de vitesse normale à la surface du film liquide (vitesse de Stephan) situé en bas du domaine pour le cas 4.

Vitesse de Stephan engendree par l'evaporation

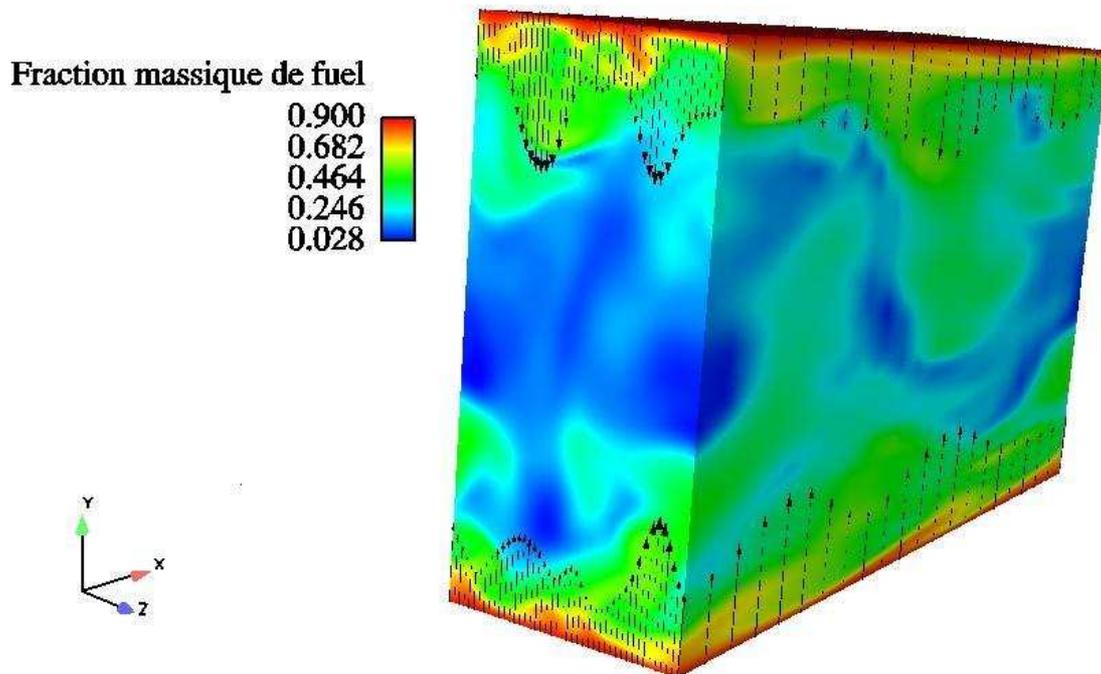


FIG. 6.46 – Exemple de champ instantané tridimensionnel de fraction massique de fuel sur lequel on voit également la vitesse de Stephan pour le cas 4.

6.7 Développement de lois de paroi pour l'évaporation d'un film liquide

6.7.1 Présentation de la construction analytique de lois de paroi

Le développement de lois de paroi consiste à résoudre analytiquement les équations de la couche limite présente à la surface d'une paroi ou d'un film liquide. On suppose l'existence de deux zones distinctes dans la couche limite (figure 6.47) :

- une zone laminaire au contact du film liquide ou de la paroi portant le nom de sous-couche visqueuse dans laquelle la viscosité turbulente ν_t est négligeable devant la viscosité laminaire du gaz ν_g . Cette zone s'étale de $y = 0$ à $y = y_{lt}$.
- une zone pleinement turbulente au contact de la zone externe portant le nom de sous-couche inertielle turbulente dans laquelle la viscosité laminaire du gaz ν_g est négligeable devant la viscosité turbulente ν_t . Cette zone s'étale de $y = y_{lt}$ jusqu'à la zone externe.

La zone tampon entre les zones pleinement turbulente et pleinement laminaire est occultée. Ainsi, les constantes d'intégration de la zone turbulente sont déduites du raccordement direct entre sous-couche visqueuse et sous-couche inertielle.

Dans la suite de nos développements, on note :

- u la vitesse tangentielle au film liquide
- v_s la vitesse de Stephan ou vitesse d'évaporation
- y_{lt} la distance entre la surface du liquide et la transition laminaire-turbulent

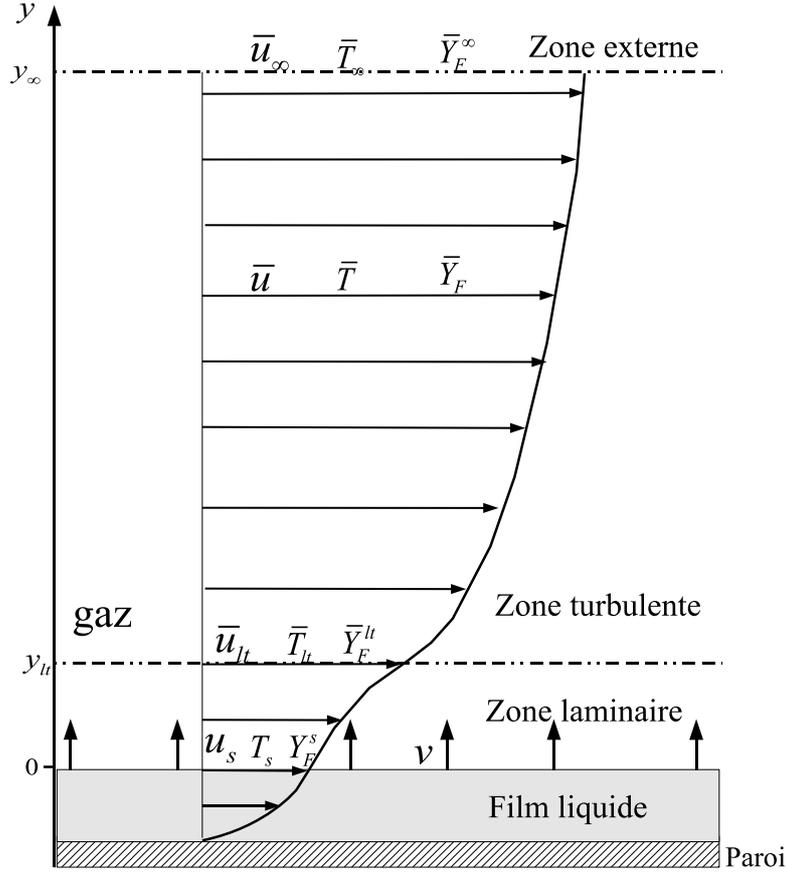


FIG. 6.47 – Structure de la couche limite en présence d'un film liquide.

6.7.2 Equations de la phase gazeuse

Les équations moyennées gouvernant la phase gazeuse sont :

- l'équation de conservation de la masse du fuel :

$$\frac{\partial \rho_g \bar{Y}_F}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho_g \bar{Y}_F \vec{u}) = \nabla [\rho_g (D_F + D_t) \nabla (\bar{Y}_F)] \quad (6.25)$$

où D_F et D_t représentent respectivement le coefficient de diffusion laminaire et turbulent du fuel.

- l'équation de conservation de la masse du mélange gazeux :

$$\frac{\partial \rho_g}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho_g \vec{u}) = 0 \quad (6.26)$$

- l'équation de conservation de la quantité de mouvement du gaz :

$$\frac{\partial \rho_g \vec{u}}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho_g \vec{u} \vec{u}) = -\nabla \bar{p} + \nabla \cdot \sigma + \rho_g \vec{g} \quad (6.27)$$

où σ représente le tenseur de contrainte, et \vec{g} l'accélération de la pesanteur.

– l'équation de conservation de l'enthalpie \bar{H} du gaz :

$$\frac{\partial \rho_g \bar{H}}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho_g \bar{H} \vec{u}) = \vec{u} \cdot \nabla \bar{p} + \frac{\partial \bar{p}}{\partial t} - \nabla \cdot \vec{J} \quad (6.28)$$

où \vec{J} représente le vecteur flux de chaleur.

6.7.3 Hypothèses de résolution

Pour le développement de lois de paroi, on utilise les hypothèses classiques formulées par les auteurs du code KIVA-II [5] :

- l'écoulement du gaz est quasi-stationnaire, d'où $\frac{\partial}{\partial t} = 0$,
- les gradients parallèles à la surface du film sont nuls, d'où $\frac{\partial}{\partial x} = 0$ et $\frac{\partial}{\partial z} = 0$,
- tous les gradients de pression sont négligeables,
- les forces de volumes sont négligeables,
- il n'y a pas de réactions chimiques dans le gaz ou à la surface du film,
- le gaz est incompressible.

L'hypothèse d'incompressibilité du gaz n'est absolument pas justifiée dans le cas des films liquides puisque de forts gradients thermiques et de fractions massiques existent à la surface d'un film de carburant en évaporation. On conserve néanmoins cette hypothèse dans la première partie du développement des lois de paroi afin de pouvoir intégrer analytiquement les équations 6.25 à 6.28. La prise en compte de la compressibilité du gaz s'effectuera par la suite en appliquant la formulation LnKc [6] aux lois de paroi développées.

6.7.4 Conservation de la masse du gaz

En utilisant les hypothèses de résolution formulées précédemment, l'équation de conservation de la masse du gaz 6.26 devient :

$$\frac{\partial \rho_g \bar{v}}{\partial y} = 0 \quad (6.29)$$

Ainsi, le débit surfacique de masse évaporé $\dot{M} = \rho_g \bar{v}$ est constant dans la direction normale au film liquide dans la couche limite. Comme par ailleurs, on a supposé dans un premier temps, que le gaz est incompressible, la vitesse normale au film \bar{v} est également constante selon y et égale à la vitesse de Stephan \bar{v}_s .

6.7.5 Conservation de la quantité de mouvement moyenne

Toujours en utilisant les hypothèses ci-dessus, l'équation de conservation de la quantité de mouvement moyenne 6.27 s'écrit :

$$\frac{\partial \bar{u} \cdot \bar{v}}{\partial y} = \frac{\partial}{\partial y} \left[(\nu_g + \nu_t) \frac{\partial \bar{u}}{\partial y} \right] \quad (6.30)$$

où ν_t désigne le viscosité turbulente que l'on modélise par la théorie de longueur de mélange de Prandtl :

$$\nu_t = (ky)^2 \frac{\partial \bar{u}}{\partial y} \quad (6.31)$$

où k désigne la constante de Karmann.

Après une première intégration, on obtient :

$$\bar{u} \cdot \bar{v}_s = \nu_g \frac{\partial \bar{u}}{\partial y} + \left(ky \frac{\partial \bar{u}}{\partial y} \right)^2 + K_1 \quad (6.32)$$

où K_1 désigne une constante d'intégration déterminée en utilisant les conditions aux limites pour la vitesse tangentielle du gaz à la surface du film $\bar{u}(y=0) = u_s$ et pour son gradient normal $\nu_g \left. \frac{\partial \bar{u}}{\partial y} \right|_s = \frac{\tau_{g,s}}{\rho_{g,s}} = u_\tau^2$.

L'équation 6.32 écrite sous forme adimensionnelle en unités pariétales devient donc :

$$1 + u^+ v_s^+ = \left[1 + k^2 y^{+2} \frac{\partial u^+}{\partial y^+} \right] \frac{\partial u^+}{\partial y^+} \quad (6.33)$$

A - Sous-couche inertielle turbulente

Dans la sous-couche inertielle, la viscosité laminaire ν_g du gaz est négligeable devant la viscosité turbulente ν_t . L'équation 6.33 se réduit donc à :

$$1 + u^+ v_s^+ = k^2 y^{+2} \left(\frac{\partial u^+}{\partial y^+} \right)^2 \quad (6.34)$$

L'équation 6.34 se reformule selon :

$$\sqrt{1 + u^+ v_s^+} = ky^+ \frac{\partial u^+}{\partial y^+} \quad (6.35)$$

Une nouvelle intégration dans la sous-couche inertielle, i.e de y_{lt}^+ à y^+ , conduit alors à l'équation suivante :

$$\int_{u_{lt}^+}^{u^+} \frac{du^+}{\sqrt{1 + u^+ v_s^+}} = \int_{y_{lt}^+}^{y^+} \frac{dy^+}{ky^+} \quad (6.36)$$

où u_{lt}^+ désigne la vitesse transversale adimensionnelle du gaz à la transition laminaire-turbulent.

On obtient donc :

$$\frac{2}{v_s^+} \left[\sqrt{1 + u^+ v_s^+} - \sqrt{1 + u_{lt}^+ v_s^+} \right] = \frac{1}{k} \ln \frac{y^+}{y_{lt}^+} \quad (6.37)$$

B - Sous-couche laminaire

Dans la sous-couche laminaire, la viscosité turbulente ν_t est négligeable devant la viscosité laminaire du gaz ν_g . L'équation 6.33 se réduit donc à :

$$1 + u^+ v_s^+ = \frac{\partial u^+}{\partial y^+} \quad (6.38)$$

Ainsi, après intégration, on obtient la vitesse transversale moyenne adimensionnelle u^+ dans la sous-couche laminaire :

$$u^+ = K_2 e^{v_s^+ y^+} - \frac{1}{v_s^+} \quad (6.39)$$

où K_2 est une constante d'intégration.

Par ailleurs, à la surface du film liquide, la vitesse transversale moyenne adimensionnelle u_s^+ est nulle. On rappelle en effet que $\bar{u}^+ = \frac{\bar{u} - u_s}{u_\tau}$ (voir équation 6.10). Par conséquent, dans la sous-couche laminaire, on devrait théoriquement avoir :

$$u^+ = \frac{1}{v_s^+} \left[e^{v_s^+ y^+} - 1 \right] \quad (6.40)$$

ou encore :

$$\frac{2}{v_s^+} \sqrt{1 + u^+ v_s^+} = \frac{2}{v_s^+} e^{\frac{v_s^+ y^+}{2}} \quad (6.41)$$

Cependant, comme l'analyse précédente des différents termes de l'équation de la quantité de mouvement nous l'a montré, la sous-couche laminaire se rétrécit en présence d'évaporation alors que le zone tampon s'élargit. Cela est d'autant plus vrai que le débit évaporé augmente. C'est pourquoi, la linéarisation de l'équation 6.41 fournit de biens meilleurs résultats comme nous le montrerons ultérieurement en comparant les lois de paroi avec les DNS. Ainsi, on remplace l'équation 6.41 par l'équation suivante dans laquelle apparaît la nouvelle variable effective U_{eff}^+ pour la loi de paroi dynamique :

$$U_{eff}^+ = \frac{2}{v_s^+} \left[\sqrt{1 + u^+ v_s^+} - 1 \right] = y^+ \quad (6.42)$$

C - Bilan

On utilise alors l'expression de la vitesse transversale moyenne adimensionnelle à la transition laminaire-turbulent u_{lt}^+ donnée par l'équation 6.42 dans l'équation 6.37 afin d'obtenir l'expression de la nouvelle variable effective U_{eff}^+ dans la sous-couche inertielle turbulente. L'équation 6.42 fournit l'expression de U_{eff}^+ dans la sous-couche laminaire. On obtient donc la loi de paroi dynamique suivante avant de tenir compte de la compressibilité du gaz :

$$\begin{cases} y^+ \leq y_{lt}^+ : U_{eff}^+ = \frac{2}{v_s^+} \left[\sqrt{1 + u^+ v_s^+} - 1 \right] = y^+ \\ y^+ \geq y_{lt}^+ : U_{eff}^+ = \frac{2}{v_s^+} \left[\sqrt{1 + u^+ v_s^+} - 1 \right] = y_{lt}^+ + \frac{1}{k} \ln \frac{y^+}{y_{lt}^+} \end{cases} \quad (6.43)$$

6.7.6 Conservation de la masse de fuel

En utilisant les hypothèses citées plus haut, l'équation de conservation de la masse de fuel moyenne 6.25 s'écrit :

$$\frac{\partial \bar{v} \cdot \bar{Y}_F}{\partial y} = \frac{\partial}{\partial y} \left[(D_F + D_t) \frac{\partial \bar{Y}_F}{\partial y} \right] \quad (6.44)$$

où D_t et D_F peuvent respectivement s'exprimer à l'aide du nombre de Schmidt turbulent du gaz $D_t = \frac{\nu_t}{S_{ct}}$ et du nombre de Schmidt laminaire du fuel gazeux $D_F = \frac{\nu_g}{S_{cl}}$. Il convient de remarquer dès maintenant que le nombre de Schmidt laminaire du fuel gazeux S_{cl} utilisé pour le développement des lois de paroi diffère du nombre de Schmidt standard du fuel $S_{c,F}$. En effet, l'équation 6.25 est basée sur un modèle de diffusion simple utilisant les fractions massiques des espèces contrairement au modèle de diffusion complexe utilisant les fractions molaires des espèces (comme c'est le cas dans nos DNS). Or, les nombres de Schmidt standard sont définis en accord avec les modèles de diffusion complexe et ne sont donc pas adaptés pour fournir des résultats corrects avec un modèle de diffusion simple. C'est pourquoi, on utilise un nombre de Schmidt laminaire du fuel gazeux corrigé S_{cl} afin de tenir compte de la vraie diffusion complexe dans un modèle de diffusion simple. Nous développerons l'expression de S_{cl} ultérieurement lorsque cela deviendra nécessaire.

Une première intégration conduit alors à :

$$\left[\frac{\nu_g}{S_{cl}} + \frac{\nu_t}{S_{ct}} \right] \frac{\partial \bar{Y}_F}{\partial y} - \bar{v}_s \cdot \bar{Y}_F = \left[\frac{\nu_g}{S_{cl}} + \frac{k^2 y^2}{S_{ct}} \frac{\partial \bar{u}}{\partial y} \right] \frac{\partial \bar{Y}_F}{\partial y} - \bar{v}_s \cdot \bar{Y}_F = K_1 \quad (6.45)$$

où K_1 désigne une constante d'intégration que l'on détermine grâce à la conservation de la masse à l'interface liquide-gaz (conservation des flux) $\bar{v}_s = \bar{v}_s \cdot Y_F^s - \frac{\nu_g}{S_{cl}} \left(\frac{\partial \bar{Y}_F}{\partial y} \right)_s$. On en déduit donc que $K_1 = -\bar{v}_s$.

L'équation 6.45 écrite sous forme adimensionnelle en unités pariétales devient donc :

$$[\bar{Y}_F - 1] v_s^+ = \left[\frac{1}{S_{cl}} + \frac{k^2 y^{+2}}{S_{ct}} \frac{\partial u^+}{\partial y^+} \right] \frac{\partial \bar{Y}_F}{\partial y^+} \quad (6.46)$$

A - Sous-couche inertielle turbulente

Dans la sous-couche inertielle, la diffusion laminaire D_F du fuel est négligeable devant la diffusion turbulente D_t . L'équation 6.46 se réduit donc à :

$$[\bar{Y}_F - 1] v_s^+ = \frac{k^2 y^{+2}}{S_{ct}} \frac{\partial u^+}{\partial y^+} \frac{\partial \bar{Y}_F}{\partial y^+} \quad (6.47)$$

Par ailleurs, d'après l'équation 6.43 donnant le profil de vitesse transversale moyenne adimensionnelle u^+ , dans la zone turbulente on a :

$$\frac{\partial u^+}{\partial y^+} = \frac{v_s^+}{2k^2 y^+} \ln \frac{y^+}{y_{lt}^+} + \frac{1}{ky^+} \left(1 + \frac{v_s^+ y_{lt}^+}{2} \right) \quad (6.48)$$

Ainsi, en insérant la dérivée de la vitesse u^+ dans l'équation 6.47, on obtient :

$$[\bar{Y}_F - 1] v_s^+ = \left[\frac{v_s^+ y^+}{2S_{ct}} \ln \frac{y^+}{y_{lt}^+} + \frac{ky^+}{S_{ct}} \left(1 + \frac{v_s^+ y_{lt}^+}{2} \right) \right] \frac{\partial \bar{Y}_F}{\partial y^+} \quad (6.49)$$

L'intégration de l'équation 6.49 dans la zone turbulente conduit alors à l'expression suivante :

$$I_1 = \int_{\bar{Y}_F^{lt}}^{\bar{Y}_F} \frac{d\bar{Y}_F}{[\bar{Y}_F - 1] v_s^+} = \int_{y_{lt}^+}^{y^+} \frac{dy^+}{\frac{y^+}{S_{ct}} \left[\frac{v_s^+}{2} \ln y^+ + k \left(1 + \frac{v_s^+ y_{lt}^+}{2} \right) - \frac{v_s^+}{2} \ln y_{lt}^+ \right]} = I_2 \quad (6.50)$$

Or,

$$I_1 = \frac{1}{v_s^+} \ln \left[\frac{\bar{Y}_F - 1}{\bar{Y}_F^{lt} - 1} \right] \quad (6.51)$$

Et après avoir effectué le changement de variable $\alpha = \ln y^+$, on obtient :

$$I_2 = \frac{2S_{ct}}{v_s^+} \ln \left[\frac{\frac{v_s^+}{2S_{ct}} \ln \frac{y^+}{y_{lt}^+} + \frac{k}{S_{ct}} \left(1 + \frac{v_s^+ y_{lt}^+}{2} \right)}{\frac{k}{S_{ct}} \left(1 + \frac{v_s^+ y_{lt}^+}{2} \right)} \right] = \frac{2S_{ct}}{v_s^+} \ln \left[1 + \frac{v_s^+ \ln \frac{y^+}{y_{lt}^+}}{2k \left(1 + \frac{v_s^+ y_{lt}^+}{2} \right)} \right] \quad (6.52)$$

Par conséquent, puisque $I_1 = I_2$, on obtient :

$$\left[\frac{\bar{Y}_F - 1}{\bar{Y}_F^{lt} - 1} \right]^{1/2S_{ct}} = 1 + \frac{v_s^+}{2k \left(1 + \frac{v_s^+ y_{lt}^+}{2} \right)} \ln \frac{y^+}{y_{lt}^+} \quad (6.53)$$

B - Sous-couche laminaire

Dans la sous-couche laminaire, la diffusion turbulente D_t est négligeable devant la diffusion laminaire D_F du fuel. L'équation 6.46 se réduit donc à :

$$[\bar{Y}_F - 1] v_s^+ = \frac{1}{S_{cl}} \frac{\partial \bar{Y}_F}{\partial y^+} \quad (6.54)$$

Ainsi, après intégration et en utilisant la condition limite à la surface du film liquide $\bar{Y}_F(0) = \bar{Y}_F^s$, on obtient la fraction massique de fuel moyenne \bar{Y}_F dans la sous-couche laminaire :

$$\left[\frac{\bar{Y}_F - 1}{\bar{Y}_F^s - 1} \right] = e^{v_s^+ y^+ S_{cl}} \quad (6.55)$$

ou encore :

$$\left[\frac{\bar{Y}_F - 1}{\bar{Y}_F^s - 1} \right]^{1/2S_{cl}} = e^{\frac{v_s^+ y^+ S_{cl}}{2S_{cl}}} \quad (6.56)$$

Cependant, comme pour la quantité de mouvement, nous montrerons ultérieurement qu'une linéarisation de l'équation 6.56 fournit une loi de paroi massique en bien meilleur accord avec les DNS qu'en la conservant telle quelle. Ainsi, on remplace l'équation 6.56 par l'expression suivante dans laquelle apparaît la nouvelle variable effective $Y_{F\,eff}^+$ pour la loi de paroi massique :

$$Y_{F\,eff}^+ = \frac{2S_{ct}}{v_s^+} \left[\left(\frac{\bar{Y}_F - 1}{Y_F^s - 1} \right)^{1/2S_{ct}} - 1 \right] = S_{cl} y^+ \quad (6.57)$$

C - Bilan

En utilisant $Y_{F\,eff}^+$ défini à l'équation 6.57, on obtient la loi de paroi massique suivante :

$$\begin{cases} y^+ \leq y_{lt}^+ : Y_{F\,eff}^+ = \frac{2S_{ct}}{v_s^+} \left[\left(\frac{\bar{Y}_F - 1}{Y_F^s - 1} \right)^{1/2S_{ct}} - 1 \right] = S_{cl} y^+ \\ y^+ \geq y_{lt}^+ : Y_{F\,eff}^+ = \frac{2S_{ct}}{v_s^+} \left[\left(\frac{\bar{Y}_F - 1}{Y_F^s - 1} \right)^{1/2S_{ct}} - 1 \right] = S_{cl} y_{lt}^+ + \frac{S_{ct}}{k} \left[\frac{1 + \frac{v_s^+ y_{lt}^+ S_{cl}}{2}}{1 + \frac{v_s^+ y_{lt}^+}{2}} \right] \ln \frac{y^+}{y_{lt}^+} \end{cases} \quad (6.58)$$

6.7.7 Conservation de l'enthalpie moyenne

En utilisant les hypothèses citées plus haut, l'équation de conservation de l'enthalpie moyenne 6.28 s'écrit :

$$\frac{\partial \bar{v} \cdot \bar{T}}{\partial y} = \frac{\partial}{\partial y} \left[(\alpha_g + \alpha_t) \frac{\partial \bar{T}}{\partial y} \right] \quad (6.59)$$

où α_g et α_t désignent respectivement le coefficient de diffusion thermique laminaire et turbulent dans le gaz, et peuvent respectivement s'exprimer à l'aide du nombre de Prandtl laminaire $\alpha_g = \frac{\lambda_g}{\rho_g C_p} = \frac{\nu_g}{P_{rl}}$ et du nombre de Prandtl turbulent $\alpha_t = \frac{\nu_t}{P_{rt}}$. λ_g représente la conductivité thermique du gaz.

Une première intégration conduit alors à :

$$\left[\frac{\nu_g}{P_{rl}} + \frac{\nu_t}{P_{rt}} \right] \frac{\partial \bar{T}}{\partial y} - \bar{v}_s \cdot \bar{T} = \left[\frac{\nu_g}{P_{rl}} + \frac{k^2 y^2}{P_{rt}} \frac{\partial \bar{u}}{\partial y} \right] \frac{\partial \bar{T}}{\partial y} - \bar{v}_s \cdot \bar{T} = K_1 \quad (6.60)$$

où K_1 désigne une constante d'intégration déterminée en utilisant les conditions au limites sur la température moyenne à l'interface liquide-gaz $\bar{T}(y = 0) = T_s$ et son gradient $\left. \frac{\partial \bar{T}}{\partial y} \right|_s = -\frac{\varphi_{g,s}}{\lambda_g}$. On en déduit donc que $K_1 = -\bar{v}_s \cdot T_s - \frac{\varphi_{g,s}}{\rho_{g,s} C_p}$.

L'équation 6.60 écrite sous forme adimensionnelle en unités pariétales devient donc :

$$1 + v_s^+ T^+ = \left[\frac{1}{P_{rl}} + \frac{k^2 y^{+2}}{P_{rt}} \frac{\partial u^+}{\partial y^+} \right] \frac{\partial T^+}{\partial y^+} \quad (6.61)$$

A - Sous-couche inertielle turbulente

Dans la sous-couche inertielle, la diffusion thermique laminaire du gaz α_g est négligeable devant la diffusion thermique turbulente α_t . L'équation 6.61 se réduit donc à :

$$1 + v_s^+ T^+ = \frac{k^2 y^{+2}}{P_{rt}} \frac{\partial u^+}{\partial y^+} \frac{\partial T^+}{\partial y^+} \quad (6.62)$$

Par analogie avec l'équation de conservation de la masse de fuel moyenne, l'intégration de l'équation 6.62 conduit à :

$$I_3 = \int_{T_{lt}^+}^{T^+} \frac{dT^+}{1 + v_s^+ T^+} = \int_{y_{lt}^+}^{y^+} \frac{dy^+}{\frac{y^+}{P_{rt}} \left[\frac{v_s^+}{2} \ln y^+ + k \left(1 + \frac{v_s^+ y_{lt}^+}{2} \right) - \frac{v_s^+}{2} \ln y_{lt}^+ \right]} = I_4 \quad (6.63)$$

Or,

$$I_3 = \frac{1}{v_s^+} \ln \left[\frac{1 + v_s^+ T^+}{1 + v_s^+ T_{lt}^+} \right] \quad (6.64)$$

Et après avoir effectué le changement de variable $\alpha = \ln y^+$,

$$I_4 = \frac{2P_{rt}}{v_s^+} \ln \left[1 + \frac{v_s^+ \ln \frac{y^+}{y_{lt}^+}}{2k \left(1 + \frac{v_s^+ y_{lt}^+}{2} \right)} \right] \quad (6.65)$$

Par conséquent, puisque $I_3 = I_4$, on obtient :

$$\left[\frac{1 + v_s^+ T^+}{1 + v_s^+ T_{lt}^+} \right]^{1/2P_{rt}} = 1 + \frac{v_s^+}{2k \left(1 + \frac{v_s^+ y_{lt}^+}{2} \right)} \ln \frac{y^+}{y_{lt}^+} \quad (6.66)$$

B - Sous-couche laminaire

Dans la sous-couche laminaire, la diffusion thermique turbulente α_t est négligeable devant la diffusion thermique laminaire du gaz α_g . L'équation 6.61 se réduit donc à :

$$1 + v_s^+ T^+ = \frac{1}{P_{rl}} \frac{\partial T^+}{\partial y^+} \quad (6.67)$$

Ainsi, après intégration et en utilisant la condition limite à la surface du film liquide $T^+(0) = 0$, on obtient la température moyenne adimensionnelle T^+ dans la sous-couche laminaire :

$$1 + v_s^+ T^+ = e^{v_s^+ y^+ P_{rl}} \quad (6.68)$$

ou encore :

$$\left[1 + v_s^+ T^+ \right]^{1/2P_{rl}} = e^{\frac{v_s^+ y^+ P_{rl}}{2}} \quad (6.69)$$

Cependant, comme pour la quantité de mouvement et la masse de fuel, nous montrerons ultérieurement qu'une linéarisation de l'équation 6.69 fournit une loi de paroi thermique en bien meilleur accord avec les DNS qu'en la conservant telle quelle. Ainsi, on remplace l'équation 6.69 par l'expression suivante dans laquelle apparaît la nouvelle variable effective T_{eff}^+ pour la loi de thermique :

$$T_{eff}^+ = \frac{2P_{rt}}{v_s^+} \left[(1 + T^+ v_s^+)^{1/2P_{rt}} - 1 \right] = P_{rl} y^+ \quad (6.70)$$

C - Bilan

En utilisant T_{eff}^+ défini à l'équation 6.70, on obtient la loi de paroi thermique suivante :

$$\begin{cases} y^+ \leq y_{lt}^+ : T_{eff}^+ = \frac{2P_{rt}}{v_s^+} \left[(1 + T^+ v_s^+)^{1/2P_{rt}} - 1 \right] = P_{rl} y^+ \\ y^+ \geq y_{lt}^+ : T_{eff}^+ = \frac{2P_{rt}}{v_s^+} \left[(1 + T^+ v_s^+)^{1/2P_{rt}} - 1 \right] = P_{rl} y_{lt}^+ + \frac{P_{rt}}{k} \left[\frac{1 + \frac{v_s^+ y_{lt}^+ P_{rl}}{2 P_{rt}}}{1 + \frac{v_s^+ y_{lt}^+}{2}} \right] \ln \frac{y^+}{y_{lt}^+} \end{cases} \quad (6.71)$$

6.7.8 Amélioration des lois de paroi grâce aux DNS

Dans les sections précédentes, nous avons établis analytiquement des lois de paroi associées aux nouvelles variables effectives U_{eff}^+ , T_{eff}^+ et $Y_{F,eff}^+$. Au cours de ce développement, nous avons fait apparaître les quatre paramètres suivants : le nombre de Schmidt turbulent S_{ct} , le nombre de Prandtl turbulent P_{rt} , la constante de Karmann k et la distance entre la surface du film et la transition laminaire-turbulent y_{lt} . Bien que ces paramètres soient habituellement des constantes connues, ce n'est pas le cas en évaporation comme nous le verrons lorsque l'on comparera les lois de paroi avec les DNS. C'est pourquoi, on introduit trois nouveaux paramètres C_u , C_T et C_Y qui dépendent du débit évaporé et des gradients de densité afin de remplacer k par $\frac{k}{C_u}$, P_{rt} par $C_T P_{rt}$ et S_{ct} par $C_Y S_{ct}$ où la constante de Karmann $k = 0.433$, le nombre de Prandtl $P_{rt} = 0.9$ et le nombre de Schmidt $S_{ct} = 0.9$ désignent désormais de vraies constantes [5]. Ainsi les variables effectives des précédentes sections s'écrivent maintenant :

$$U_{eff}^+ = \frac{2}{v_s^+} \left[\sqrt{1 + u^+ v_s^+} - 1 \right] \quad (6.72)$$

$$T_{eff}^+ = \frac{2C_T P_{rt}}{v_s^+} \left[(1 + T^+ v_s^+)^{1/2C_T P_{rt}} - 1 \right] \quad (6.73)$$

$$Y_{F,eff}^+ = \frac{2C_Y S_{ct}}{v_s^+} \left[\left(\frac{\bar{Y}_F - 1}{Y_F^s - 1} \right)^{1/2C_Y S_{ct}} - 1 \right] \quad (6.74)$$

Par ailleurs, les DNS nous montreront que la distance entre la surface du film liquide et la transition laminaire-turbulent est différente pour chacune des couches limites (dynamique, thermique et massique) et dépend de surcroît de la vitesse de Stephan adimensionnelle et des gradients de densité. C'est pourquoi on note désormais respectivement y_{lt} , $y_{lt,T}$ et $y_{lt,m}$ la distance de transition laminaire-turbulent dynamique, thermique et massique.

6.7.9 Profils de vitesse axiale, température et fraction massique de fuel moyenne exprimées avec les nouvelles variables effectives

Les figures 6.48, 6.49 et 6.50 montrent que les profils de vitesse axiale, température et fraction massique de fuel moyennes exprimées avec les nouvelles variables effectives sont presque linéaires dans la sous-couche visqueuse et logarithmiques dans la région pleinement turbulente. Par ailleurs, les différences de comportement entre les deux cas d'évaporation les plus éloignés (case 1 et 5) sont beaucoup plus faibles avec les variables effectives qu'avec les unités pariétales classiques. Les nouvelles variables développées constituent donc une bonne évolution, mais elles peuvent encore être améliorées puisqu'elles ne tiennent compte ni de la compressibilité du gaz ni des gradients de viscosité.

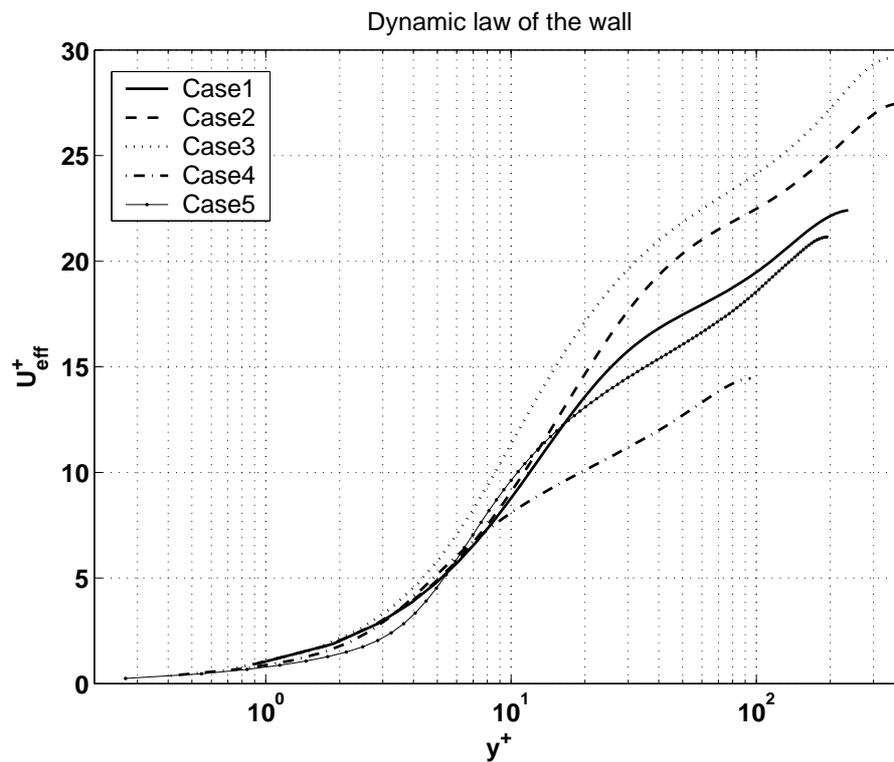


FIG. 6.48 – Vitesse axiale moyenne exprimée avec les nouvelles variables effectives ($\overline{U}_{eff}^+, y^+$).

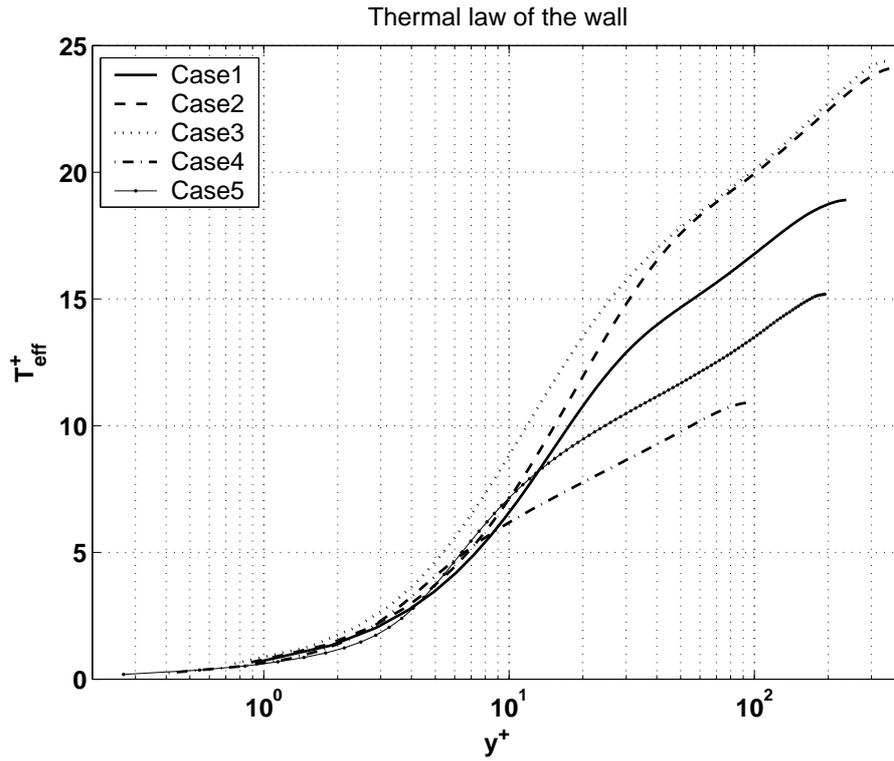


FIG. 6.49 – Température moyenne exprimée avec les nouvelles variables effectives $(\overline{T}_{eff}^+, y^+)$.

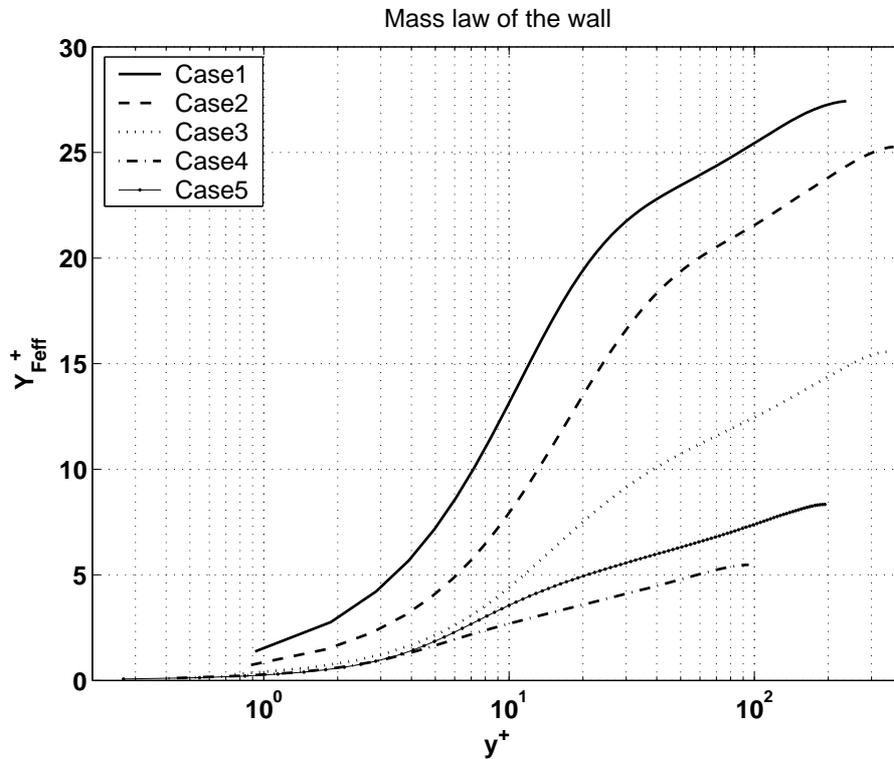


FIG. 6.50 – Fraction massique de fuel moyenne exprimée avec les nouvelles variables effectives $(\overline{Y}_{Feff}^+, y^+)$.

6.7.10 Prise en compte de la compressibilité : formulation en variables LnKc effectives

Afin de tenir compte de la compressibilité du gaz et des gradients de viscosité, les variables effectives définies par les expressions 6.72, 6.73 et 6.74 sont associées à la formulation du modèle LnKc [6] afin d'obtenir les variables LnKc effectives suivantes :

$$d\eta^+ = \frac{\nu_{g,s}}{\nu_g} dy^+, \quad d\phi_{eff}^+ = \frac{\rho_g}{\rho_{g,s}} dU_{eff}^+, \quad d\theta_{eff}^+ = \frac{\rho_g}{\rho_{g,s}} dT_{eff}^+, \quad d\zeta_{eff}^+ = \frac{\rho_g}{\rho_{g,s}} dY_{F,eff}^+ \quad (6.75)$$

Les lois de paroi finales sont alors obtenues en remplaçant les variables y^+ , U_{eff}^+ , T_{eff}^+ et $Y_{F,eff}^+$ par les variables η^+ , ϕ_{eff}^+ , θ_{eff}^+ et ζ_{eff}^+ dans les solutions des équations moyennées 6.43, 6.58 et 6.71 obtenues dans les sections précédentes. Ces lois de paroi se résument donc comme suit :

$$\text{Loi dynamique : } \begin{cases} \eta^+ \leq \eta_{lt}^+ : \phi_{eff}^+ = \eta^+ \\ \eta^+ \geq \eta_{lt}^+ : \phi_{eff}^+ = \eta_{lt}^+ + \frac{C_u}{k} \ln \frac{\eta^+}{\eta_{lt}^+} \end{cases} \quad (6.76)$$

$$\text{Loi thermique : } \begin{cases} \eta^+ \leq \eta_{lt,T}^+ : \theta_{eff}^+ = Pr_l \eta^+ \\ \eta^+ \geq \eta_{lt,T}^+ : \theta_{eff}^+ = Pr_l \eta_{lt,T}^+ + \frac{C_u C_T Pr_l}{k} \left[\frac{1 + \frac{v_s^+ \eta_{lt,T}^+ Pr_l}{2 C_T}}{1 + \frac{v_s^+ \eta_{lt,T}^+}{2}} \right] \ln \frac{\eta^+}{\eta_{lt,T}^+} \end{cases} \quad (6.77)$$

$$\text{Loi massique : } \begin{cases} \eta^+ \leq \eta_{lt,m}^+ : \zeta_{eff}^+ = S_{cl} \eta^+ \\ \eta^+ \geq \eta_{lt,m}^+ : \zeta_{eff}^+ = S_{cl,lt} \eta_{lt,m}^+ + \frac{C_u C_Y S_{ct}}{k} \left[\frac{1 + \frac{v_s^+ \eta_{lt,m}^+ S_{cl,lt}}{2 C_Y}}{1 + \frac{v_s^+ \eta_{lt,m}^+}{2}} \right] \ln \frac{\eta^+}{\eta_{lt,m}^+} \end{cases} \quad (6.78)$$

Comme cela a déjà été évoqué lors de la section 6.7.6, le nombre de Schmidt laminaire du fuel gazeux dans un mélange air-fuel S_{cl} utilisé dans les lois de paroi est corrigé par rapport au nombre de Schmidt standard du fuel $S_{c,F}$ afin de tenir compte de la diffusion complexe des espèces alors que l'on utilise un modèle de diffusion simple. L'expression de S_{cl} est obtenue en identifiant les équations donnant le débit de masse évaporé \dot{M} en diffusion complexe (Eq. 6.8) et en diffusion simple (Eq. 6.79).

$$\dot{M} = \frac{\rho_{g,s} \nu_{g,s}}{(1 - Y_F^s) S_{cl}} \left[\frac{\partial \bar{Y}_F}{\partial y} \right]_s \quad (6.79)$$

On prolonge alors l'expression dans toute la sous-couche visqueuse afin d'obtenir l'équation de S_{cl} que l'on utilise jusqu'à la transition laminaire-turbulent de la couche limite massique :

$$S_{cl} = \frac{1}{W \left[\frac{1 - \bar{Y}_F}{S_{c,F}} + \frac{\bar{Y}_F W_{air}}{S_{c,N_2} W_F} \right]} \quad (6.80)$$

où, W , W_{air} and W_F désignent respectivement la masse molaire moyenne du mélange, de l'air et du fuel. $S_{cl,lt}$ est la valeur prise par S_{cl} à la transition laminaire-turbulent de la couche limite massique $\eta_{lt,m}^+$.

Finalement, on peut remarquer que dans la limite des faibles évaporations (i.e. v_s^+ petite) et des faibles gradients de densité et viscosité, les lois de paroi données par les équations 6.76 et 6.77 dégénèrent bien vers les lois de paroi classiques [36]. Quant à l'équation 6.78, elle n'existe pas sans évaporation.

6.7.11 Comparaison des nouvelles lois de paroi avec les DNS

Les figures 6.51, 6.52 et 6.53 montrent la comparaison entre les profils DNS et les lois de paroi décrites par les équations 6.43, 6.71 et 6.58 pour respectivement la vitesse axiale LnKc effective ϕ_{eff}^+ , la température LnKc effective θ_{eff}^+ et la fraction massique de fuel LnKc effective ζ_{eff}^+ . En dehors de la zone tampon de la couche limite, les nouvelles lois de paroi sont proches des résultats fournis par les DNS. Par ailleurs, l'hypothèse de linéarisation dans la sous-couche visqueuse est bien vérifiée et un comportement logarithmique est observé dans la sous-couche inertielle turbulente. Ces bons résultats sont obtenus en ajustant les six paramètres présents dans les lois de paroi de façon à rapprocher au mieux les lois de paroi des DNS. Ils sont reportés dans le tableau 6.9.

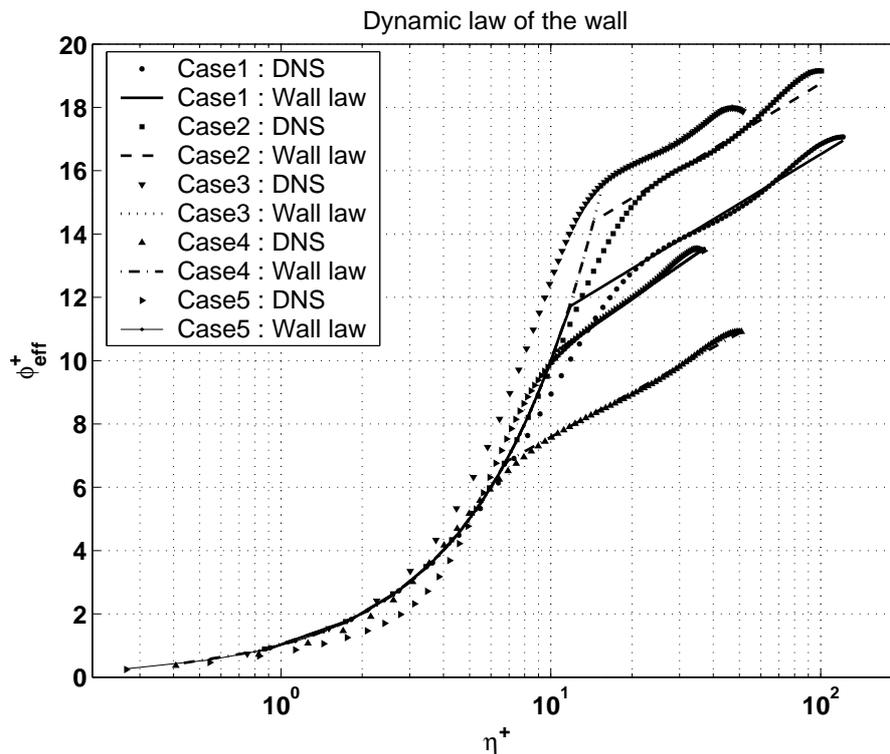


FIG. 6.51 – Vitesse axiale moyenne exprimée avec les nouvelles variables LnKc effectives $(\bar{\phi}_{eff}^+, \bar{\eta}^+)$. Les paramètres des lois de parois sont données dans le tableau 6.9.

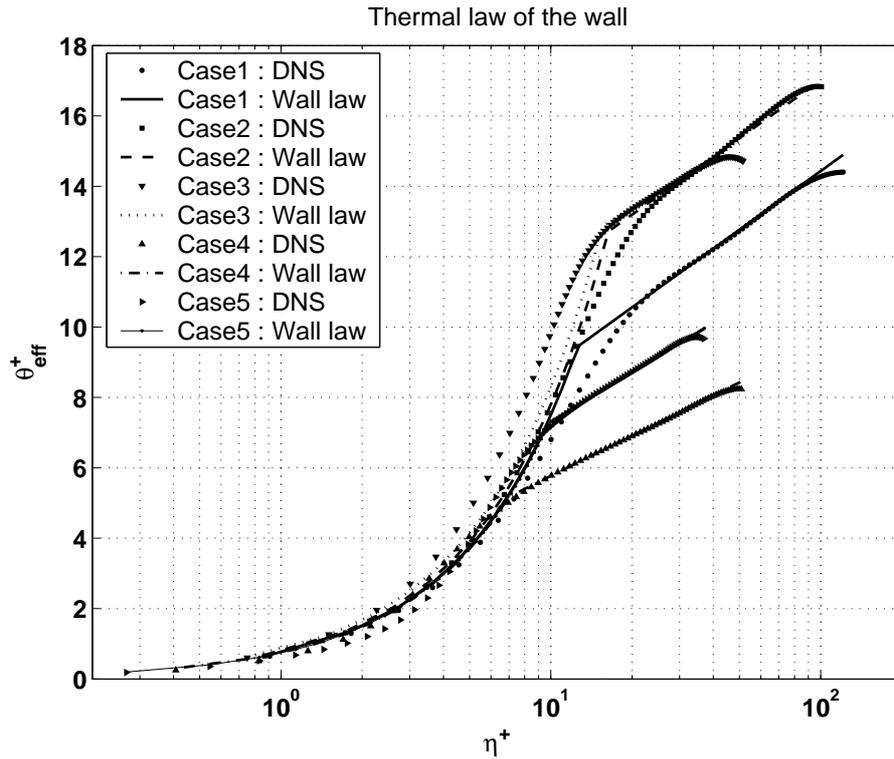


FIG. 6.52 – Température moyenne effective exprimée avec les nouvelles variables LnKc effectives $(\bar{\theta}_{eff}^+, \bar{\eta}^+)$. Les paramètres des lois de parois sont données dans le tableau 6.9.

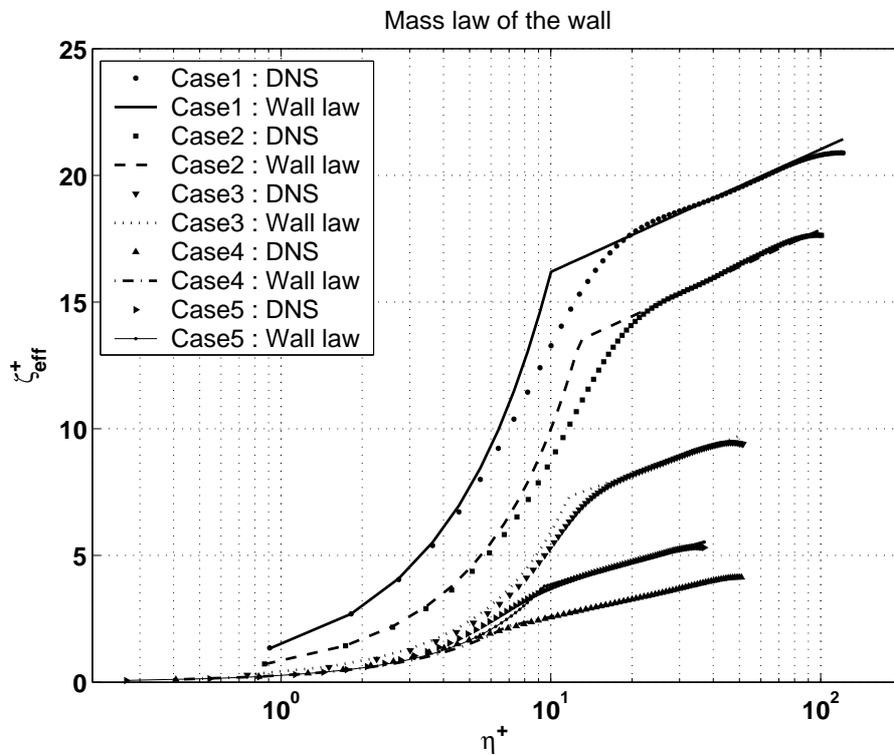


FIG. 6.53 – Fraction massique de fuel moyenne exprimée avec les nouvelles variables LnKc effectives $(\bar{\zeta}_{eff}^+, \bar{\eta}^+)$. Les paramètres des lois de parois sont données dans le tableau 6.9.

Comme le montre le tableau 6.9, les paramètres utilisés dans les lois de paroi dépendent de l'évaporation (c'est à dire de la vitesse de Stephan adimensionnelle v_s^+) et des gradients de densité près de la surface du film liquide (c'est à dire de ρ_{lt}^+). Par contre, la sensibilité des différents paramètres n'est pas la même. Ainsi, les constantes C_u , C_T et C_Y qui permettent d'ajuster la constante de Karmann et les nombres de Prandtl et Schmidt ont une plage de variation relativement restreinte (un maximum de 30% est observé) alors que les distances adimensionnelles des transitions laminaire-turbulent η_{lt}^+ , $\eta_{lt,T}^+$ et $\eta_{lt,m}^+$ varient dans des proportions plutôt importantes. Par ailleurs, leurs valeurs augmentent avec la croissance de ρ_{lt}^+ alors qu'elles diminuent avec la croissance de v_s^+ . Cependant, les valeurs dimensionnelles des distances de transition laminaire-turbulent y_{lt} , $y_{lt,T}$ et $y_{lt,m}$ augmentent à la fois avec l'augmentation de ρ_{lt}^+ et v_s^+ , puisque la structure de la couche limite est modifiée à cause de l'évaporation du film et des forts gradients de densité et de viscosité qui diminuent toutes les deux la vitesse de cisaillement u_τ .

Variables	Case 1	Case 2	Case 3	Case 4	Case 5
η_{lt}^+	11.7	14.4	15.6	6.80	10.2
$\eta_{lt,T}^+$	12.6	16.3	15.5	7.00	9.85
$\eta_{lt,m}^+$	10.0	12.8	11.6	6.87	9.37
C_u	0.973	0.973	0.962	0.884	1.110
C_T	1.212	1.257	1.223	1.212	1.257
C_Y	1.000	1.023	1.000	1.312	1.301

TAB. 6.9 – Constantes des lois de paroi.

Comme les six paramètres utilisés dans les lois de paroi pour l'évaporation d'un film liquide ne sont pas des constantes, nous avons réalisé quatre DNS supplémentaires afin d'établir des corrélations de ces paramètres en fonction de la vitesse de Stephan adimensionnelle v_s^+ et des gradients de densité à travers ρ_{lt}^+ . La carte des couples (ρ_{lt}^+, v_s^+) correspondants aux neuf DNS d'écoulement turbulent avec évaporation effectuées dans cette étude a été tracée sur la figure 6.54. Bien que les DNS ne permettent pas une cartographie complète du domaine (ρ_{lt}^+, v_s^+) , on constate néanmoins que la distribution des points est suffisamment bien répartie pour obtenir des tendances générales d'évolution des paramètres des lois de paroi en fonction du couple (ρ_{lt}^+, v_s^+) dans la mesure où comme nous le verrons cette évolution est quasiment monotone. Nous avons ainsi pu effectuer des interpolations entre les différents points connus grâce aux DNS afin d'établir des corrélations qui suivent de bonnes tendances d'évolution mais dont la précision n'est réellement assurée qu'au voisinage des couples (ρ_{lt}^+, v_s^+) correspondants aux DNS réalisés. Les corrélations des paramètres C_u , C_T , C_Y , η_{lt}^+ , $\eta_{lt,T}^+$ et $\eta_{lt,m}^+$ du modèle de paroi en fonction de (ρ_{lt}^+, v_s^+) sont présentées à titre indicatif respectivement sur les figures 6.55, 6.56, 6.57, 6.58, 6.59 et 6.60. Elles constituent la fermeture des lois de paroi que nous avons utilisées dans le modèle d'évaporation de film liquide pour le code RANS IFP-C3D qui sera présenté au chapitre suivant. On notera que ces corrélations ne s'expriment pas analytiquement mais sont constituées par une base de données représentée par les courbes tracées sur les figures 6.55, 6.56, 6.57, 6.58, 6.59 et 6.60. Afin de déterminer cette base de donnée, l'évolution des paramètres C_u , C_T , C_Y , η_{lt}^+ , $\eta_{lt,T}^+$ et $\eta_{lt,m}^+$ en fonction de v_s^+ a été établie pour deux valeurs de ρ_{lt}^+ qui correspondent à la majeure partie de nos DNS. Il s'agit de $\rho_{lt}^+ = 0.556$ et $\rho_{lt}^+ = 0.79$. Nous avons ainsi pu faire ressortir des tendances d'évolution

des paramètres C_u , C_T , C_Y , η_{lt}^+ , $\eta_{lt,T}^+$ et $\eta_{lt,m}^+$ en fonction de v_s^+ pour deux valeurs bien distinctes de ρ_{lt}^+ . Les courbes d'évolution des paramètres du modèles en fonction de v_s^+ pour toutes les autres valeurs de ρ_{lt}^+ ont alors été déduites par interpolation entre les deux courbes principales (passant par $\rho_{lt}^+ = 0.556$ et $\rho_{lt}^+ = 0.79$) et les points de DNS restants.

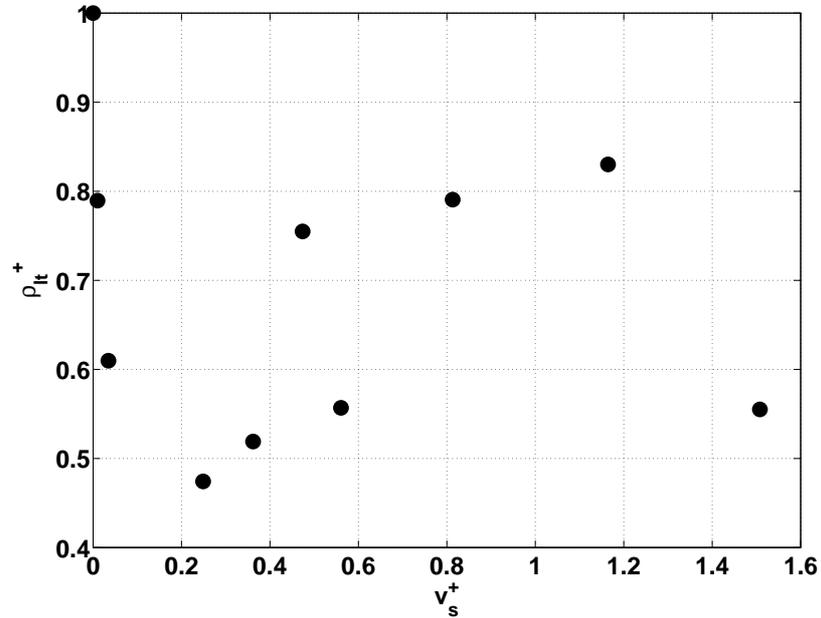


FIG. 6.54 – Carte regroupant l'ensemble des couples (ρ_{lt}^+, v_s^+) correspondants aux différentes DNS d'écoulement turbulent avec évaporation effectuées au cours de cette étude.

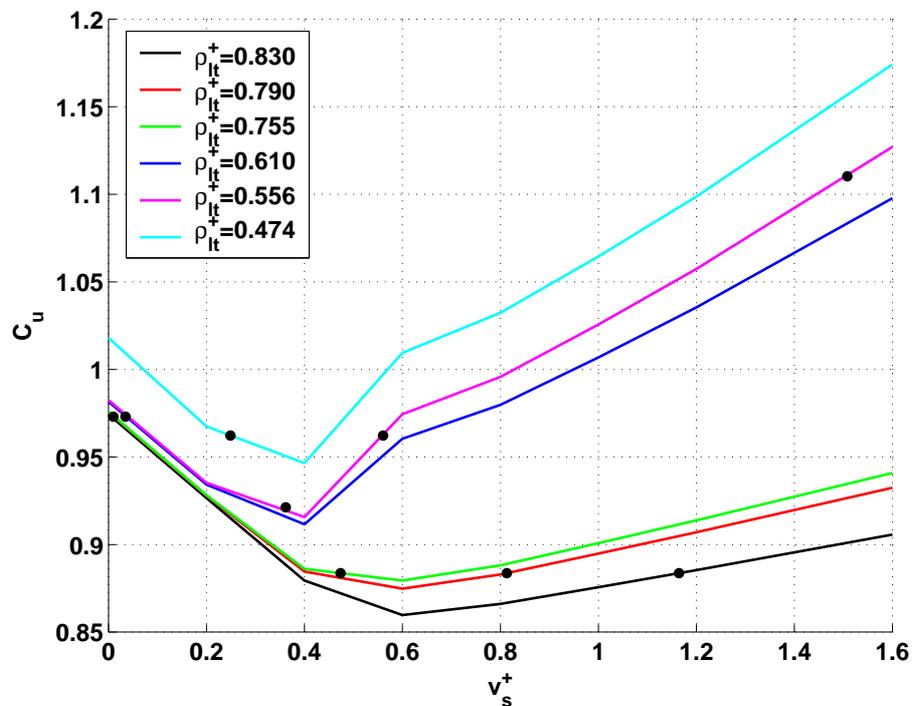


FIG. 6.55 – Corrélation de C_u en fonction de (ρ_{lt}^+, v_s^+) . Les points correspondent aux différentes DNS d'écoulement turbulent avec évaporation effectuées au cours de cette étude.

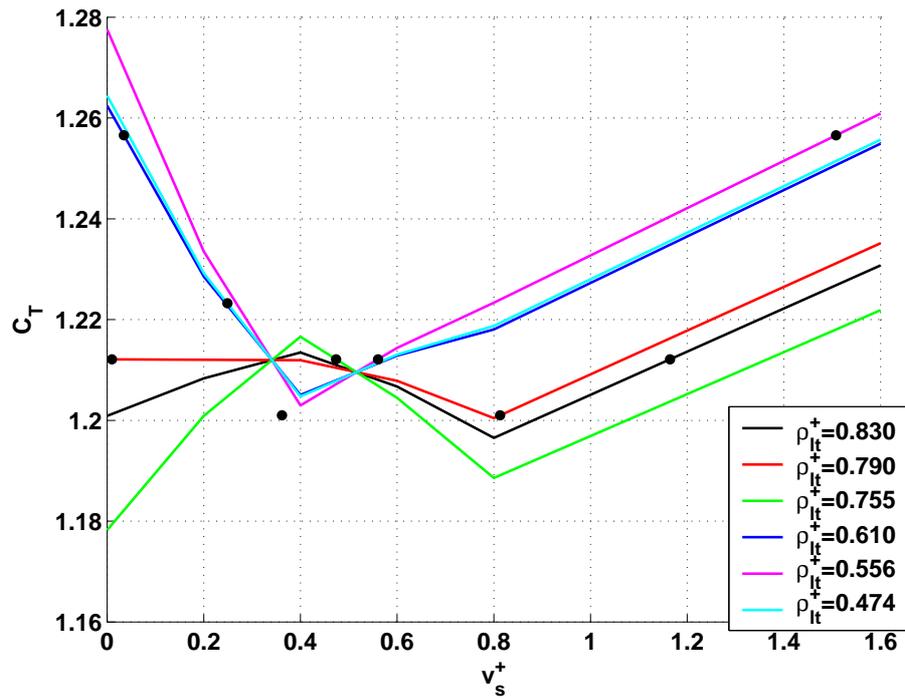


FIG. 6.56 – Corrélation de C_T en fonction de (ρ_{lt}^+, v_s^+) . Les points correspondent aux différentes DNS d'écoulement turbulent avec évaporation effectuées au cours de cette étude.

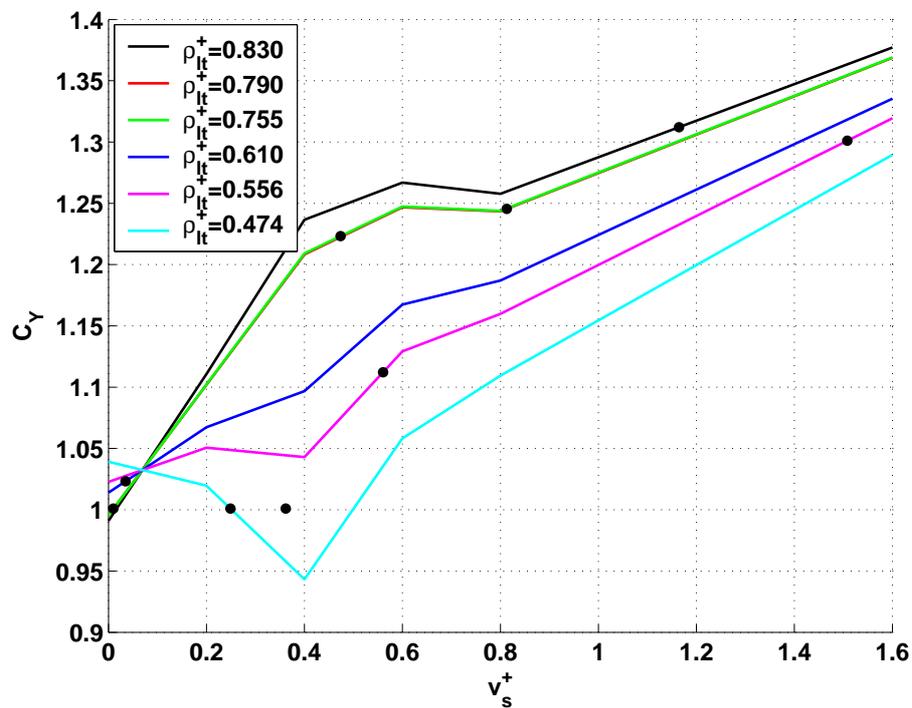


FIG. 6.57 – Corrélation de C_Y en fonction de (ρ_{lt}^+, v_s^+) . Les points correspondent aux différentes DNS d'écoulement turbulent avec évaporation effectuées au cours de cette étude.

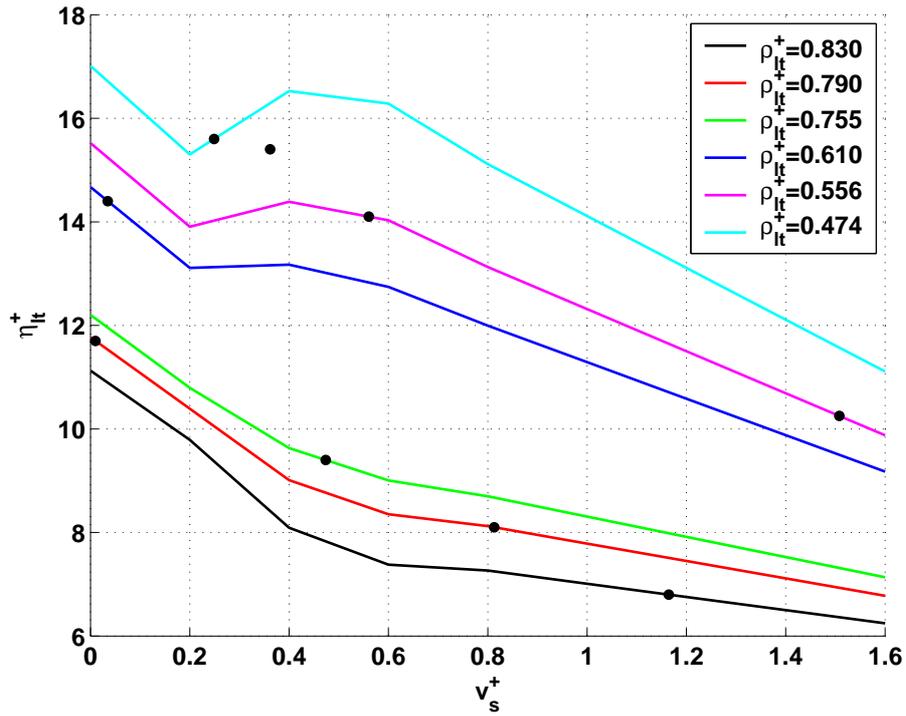


FIG. 6.58 – Corrélation de η_{lt}^+ en fonction de (ρ_{lt}^+, v_s^+) . Les points correspondent aux différentes DNS d'écoulement turbulent avec évaporation effectuées au cours de cette étude.

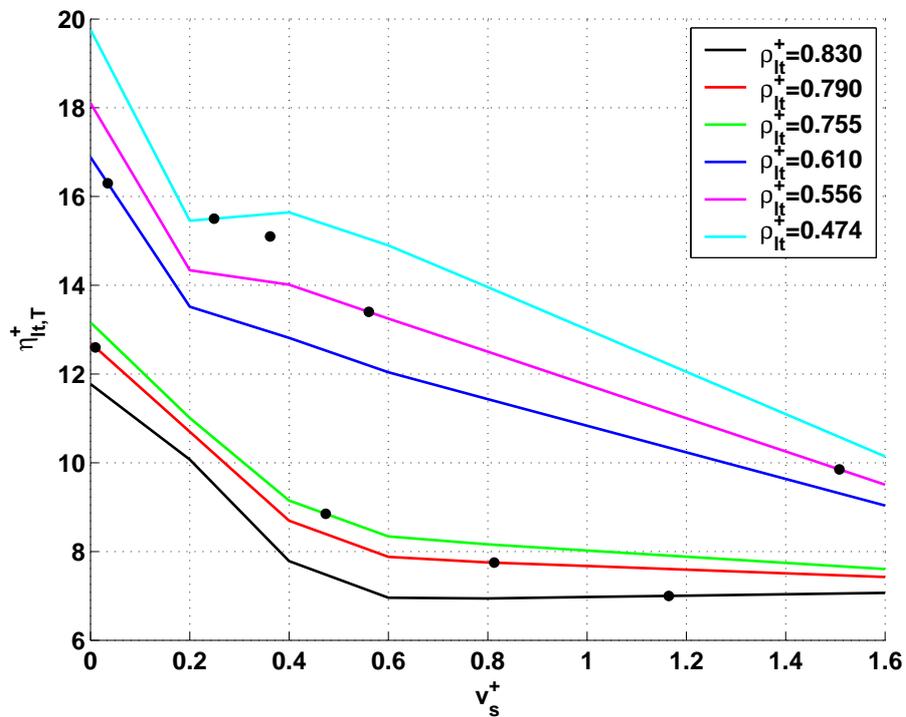


FIG. 6.59 – Corrélation de $\eta_{lt,T}^+$ en fonction de (ρ_{lt}^+, v_s^+) . Les points correspondent aux différentes DNS d'écoulement turbulent avec évaporation effectuées au cours de cette étude.

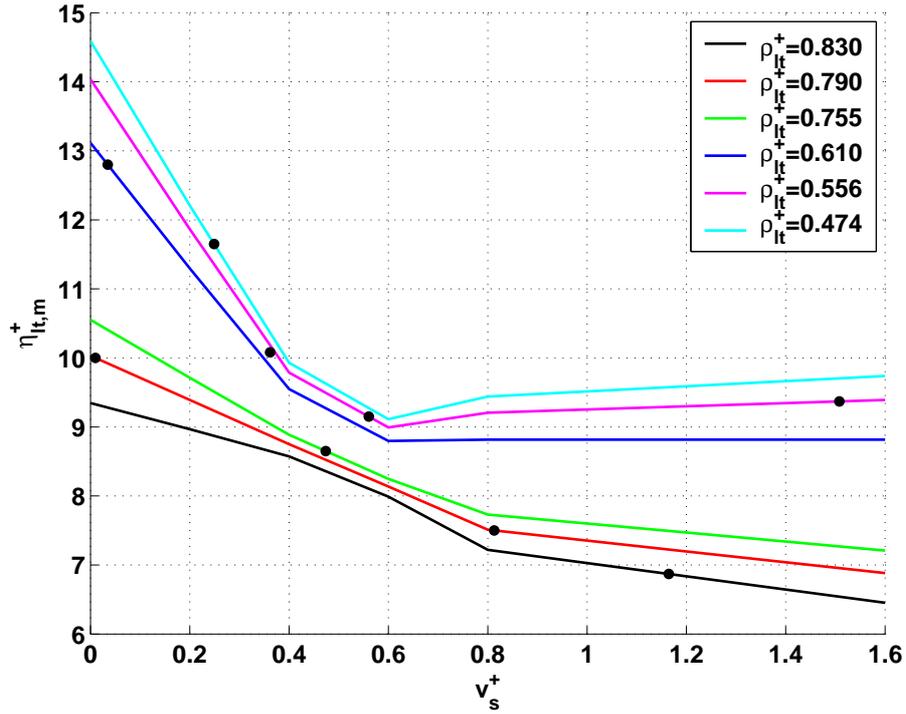


FIG. 6.60 – Corrélation de $\eta_{lt,m}^+$ en fonction de (ρ_{lt}^+, v_s^+) . Les points correspondent aux différentes DNS d'écoulement turbulent avec évaporation effectuées au cours de cette étude.

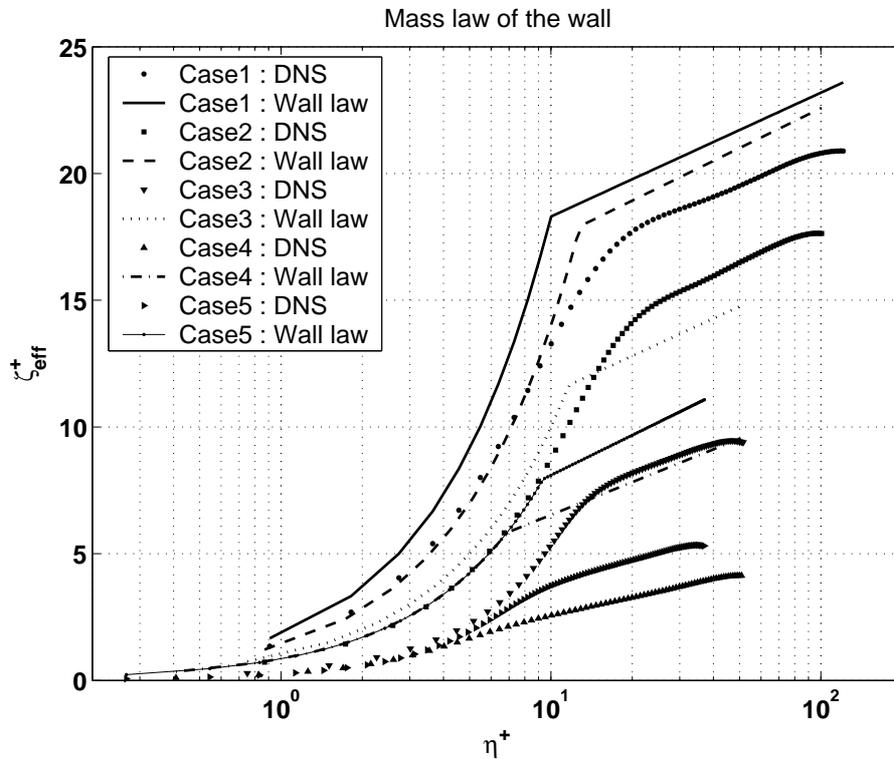


FIG. 6.61 – Fraction massique de fuel moyenne exprimée avec les nouvelles variables LnKc effectives (ζ_{eff}^+, η^+) , mais un nombre de Schmidt laminaire du fuel S_{cl} non corrigé ($S_{cl} = S_{c,F}$).

Pour finir, la figure 6.61 montre la comparaison entre les profils DNS et la loi de paroi

massique utilisée sans correction du nombre de Schmidt laminaire. On constate alors que le modèle de paroi est loin des DNS dans tous les cas, et cela plus particulièrement dans la sous-couche visqueuse où la sensibilité de la loi de paroi à l'ajustement des paramètres est pratiquement nulle. Cela prouve qu'il est absolument nécessaire de tenir compte de la correction du nombre de Schmidt laminaire du fuel S_{cl} si l'on utilise un modèle de diffusion simple et, confirme les résultats du chapitre 4 sur l'effet de la thermochimie complexe.

6.8 Conclusions

Au cours de ce chapitre, nous avons mis en évidence le changement de structure de la couche limite turbulente lorsque celle-ci subit l'influence conjuguée de forts gradients de densité et de viscosité et de la vitesse de Stephan engendrée par l'évaporation d'un film liquide. En particulier, il a été montré que :

- tous les flux à l'interface liquide-gaz (quantité de mouvement, masse et énergie) sont fortement diminués par les gradients de densité et le soufflage de la couche limite par l'évaporation.
- le maximum de la contrainte de cisaillement est déplacé de la surface du film liquide vers l'intérieur de la couche limite, et il faut en tenir compte pour la modélisation de la turbulence à proximité d'un film liquide.
- La sous-couche visqueuse s'épaissit avec l'augmentation des gradients de masse volumique et de viscosité et de la vitesse de Stephan.

Par ailleurs, nous avons montré que l'évaporation du film subit de fortes fluctuations spatiales en raison de la turbulence. Enfin, de nouvelles lois de paroi qui tiennent compte des phénomènes physiques cités ci-dessus ont été développées pour une gamme étendue de vitesse d'évaporation et de gradients de densité. Ces nouvelles fonctions de paroi vont permettre d'établir un modèle d'évaporation de film liquide adapté à la fois aux exigences du RANS et des moteurs automobiles dans le chapitre suivant.

Chapitre 7

Modèle d'évaporation de film liquide pour le RANS

Les premiers chapitres de ce manuscrit nous a montré l'importance de bien maîtriser l'évaporation du liquide dans un code RANS si l'on souhaite modéliser correctement l'interaction de la combustion avec un film liquide de carburant.

Le but de ce chapitre est donc de fournir les bases théoriques d'un modèle d'évaporation de film liquide respectant à la fois les contraintes liées au formalisme RANS, aux applications moteurs et la nécessité de couplage avec la combustion. A ce titre, on rappelle que l'évaporation d'un film liquide de carburant au sein d'un écoulement gazeux turbulent est gouvernée par la diffusion locale du fuel à l'interface liquide-gaz (transfert de masse) couplée aux transferts thermiques nécessaires pour compenser la perte énergétique due au changement d'état liquide-gaz à la surface du film liquide. Les flux thermiques qui contrôlent l'évaporation du film liquide à sa surface ont une composante d'origine liquide $\varphi_{l,s}$ liée à la thermique dans le film comme le schématise la figure 7.1 et une composante d'origine gazeuse $\varphi_{g,s}$. Cette dernière tout comme la diffusion du fuel à l'interface liquide-gaz sont contrôlées par l'écoulement dans la couche limite turbulente gazeuse située juste au-dessus du film liquide. En effet, cet écoulement définit la contrainte de cisaillement et les gradients de température T et de fraction massique de fuel Y_F à la surface du film qui sont respectivement à l'origine du transfert de masse \dot{M} et du transfert thermique gazeux $\varphi_{g,s}$. Toute la difficulté de modéliser l'évaporation d'un film liquide dans un code de calcul RANS provient du fait que ces gradients à la paroi ou à la surface du film liquide (vitesse, fractions massiques et température) ne sont pas directement résolus comme c'est le cas en DNS. Cela est d'autant plus vrai que la grande diversité d'écoulements et de conditions thermodynamiques dans les moteurs rend très difficile l'utilisation de relations semi-empiriques. Nous allons donc suivre une approche similaire à celle utilisée par Foucart [24] et [23] ou O'Rourke et Amsden [45] et [46], basée sur l'utilisation de lois de paroi dynamiques, thermiques et massiques afin de modéliser les gradients à l'interface liquide-gaz.

L'analyse physique de l'évaporation d'un film liquide en régime turbulent effectuée au chapitre précédent nous a montré la nécessité de tenir compte du soufflage de la couche limite engendré par l'évaporation (vitesse de Stephan) ainsi que des forts gradients de densité et de viscosité liés aux gradients thermiques et de masse proches de la surface du film. En effet, comme cela est schématisé sur la figure 7.1, ce soufflage diminue fortement les gradients à l'interface liquide-gaz. Bien que de nombreuses lois de paroi ont été développées

pées par Angelberger [6] pour intégrer l'influence de l'anisothermicité et par Foucart [24] et [23] ou O'Rourke et Amsden [45] pour tenir compte de la vitesse de Stephan, aucune de ces approches ne combine à la fois l'influence des gradients thermiques et massiques et celle du soufflage dû à l'évaporation. En outre, le couplage de l'évaporation du film liquide avec la combustion nécessite à priori de connaître le profil moyen de fraction massique de fuel \bar{Y}_F dans la maille située à proximité de la paroi afin que le taux de réaction moyen prenne bien en compte l'évaporation du film dans cette maille. C'est pourquoi, de nouvelles lois de paroi répondant parfaitement aux exigences de l'évaporation d'un film liquide en régime turbulent et de son couplage avec la combustion ont été développées au chapitre précédent grâce à l'utilisation de la DNS. Néanmoins, ces lois de parois souffrent d'une mauvaise adaptation aux phases transitoires fortement présentes dans les moteurs puisqu'elles ont été établies en supposant un régime stationnaire. Ce chapitre consiste donc à montrer comment ces lois ont été exploitées et couplées avec la thermique du film liquide afin de construire un modèle d'évaporation de film liquide qui tienne compte des phases transitoires dans le code de calculs IFP-C3D dédié à la simulation des moteurs automobiles avec un formalisme RANS.

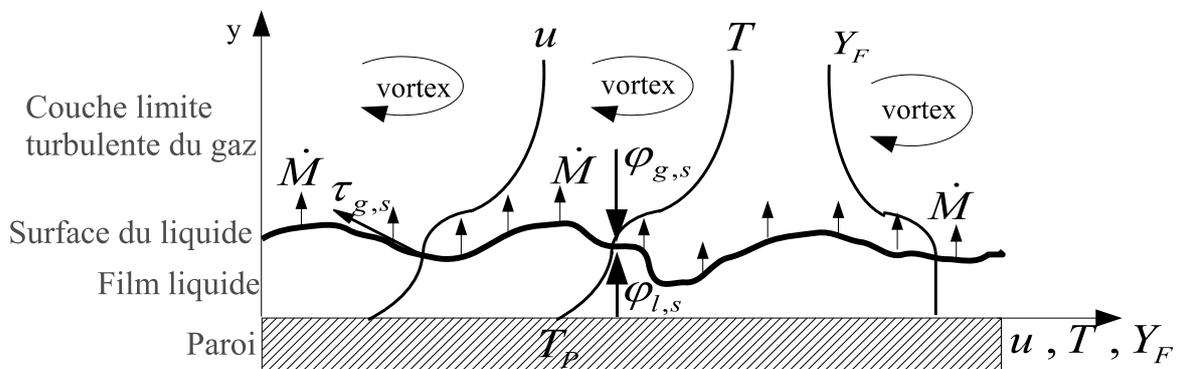


FIG. 7.1 – Principaux phénomènes physiques gouvernant l'évaporation d'un film liquide.

Il convient de noter que le modèle d'évaporation présenté dans ce chapitre nécessite d'être intégré dans un modèle global de film liquide qui gère sa formation par impact du spray sur la paroi ainsi que son transport afin de pouvoir être utilisé dans des simulations de moteurs automobiles. Ce modèle de film global, implanté par Habchi dans le code de calculs IFP-C3D [25], est basé sur les travaux de O'Rourke et Amsden [45], [46], [3] et [4]. Il fera l'objet d'une brève description dans la première section de ce chapitre. Le reste de l'étude consacrée au modèle d'évaporation de film liquide développé pour le code IFP-C3D sera organisé de la façon suivante :

- une description de l'équation de conservation de la masse du système choisi pour tenir compte du transfert de chaleur entre particules au moment de la formation du film liquide par impact du spray sur la paroi sera présentée dans la deuxième section.
- L'équation gouvernant la température moyenne de chaque particule film sera présentée et démontrée dans la troisième section.
- Le profil de température choisi dans le film liquide sera exposé dans la quatrième section.
- La résolution de la température d'interface liquide-gaz T_s et du débit évaporé \dot{M} par couplage du modèle thermique dans le film liquide avec les lois de paroi fera l'objet de la cinquième section.
- La gestion des phases transitoires dans les couches limites thermique et massique sera abordée au cours de la sixième section.
- Une validation de l'implémentation des lois de paroi dans le code de calculs IFP-C3D

sera exposée dans la septième et dernière section de ce chapitre.

7.1 Modèle global de film liquide dans IFP-C3D

Ce modèle a été tout d'abord développé par O'Rourke et Amsden en 1996 [45], implémenté dans le code de calculs KIVA-3V en 1997 [3] puis complété en [4] et [46]. Par la suite, il a été repris et amélioré par Habchi en 2004 [25] en s'inspirant des travaux de Han et Xu [29] et [28] afin d'être implémenté dans le code de calculs IFP-C3D. Ce modèle décrit à la fois la formation du film liquide par impact du spray sur la paroi (incluant rebond et éclaboussement des gouttes), sa dynamique et son évaporation (sous modèle que l'on cherche à améliorer dans cette étude) en se basant sur une méthode de suivi de particules similaire à celle du modèle de spray : il s'agit donc d'une modélisation lagrangienne du film liquide. Cette approche consiste à représenter le film liquide par un ensemble de particules p qui proviennent des gouttelettes du spray qui ont participé à la formation du film (comme le montre la figure 7.2) et à observer les modifications de leurs propriétés en les suivant dans leur mouvement. Cette description présente l'avantage d'être compatible avec le modèle de spray et d'améliorer a priori la précision du mouvement du film en permettant à des particules du film situées sur une même face paroi d'avoir des vitesses différentes.

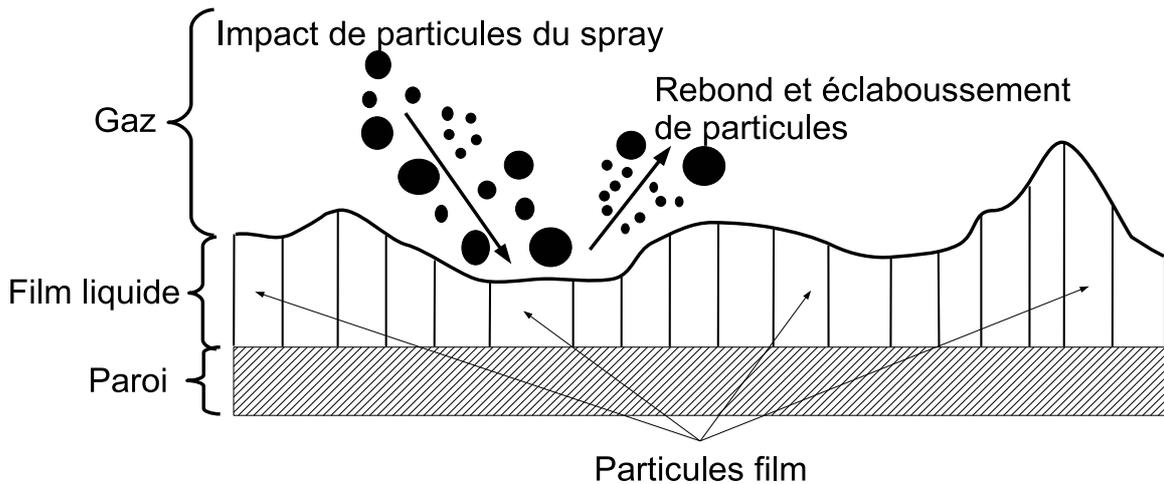


FIG. 7.2 – Représentation lagrangienne du film liquide dans IFP-C3D.

En outre, ce modèle de film utilise les hypothèses suivantes :

1. La masse volumique ρ_l du liquide est constante.
2. L'épaisseur du film liquide est beaucoup plus petite que le rayon de courbure de la paroi et de la distance caractéristique de variation des propriétés moyennes du film le long de la paroi. Par exemple, la longueur des ondes d'interface liquide-gaz est supposée beaucoup plus grande que l'épaisseur du film : l'interface du film est pratiquement plate.
3. L'écoulement du film est laminaire.
4. La vitesse du liquide est parallèle à la paroi.
5. Le profil de vitesse dans le film liquide est linéaire dans la direction normale à la paroi.

6. Le gradient de pression statique et dynamique le long du film est négligé.
7. L'évaporation n'a pas d'effet sur le mouvement du film.
8. Chaque particule p constituant le film liquide est décrite par un parallélépipède rectangle dont l'épaisseur h_p est définie de la manière suivante (voir figure 7.3) :

$$h_p = \frac{\sum_{i \in D_r} V_i}{A_{grp}} \quad (7.1)$$

où V_i est le volume d'une particule film i contenue dans le disque D_r de rayon r autour de la particule film p . A_{grp} représente la surface de la goutte isolée de rayon r_p que formeraient les particules film i contenues dans le disque de rayon r autour de la particule film p si elles étaient regroupées ensemble et isolées du reste du film liquide. Le rayon r a été évalué à un millimètre par Habchi [26] en comparant des résultats de calculs avec des mesures expérimentales de l'épaisseur du film liquide constitué par l'impact d'un spray sur une paroi. Cette approche permet de résoudre une épaisseur locale du film liquide indépendante du maillage. Il s'agit d'une évolution apportée par Habchi [26] au modèle de film d'origine construit par O'Rourke et Amsden. Cette modélisation améliore a priori la résolution des bords du film liquide par rapport à l'approche adoptée par O'Rourke et Amsden qui consiste à supposer que le film liquide contenu dans une maille paroi recouvre nécessairement la totalité de la surface de sa paroi.

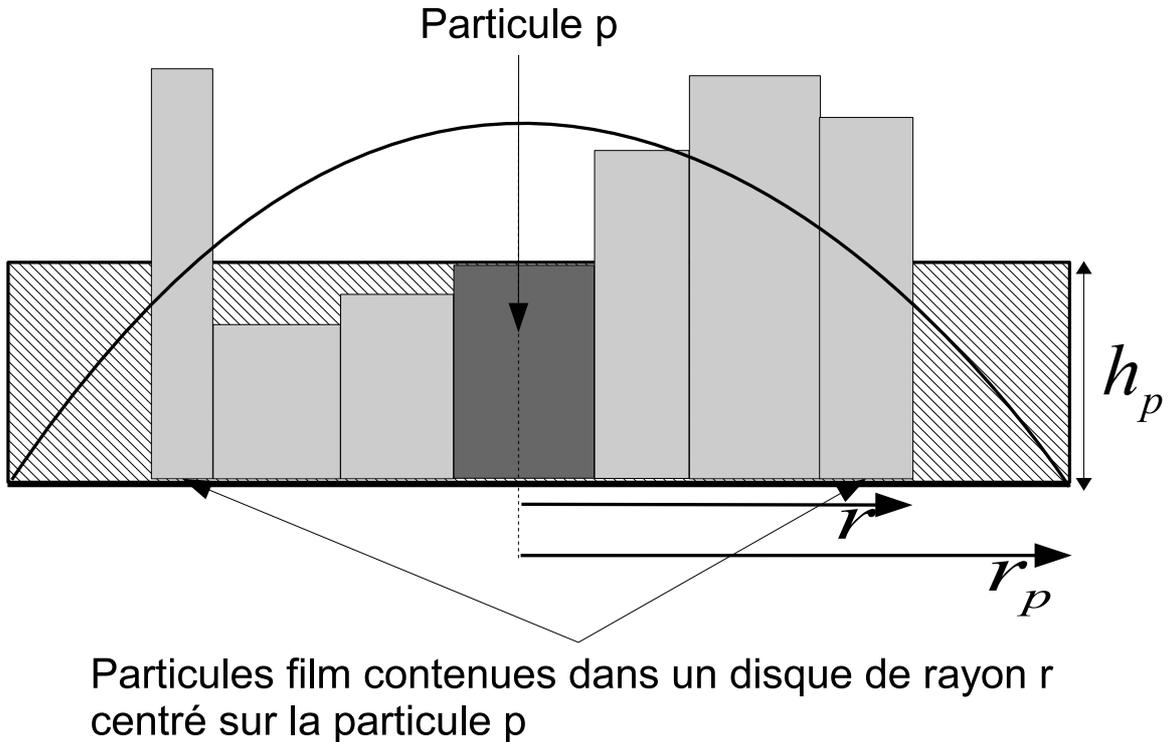


FIG. 7.3 – Représentation de la hauteur h_p d'une particule de film liquide p dans IFP-C3D.

Dans la mesure où le sous modèle d'évaporation développé par O'Rourke et Amsden [45] dans le cadre du modèle de film liquide présenté dans cette section a été implémenté par Habchi dans IFP-C3D [25], il nous servira de référence pour évaluer les améliorations apportées par le modèle d'évaporation de film liquide développé dans cette étude. Les

modèles d'évaporation développés respectivement au cours de cette étude et par O'Rourke et Amsden seront respectivement notés modèle GD et modèle OA dans tout le reste du manuscrit. A chaque fois, qu'il sera nécessaire, les différences entre les deux modèles seront mises en évidence. On notera que le modèle d'évaporation de film liquide détaillé au cours de ce chapitre pourrait très bien s'adapter à un formalisme eulérien. Il n'est en effet pas dépendant du formalisme choisi pour décrire le film. Seule son implantation en dépend à travers le couplage entre les lois de paroi et la thermique dans le film.

7.2 Conservation de la masse lors de la formation du film liquide

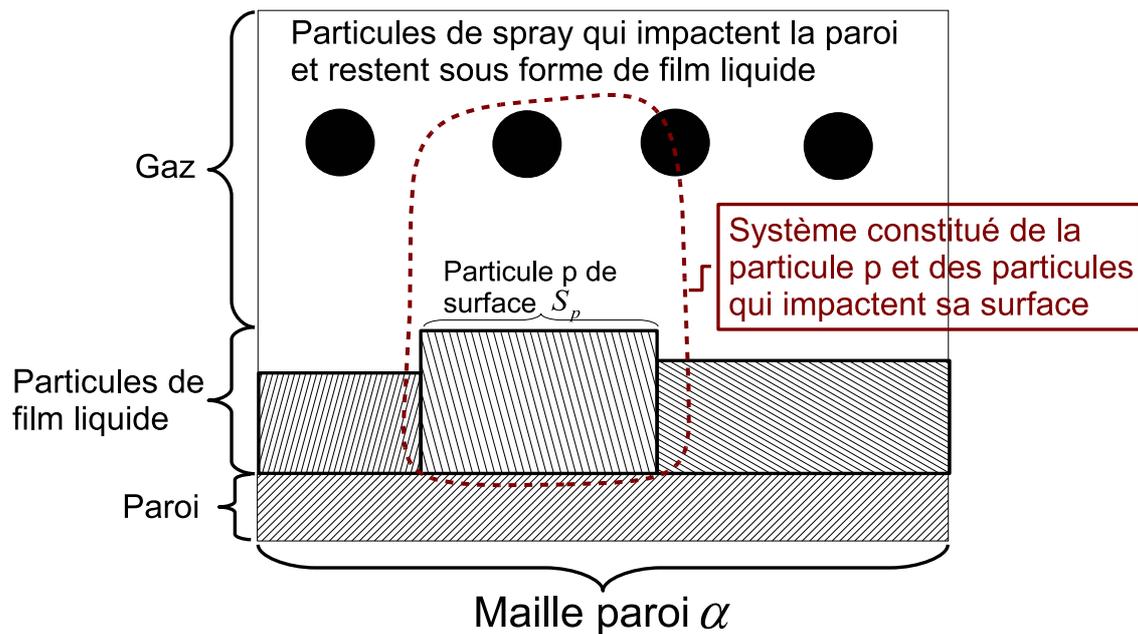


FIG. 7.4 – Représentation du système considéré pour tenir compte du transfert de chaleur entre particules au moment de la formation du film liquide dans IFP-C3D.

Au moment de la formation du film liquide, le modèle développé par O'Rourke et Amsden [45] suppose que les gouttelettes du spray qui impactent une particule de film échangent de la chaleur entre elles et avec cette dernière à cause du mélange provoqué par le choc de l'impact. Par contre, une particule p n'échange pas de masse avec les autres particules spray ou film. Ainsi, à l'évaporation près, la masse d'une particule p et son volume V_p restent constants. En outre, la quantité de spray qui impacte une paroi et y reste sous forme de film liquide n'est connue qu'à l'échelle d'une maille paroi. De ce fait, le modèle utilise l'hypothèse que la quantité de spray qui impacte un film liquide au sein d'une maille paroi est répartie proportionnellement à la surface S_p occupée par chaque particule film p . Par conséquent, afin de pouvoir dériver l'équation de conservation de l'énergie d'une parcelle de film p , il convient d'écrire l'équation de conservation de la masse de film liquide m_{sys} du système virtuel (décrit sur la figure 7.4) composé d'une particule film p qui fusionnerait avec les gouttes qui impactent dessus :

$$\frac{dm_{sys}}{dt} = \rho_l \frac{dV_{sys}}{dt} = M_\alpha S_p - \dot{M}_p S_p \quad (7.2)$$

où :

- V_{sys} désigne le volume du système virtuel composé d'une particule film p qui fusionnerait avec les gouttes qui impactent dessus.
- \dot{M}_p désigne le débit surfacique de masse évaporée de la particule p
- M_α désigne le terme source de masse correspondant à toutes les gouttes qui rejoignent le film en impactant la face paroi α sur laquelle se trouve la particule film p pendant le temps dt :

$$M_\alpha = \frac{1}{S_\alpha dt} \sum_{i=1}^{np_\alpha} m_i \quad (7.3)$$

où :

- np_α désigne le nombre de particules qui impactent la surface α et rejoignent le film liquide pendant dt .
- S_α désigne la surface occupée par l'ensemble des particules de film liquide présentes sur la surface paroi α avant les impacts éventuels.

On notera que l'équation de conservation de la masse d'une particule p de film liquide m_p s'écrit :

$$\frac{dm_p}{dt} = \rho_l \frac{dV_p}{dt} = -\dot{M}_p S_p \quad (7.4)$$

où V_p est le volume d'une particule p du film.

On notera également que la surface S_p occupée sur la paroi par une particule film p obéit à la relation suivante de conservation du volume :

$$S_p = \frac{V_p}{h_p} \quad (7.5)$$

7.3 Equation de la température moyenne d'une particule de film liquide $\langle \bar{T}_{l,p} \rangle$

Afin de déterminer la température à la surface du film liquide T_s , nécessaire pour le calcul du débit de masse évaporée, la thermique dans le film liquide doit être modélisée (de façon similaire à ce qui a été fait dans NTMIX3D au chapitre 2). La différence majeure avec ce qui a été réalisé en DNS réside dans le fait que le film liquide est ici en formation et que les particules qui entre en collision les unes avec les autres échangent de l'énergie entre elles. Ainsi, il faut prendre en compte l'impact éventuel de gouttelettes. Pour ce faire, on suit l'évolution temporelle de la température moyenne $\langle \bar{T}_{l,p} \rangle$ de chaque particule p de film liquide. $\langle \rangle$ désigne l'opérateur de moyenne spatiale, et en l'occurrence sur une particule p de film.

Afin d'établir l'équation de la température moyenne d'une particule de film liquide $\langle \bar{T}_{l,p} \rangle$, il convient de distinguer les particules qui forment le film liquide préexistant (c'est-à-dire ne prenant pas en compte les gouttes qui viennent de rejoindre le film) de celles qui impactent la surface du film. En effet, l'équation que l'on va décrire ne concerne que les premières. La température moyenne $\langle \bar{T}_{l,p} \rangle$ d'une particule qui vient d'impacter un film liquide est tout simplement décrite comme la moyenne des températures $\langle \bar{T}_{l,p} \rangle$ des particules constituant le film liquide après l'impact (voir paragraphe 7.3.2).

7.3.1 Equation gouvernant la température moyenne $\langle \bar{T}_{l,p} \rangle$ d'une particule appartenant au film liquide

Avec les hypothèses de masse volumique du liquide ρ_l constante et de mélange instantané des gouttes impactantes avec le film liquide, l'équation de conservation de l'énergie interne massique moyenne $\langle \bar{E}_{int,p} \rangle$ d'une particule p s'écrit :

$$\frac{d}{dt} [\langle \bar{E}_{int,p} \rangle V_{sys}] = -\frac{\dot{M}_p \langle \bar{E}_{int,p} \rangle}{\rho_l} S_p + \frac{Q_\alpha}{\rho_l} S_p + \frac{1}{\rho_l} [\varphi_{l,p}(0) - \varphi_{l,p}(h_p)] S_p \quad (7.6)$$

où :

- \dot{M}_p désigne le débit surfacique de masse évaporée de la particule p.
- $\varphi_{l,p}(0)$ et $\varphi_{l,p}(h_p)$ désignent respectivement les flux de chaleur dans la particule p à la paroi et à la surface du film selon l'orientation correspondant à la figure 7.5.
- Q_α désigne l'énergie interne apportée par l'impact et l'éclaboussement des gouttes du spray :

$$Q_\alpha = \frac{1}{S_\alpha dt} \sum_{i=1}^{np_\alpha} m_i \Delta \langle \bar{E}_{int,i} \rangle \quad (7.7)$$

où m_i désigne la masse de la particule i . Pour les particules i qui rejoignent le film, $\Delta \langle \bar{E}_{int,i} \rangle = \langle \bar{E}_{int,i} \rangle$, alors que pour les particules i qui rebondissent ou éclaboussent vers le gaz, $\Delta \langle \bar{E}_{int,i} \rangle$ correspond à la différence d'énergie interne entre la particule i incidente et la particule qui repart vers le gaz. Il convient de préciser que l'énergie interne $\langle \bar{E}_{int,i} \rangle$ d'une particule i est une donnée contenue du modèle de film à travers la température de la particule.

On remarque que dans l'équation de l'énergie 7.6 écrite ci-dessus, on ne tient pas compte des transferts d'énergie entre les particules déjà présentes dans le film liquide. Cela signifie que l'on néglige la diffusion transversale de chaleur dans le film liquide. Cette hypothèse est justifiée par la modélisation de films minces pour lesquels les gradients (notamment de température) sont prépondérants selon la direction normale au film liquide. Les échanges thermiques ont donc majoritairement lieu selon cette direction (y sur la figure 7.5).

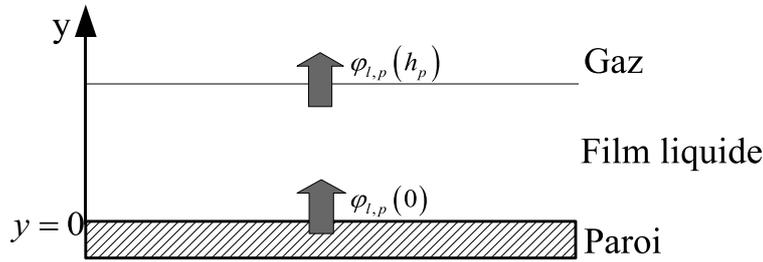


FIG. 7.5 – Orientation du domaine.

Ainsi, après discrétisation temporelle de l'équation 7.6, on obtient l'expression suivante, écrite de façon explicite, pour l'énergie interne massique moyenne $\langle \bar{E}_{int,p}^{n+1} \rangle$ d'une particule p au temps $n+1$:

$$\frac{\langle \bar{E}_{int,p}^{n+1} \rangle V_{sys}^{n+1} - \langle \bar{E}_{int,p}^n \rangle V_{sys}^n}{\Delta t} = \frac{1}{\rho_l} \left(-\dot{M}_p^{n+1} \langle \bar{E}_{int,p}^{n+1} \rangle + Q_\alpha + [\varphi_{l,p}^{n+1}(0) - \varphi_{l,p}^{n+1}(h_p)] \right) S_p \quad (7.8)$$

où S_p^n représente la surface occupée sur la paroi par la particule film p au temps n, c'est-à-dire avant les impacts éventuels de gouttes sur le film pendant l'intervalle de temps $[t^n, t^{n+1}]$. V_{sys}^n est égal à V_p^n , le volume de la particule p et V_{sys}^{n+1} est obtenu en discrétisant temporellement l'équation de conservation de la masse de film liquide 7.2 :

$$V_{sys}^{n+1} = V_p^n + \left(\frac{M_\alpha}{\rho_l} - \frac{\dot{M}_p^{n+1}}{\rho_l} \right) S_p^n \Delta t \quad (7.9)$$

En injectant l'expression de V_{sys}^{n+1} donnée par l'équation 7.9 dans l'équation 7.8 de $\langle \bar{E}_{int,p}^{n+1} \rangle$, on obtient alors :

$$\begin{aligned} \frac{\left[\langle \bar{E}_{int,p}^{n+1} \rangle - \langle \bar{E}_{int,p}^n \rangle \right] V_p^n}{\Delta t} + \langle \bar{E}_{int,p}^{n+1} \rangle \left(\frac{M_\alpha}{\rho_l} - \frac{\dot{M}_p^{n+1}}{\rho_l} \right) S_p^n = \\ \frac{1}{\rho_l} \left(-\dot{M}_p^{n+1} \langle \bar{E}_{int,p}^{n+1} \rangle + \mathcal{Q}_\alpha + [\varphi_{l,p}^{n+1}(0) - \varphi_{l,p}^{n+1}(h_p)] \right) S_p^n \end{aligned} \quad (7.10)$$

Et, après simplification et utilisation de l'équation 7.5 :

$$\frac{\left[\langle \bar{E}_{int,p}^{n+1} \rangle - \langle \bar{E}_{int,p}^n \rangle \right] h_p^n}{\Delta t} = -\frac{M_\alpha}{\rho_l} \langle \bar{E}_{int,p}^{n+1} \rangle + \frac{\mathcal{Q}_\alpha}{\rho_l} + \frac{1}{\rho_l} [\varphi_{l,p}^{n+1}(0) - \varphi_{l,p}^{n+1}(h_p)] \quad (7.11)$$

Afin d'écrire une équation explicite pour la température moyenne $\langle \bar{T}_{l,p} \rangle$ de la particule p, on suppose que l'énergie interne moyenne $\bar{E}_{int,p}$ de la particule p s'écrit :

$$\langle \bar{E}_{int,p} \rangle = C_{v,p} (\langle \bar{T}_{l,p} \rangle - T_0) + \Delta h_f(T_0) \quad (7.12)$$

où $C_{v,p}$ désigne la capacité calorifique à volume constant du liquide à la température $\langle \bar{T}_{l,p} \rangle$. T_0 désigne une température de référence que l'on prendra égale à 300K dans nos simulations. $\Delta h_f(T_0)$ désigne l'enthalpie de formation à la température T_0 .

On suppose par ailleurs que la variation de $C_{v,p}$ est négligeable sur un pas de temps Δt . Cependant, $C_{v,p}$ dépend de la température moyenne du film liquide en fonction du fuel utilisé de façon conforme avec les tables thermodynamiques [55] :

$$C_{v,p}^n = f(\langle \bar{T}_{l,p}^n \rangle) \quad (7.13)$$

Ainsi, en utilisant l'équation 7.11, on obtient une équation discrète pour la température moyenne $\langle \bar{T}_{l,p} \rangle$ de la particule p, écrite de façon implicite :

$$\begin{aligned} C_{v,p}^n \frac{\left(\langle \bar{T}_{l,p}^{n+1} \rangle - \langle \bar{T}_{l,p}^n \rangle \right) h_p^n}{\Delta t} = -\frac{M_\alpha}{\rho_l} \left[C_{v,p}^n \left(\langle \bar{T}_{l,p}^{n+1} \rangle - T_0 \right) + \Delta h_f(T_0) \right] \\ + \frac{\mathcal{Q}_\alpha}{\rho_l} + \frac{1}{\rho_l} [\varphi_{l,p}^{n+1}(0) - \varphi_{l,p}^{n+1}(h_p)] \end{aligned} \quad (7.14)$$

Finalement, l'équation explicite donnant la température $\langle \bar{T}_{l,p}^{n+1} \rangle$ de la particule p au temps n+1 s'écrit :

$$\langle \bar{T}_{l,p}^{n+1} \rangle = \frac{E_{pn} + \frac{1}{\rho_l} [\varphi_{l,p}^{n+1}(0) - \varphi_{l,p}^{n+1}(h_p)] + E_{imp}}{C_{tot}} \quad (7.15)$$

où l'on a posé :

$$E_{pn} = C_{v,p}^n \frac{\langle \bar{T}_{l,p}^n \rangle h_p^n}{\Delta t} \quad (7.16)$$

$$E_{imp} = \frac{Q_\alpha + M_\alpha [C_{v,p}^n T_0 - \Delta h_f(T_0)]}{\rho_l} \quad (7.17)$$

$$C_{tot} = C_{v,p}^n \left(\frac{M_\alpha}{\rho_l} + \frac{h_p^n}{\Delta t} \right) \quad (7.18)$$

7.3.2 Détermination de la température moyenne $\langle \bar{T}_{l,p} \rangle$ d'une particule qui impacte et rejoint le film liquide

Comme nous l'avons déjà mentionné précédemment, la température moyenne $\langle \bar{T}_{l,p} \rangle$ d'une particule qui impacte et rejoint le film liquide présent sur une face α du maillage, est tout simplement donnée par la moyenne des températures des particules film préexistantes sur la face paroi α avant l'impact :

$$\langle \bar{T}_{l,p}^{n+1} \rangle = \frac{1}{S_\alpha} \sum_{i=1}^{nap_\alpha} S_i^n \langle \bar{T}_{l,i}^{n+1} \rangle \quad (7.19)$$

où :

- S_α désigne la surface occupée par l'ensemble des particules de film liquide sur la face paroi α du maillage avant les impacts éventuels.
- nap_α désigne le nombre de particules film présentes sur la face α avant les impacts éventuels.
- S_i^n désigne la surface occupée par la particule film i avant les impacts (instant n).

L'équation 7.19 découle en fait de l'équation de l'énergie interne 7.6 pour les particules qui forment le film liquide. En effet, cette dernière équation suppose un mélange total entre les particules impactantes et les particules préexistantes dans le film liquide. On remarquera par ailleurs que l'équation 7.19 devrait en toute rigueur s'écrire comme une moyenne d'énergie ou d'enthalpie des particules et non comme un moyenne de températures. Cependant, la masse volumique ρ_l du liquide est supposée constante et les différences de capacité calorifique $C_{v,p}$ entre particules sont négligées pour le calcul de $\langle \bar{T}_{l,p} \rangle$ dans l'équation 7.19.

7.4 Profil de température dans le film liquide

L'équation 7.15 de la température moyenne d'une particule de film liquide $\langle \bar{T}_{l,p} \rangle$ basée sur l'hypothèse d'échange de chaleur entre les particules qui impactent et celles qui forment le film liquide et démontrée lors de la section précédente est similaire à celle utilisée dans le modèle OA par O'Rourke et Amsden [45]. Afin de fermer cette équation et de déterminer la température à l'interface liquide-gaz T_s , il est nécessaire de connaître les gradients de température selon la normale au film liquide au niveau de la paroi $\varphi_{l,p}(0)$ et

de la surface du film $\varphi_{l,p}(h_p)$. Pour ce faire, nous allons déterminer le profil de température dans le film liquide en utilisant une méthode intégrale similaire à ce qui a déjà été fait dans NTMIX3D au chapitre 2. Les phases transitoires sont représentées par un profil de température qui suit la pénétration de la chaleur $\delta_p(t)$ dans le film liquide. Lorsque la pénétration de la chaleur a atteint tout le film liquide, le profil choisi correspond à un polynôme du troisième degré. En effet, les travaux effectués en DNS à la section 3.2 du chapitre 3 ont montré la très bonne adéquation entre ce profil et un calcul complet du profil de température dans le film liquide par différences finies. Cela constitue une évolution par rapport au modèle OA qui utilise un profil de température linéaire par morceau variant de la température de la paroi T_P à la température moyenne du film $\langle \bar{T}_{l,p} \rangle$ dans la première moitié du film puis de $\langle \bar{T}_{l,p} \rangle$ à la température d'interface liquide-gaz T_s dans la seconde moitié.

7.4.1 Profil de température dans le film liquide à l'équilibre thermique

Comme c'est le cas dans NTMIX3D (voir chapitre 2), on choisit un profil de température \bar{T}_l dans le film liquide sous la forme d'un polynôme :

$$\bar{T}_l(y) = a(t) + b(t)y + c(t)y^3 \quad (7.20)$$

La configuration correspondant à une pénétration complète de la chaleur ($\delta_p(t) = h_p(t)$) est donnée par la figure 7.6.

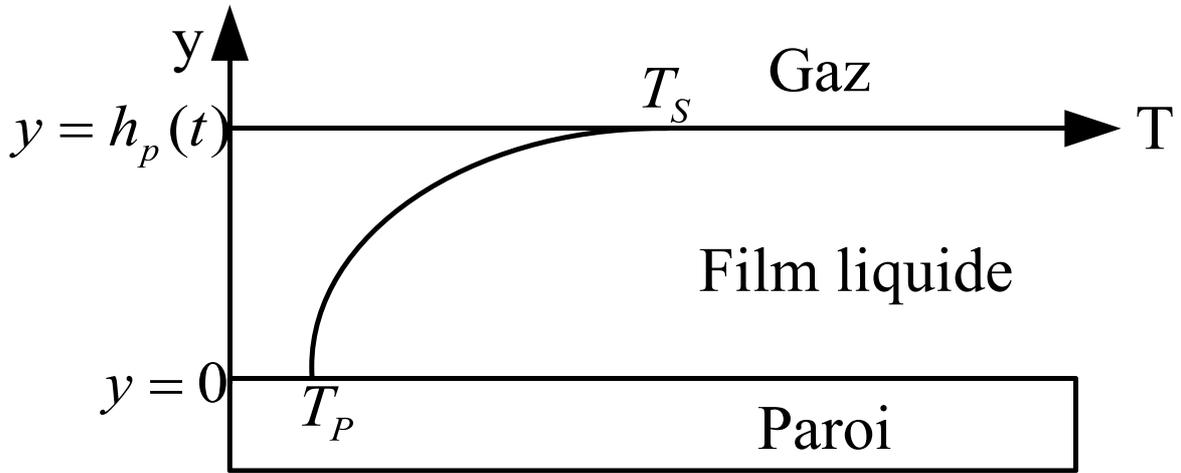


FIG. 7.6 – Profil de température dans le film liquide lorsque $\delta_p(t) = h_p(t)$.

Les conditions aux limites sont donc :

$$CL \begin{cases} \bar{T}_l(y=0) = T_P \\ -\lambda_l \frac{\partial \bar{T}_l}{\partial y} [y=h_p] = \varphi_{l,p}(h_p) = \varphi_{g,s} + \dot{M}_p L_V(T_s) \end{cases} \quad (7.21)$$

où T_P et $L_V(T_s)$ désignent respectivement la température de paroi et la chaleur latente de vaporisation du fuel à la température d'interface liquide-gaz.

Par ailleurs, la température moyenne $\langle \bar{T}_{l,p} \rangle$ d'une particule film peut s'écrire :

$$\langle \bar{T}_{l,p} \rangle = \frac{1}{h_p} \int_0^{h_p} \bar{T}_l(y) dy \quad (7.22)$$

Ainsi, en utilisant les conditions aux limites et la température moyenne d'une particule film, on obtient l'expression du profil de température \bar{T}_l d'une particule p déposée sur une paroi :

$$\begin{aligned} \bar{T}_l(y) = T_P - \frac{1}{5} \left[-\frac{(\dot{M}_p L_V(T_{s,p}) + \varphi_{g,s}) h_p}{\lambda_l} + 12 (T_P - \langle \bar{T}_{l,p} \rangle) \right] \frac{y}{h_p} \\ + \frac{2}{5} \left[-\frac{(\dot{M}_p L_V(T_{s,p}) + \varphi_{g,s}) h_p}{\lambda_l} + 2 (T_P - \langle \bar{T}_{l,p} \rangle) \right] \left(\frac{y}{h_p} \right)^3 \end{aligned} \quad (7.23)$$

On en déduit donc la température $T_{s,p}$ à la surface de la particule film p :

$$T_{s,p} = \frac{\left[8 \langle \bar{T}_{l,p} \rangle - 3T_P - \frac{(\dot{M}_p L_V(T_{s,p}) + \varphi_{g,s}) h_p}{\lambda_l} \right]}{5} \quad (7.24)$$

et, le flux de chaleur $\varphi_{l,p}(0)$ dans la particule p à la paroi :

$$\varphi_{l,p}(0) = \frac{1}{5} \left[-(\dot{M}_p L_V(T_{s,p}) + \varphi_{g,s}) + 12 \frac{(T_P - \langle \bar{T}_{l,p} \rangle) \lambda_l}{h_p} \right] \quad (7.25)$$

Par conséquent, en remplaçant l'expression des flux de chaleur dans l'équation 7.15, on obtient l'expression donnant la température $\langle \bar{T}_{l,p}^{n+1} \rangle$ de la particule p au temps n+1 lorsque la pénétration de la chaleur dans le film est complète :

$$\langle \bar{T}_{l,p}^{n+1} \rangle = \frac{E_{pn} + \frac{6}{5\rho_l} \left[2 \frac{T_P \lambda_l}{h_p^{n+1}} - (\dot{M}_p^{n+1} L_V(T_{s,p}^{n+1}) + \varphi_{g,s}^{n+1}) \right] + E_{imp}}{C_{tot} + \frac{12\lambda_l}{5\rho_l h_p^{n+1}}} \quad (7.26)$$

7.4.2 Profil de température dans le film liquide hors équilibre thermique

La configuration correspondant à une pénétration de la chaleur dans le film est donnée par la figure 7.7, sur laquelle on constate que la pénétration de la chaleur provient à la fois de la paroi et de la surface du film. $T_{\delta,p}$ désigne la température du film à l'endroit non atteint par la pénétration de la chaleur.

Afin de simplifier l'étude de ce cas, on suppose que les profondeurs de pénétration $\delta_{p,1}$ et $\delta_{p,2}$ sont indépendantes. La configuration donnée par la figure 7.7 est ainsi équivalente à la superposition des deux configurations données par les figures 7.8 (cas 1) et 7.9 (cas 2) que l'on peut traiter de façon découplée.

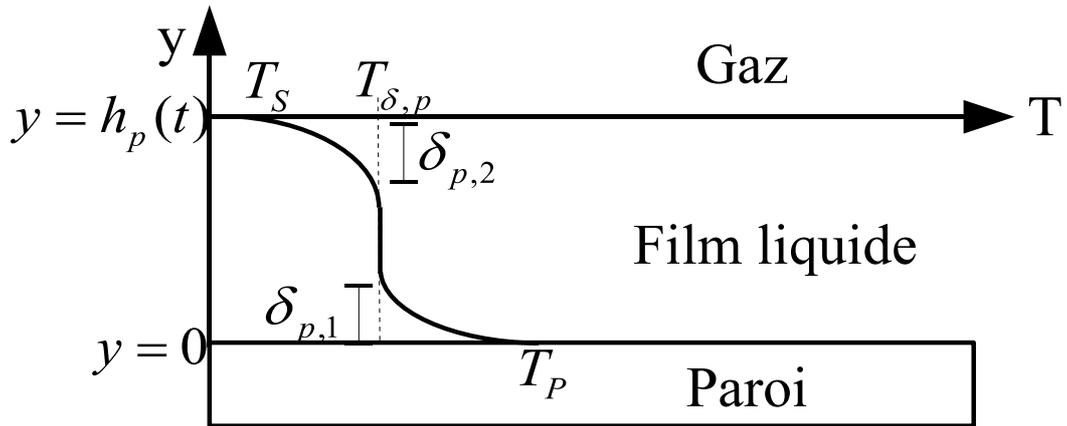


FIG. 7.7 – Profil de température dans le film liquide lorsque $\delta_p(t) = \delta_{p,1}(t) + \delta_{p,2}(t) < h_p(t)$.

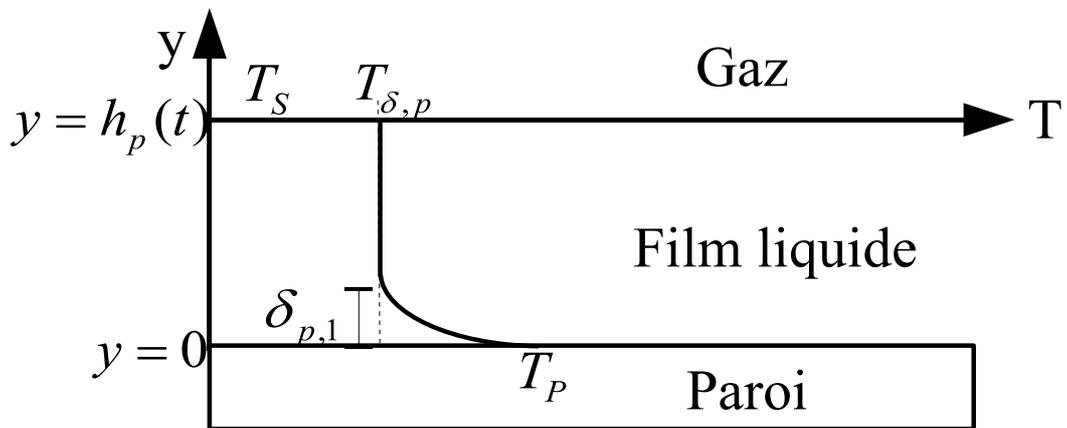


FIG. 7.8 – Cas1 : pénétration de la chaleur de la paroi vers la surface du film.

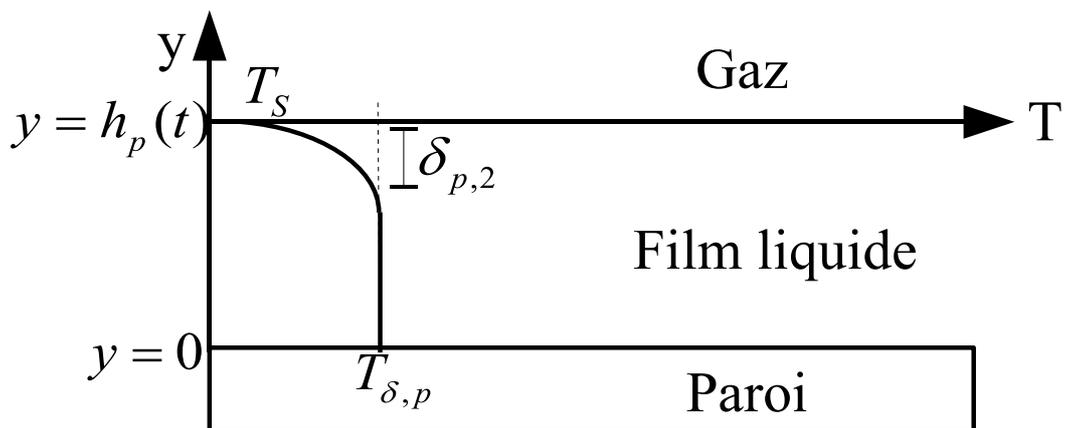


FIG. 7.9 – Cas2 : pénétration de la chaleur de la surface du film vers la paroi.

Avant de passer à l'étude séparée de chacun des cas 1 et 2, nous précisons que le profil de température situé dans la partie du film atteinte par la pénétration de la chaleur est toujours de la forme polynomiale donnée par l'équation 7.20 alors que le profil est uniforme dans le reste du film.

A - Cas 1 : pénétration de la chaleur de la paroi vers la surface du film

D'après la configuration de la figure 7.8, les conditions aux limites sont les suivantes :

$$CL \begin{cases} \bar{T}_l(y=0) = T_P \\ \bar{T}_l(y=\delta_{p,1}) = T_{\delta,p} \\ \frac{\partial \bar{T}_l}{\partial y}[y=\delta_{p,1}] = 0 \end{cases} \quad (7.27)$$

Ainsi, on obtient l'expression du profil de température \bar{T}_l d'une particule film p déposée sur une paroi dans le cas 1 :

$$\begin{cases} \bar{T}_l(y) = T_P - \frac{3}{2} \frac{(T_P - T_{\delta,p})y}{\delta_{p,1}} + \frac{1}{2} \frac{(T_P - T_{\delta,p})y^3}{\delta_{p,1}^3} \text{ si } y < \delta_{p,1} \\ \bar{T}_l(y) = T_{\delta,p} \text{ si } y \geq \delta_{p,1} \end{cases} \quad (7.28)$$

On en déduit le flux de chaleur $\varphi_{l,p}(0)$ dans la particule p à la paroi :

$$\varphi_{l,p}(0) = \frac{3}{2} \lambda_l \frac{(T_P - T_{\delta,p})}{\delta_{p,1}} \quad (7.29)$$

Par ailleurs, la température moyenne $\langle \bar{T}_{l,p,\delta_1} \rangle$ d'une particule film dans le cas 1 peut s'écrire :

$$\langle \bar{T}_{l,p,\delta_1} \rangle = \frac{1}{h_p} \int_0^{h_p} \bar{T}_l(y) dy \quad (7.30)$$

On en déduit l'expression de la profondeur de pénétration $\delta_{p,1}$:

$$\delta_{p,1} = \frac{8 (\langle \bar{T}_{l,p,\delta_1} \rangle - T_{\delta,p}) h_p}{3(T_P - T_{\delta,p})} \quad (7.31)$$

Par conséquent, en remplaçant l'expression des flux de chaleur dans l'équation 7.15, on obtient l'équation donnant la température $\langle \bar{T}_{l,p,\delta_1}^{n+1} \rangle$ de la particule p au temps n+1 dans le cas 1 :

$$C_{tot} \langle \bar{T}_{l,p,\delta_1}^{n+1} \rangle^2 - [E_{pn} + E_{imp} + C_{tot} T_{\delta,p}] \langle \bar{T}_{l,p,\delta_1}^{n+1} \rangle + (E_{pn} + E_{imp}) T_{\delta,p} - F_{\delta} \quad (7.32)$$

et après résolution :

$$\langle \bar{T}_{l,p,\delta_1}^{n+1} \rangle = \frac{E_{pn,\delta_1} + E_{imp} + C_{tot} T_{\delta,p} + S_{g,1} \sqrt{(E_{pn,\delta_1} + E_{imp} - C_{tot} T_{\delta,p})^2 + 4C_{tot} F_{\delta}}}{2C_{tot}} \quad (7.33)$$

où l'on a posé :

$$S_{g,1} = \frac{T_P - T_{\delta,p}}{|T_P - T_{\delta,p}|} \quad (7.34)$$

$$E_{pn,\delta_1} = C_{v,p}^n \frac{\langle \bar{T}_{l,p,\delta_1}^n \rangle h_p^n}{\Delta t} \quad (7.35)$$

$$F_{\delta} = \frac{9\lambda_l (T_P - T_{\delta,p})^2}{16\rho_l h_p^{n+1}} \quad (7.36)$$

B - Cas 2 : pénétration de la chaleur de la surface du film vers la paroi

D'après la configuration de la figure 7.9, les conditions aux limites sont les suivantes :

$$CL \begin{cases} \bar{T}_l(y = h_p - \delta_{p,2}) = T_{\delta,p} \\ \frac{\partial \bar{T}_l}{\partial y} [y = h_p - \delta_{p,2}] = 0 \\ -\lambda_l \frac{\partial \bar{T}_l}{\partial y} [y = h_p] = \varphi_{l,p}(h_p) = \varphi_{g,s} + \dot{M}_p L_V(T_s) \end{cases} \quad (7.37)$$

Pour des raisons de simplicité de calcul, on opère le changement de variable suivant : $y' = -y + h_p$. Cela implique également : $\varphi'_{l,p} = -\varphi_{l,p}$.

Ainsi, on obtient l'expression du profil de température \bar{T}_l d'une particule film p déposée sur une paroi dans le cas 2 :

$$\begin{cases} \bar{T}_l(y') = T_{\delta,p} + \frac{2\varphi'_{l,p}\delta_{p,2}}{3\lambda_l} - \frac{\varphi'_{l,p}y'}{\lambda_l} + \frac{\varphi'_{l,p}y'^3}{3\lambda_l\delta_{p,2}^2} \text{ si } y' < \delta_{p,2} \\ \bar{T}_l(y') = T_{\delta,p} \text{ si } y' \geq \delta_{p,2} \end{cases} \quad (7.38)$$

soit,

$$\begin{cases} \bar{T}_l(y) = T_{\delta,p} - \frac{2\varphi_{l,p}\delta_{p,2}}{3\lambda_l} + \frac{\varphi_{l,p}(h_p-y)}{\lambda_l} - \frac{\varphi_{l,p}(h_p-y)^3}{3\lambda_l\delta_{p,2}^2} \text{ si } y > (h_p - \delta_{p,2}) \\ \bar{T}_l(y) = T_{\delta,p} \text{ si } y \leq (h_p - \delta_{p,2}) \end{cases} \quad (7.39)$$

On en déduit l'expression de la profondeur de pénétration $\delta_{p,2}$ en fonction de la température à la surface $T_{s,p}$ de la particule film p :

$$\delta_{p,2} = \frac{3(T_{\delta,p} - T_{s,p})\lambda_l}{2(\varphi_{g,s} + \dot{M}_p L_V(T_{s,p}))} \quad (7.40)$$

Par ailleurs, la température moyenne $\langle \bar{T}_{l,p,\delta_2} \rangle$ d'une particule film dans le cas 2 peut s'écrire :

$$\langle \bar{T}_{l,p,\delta_2} \rangle = \frac{1}{h_p} \int_0^{h_p} \bar{T}_l(y) dy \quad (7.41)$$

On en déduit l'expression de la température à la surface $T_{s,p}$ de la particule film p :

$$T_{s,p} = T_{\delta,p} - \frac{4}{3} S_{g,2} \sqrt{\frac{(T_{\delta,p} - \langle \bar{T}_{l,p,\delta_2} \rangle) (\varphi_{g,s} + \dot{M}_p L_V(T_{s,p})) h_p}{\lambda_l}} \quad (7.42)$$

où l'on a posé :

$$S_{g,2} = \frac{\varphi_{l,p}(h_p)}{|\varphi_{l,p}(h_p)|} \quad (7.43)$$

On remarquera qu'il est nécessaire que $(T_{\delta,p} - \langle \bar{T}_{l,p,\delta_2} \rangle) \varphi_{l,p}(h_p)$ soit positif pour que l'équation 7.42 admette une solution. Or, cela est vrai si et seulement si $\varphi_{l,p}(h_p)$ garde le même signe durant toute la phase de pénétration de la chaleur dans le liquide.

C'est une des restrictions de la méthode employée qui vient directement de l'incapacité d'un polynôme du troisième ordre à reproduire un changement de signe du gradient de température à l'interface liquide-gaz ! Dans la pratique, lorsque ce cas de figure se présente, on corrige la température $T_{\delta,p}$ de telle sorte que $(T_{\delta,p} - \langle \bar{T}_{l,p,\delta_2} \rangle) \varphi_{l,p}(h_p)$ demeure positif. Cette adaptation entraîne peu de conséquences sur le profil de température puisque la correction de la température $T_{\delta,p}$ est généralement très faible. En effet, un changement de signe de $\varphi_{l,p}(h_p)$ entraîne une évolution de $\langle \bar{T}_{l,p,\delta_2} \rangle$ dans le sens d'un changement de signe de $(T_{\delta,p} - \langle \bar{T}_{l,p,\delta_2} \rangle)$. Le problème rencontré provient simplement de l'inertie de l'évolution de $\langle \bar{T}_{l,p,\delta_2} \rangle$ par rapport au changement brutal de signe du flux de chaleur $\varphi_{l,p}(h_p)$.

On termine cette partie en remplaçant l'expression des flux de chaleur (donnés par les conditions aux limites) dans l'équation 7.15. On obtient ainsi l'expression donnant la température $\bar{T}_{l,p,\delta_2}^{n+1}$ de la particule p au temps n+1 dans le cas 2 :

$$\langle \bar{T}_{l,p,\delta_2}^{n+1} \rangle = \frac{E_{pn,\delta_2} + E_{imp} - \frac{M_p^{n+1} L_V(T_{s,p}^n) + \varphi_{g,s}^{n+1}}{\rho_l}}{C_{tot}} \quad (7.44)$$

où l'on a posé :

$$E_{pn,\delta_2} = C_{v,p}^n \frac{\langle \bar{T}_{l,p,\delta_2}^n \rangle h_p^n}{\Delta t} \quad (7.45)$$

C - Température moyenne $\langle \bar{T}_{l,p} \rangle$ d'une particule film p en fonction de $\langle \bar{T}_{l,p,\delta_1} \rangle$ et $\langle \bar{T}_{l,p,\delta_2} \rangle$

Avant de passer à la partie traitant de la résolution des différentes équations couplées que l'on a mis en évidence depuis le début de ce chapitre, il convient de déterminer la température moyenne $\langle \bar{T}_{l,p} \rangle$ d'une particule film p en fonction de $\langle \bar{T}_{l,p,\delta_1} \rangle$ et $\langle \bar{T}_{l,p,\delta_2} \rangle$. En effet, même si elle n'est pas directement nécessaire pour la détermination du débit évaporé \dot{M} , elle est en revanche indispensable pour assurer la conservation de la température moyenne d'une particule p tout au long d'une simulation numérique. La température moyenne $\langle \bar{T}_{l,p} \rangle$ d'une particule p calculée lors de la phase de pénétration de la chaleur sert plus particulièrement de condition de départ pour la phase suivante.

Il convient de préciser maintenant que dans la pratique, la phase de pénétration de la chaleur ne s'achève pas nécessairement lorsque la profondeur de pénétration de la chaleur $\delta_p(t)$ devient plus grande que l'épaisseur du film liquide $h_p(t)$. En effet, si l'on procède ainsi, on assure nécessairement la continuité de la température moyenne $\langle \bar{T}_{l,p} \rangle$ d'une particule de film p, mais pas de sa température de surface $T_{s,p}$ à cause de la discontinuité de traitement de la chaleur entre la phase transitoire (section 7.4.1) et la phase permanente (section 7.4.2). C'est pourquoi, dans notre modèle, on choisit de transiter de la phase de pénétration de la chaleur vers la phase permanente lorsque la profondeur de pénétration de la chaleur $\delta_p(t)$ devient plus grande que l'épaisseur du film liquide $h_p(t)$ et que l'équation 7.24 donnant la température d'interface liquide-gaz $T_{s,p}$ en fonction de la température moyenne $\langle \bar{T}_{l,p} \rangle$ d'une particule de film p (pour une pénétration complète de la chaleur) est vérifiée. De plus, selon que la profondeur de pénétration de la chaleur $\delta_p(t)$ est plus grande ou non que l'épaisseur du film $h_p(t)$, la température moyenne $\langle \bar{T}_{l,p} \rangle$ d'une particule film p se calcule de façon différente.

La température moyenne $\langle \bar{T}_{l,p} \rangle$ d'une particule film p peut s'écrire :

$$\langle \bar{T}_{l,p} \rangle = \frac{1}{h_p} \int_0^{h_p} \bar{T}_l(y) dy \quad (7.46)$$

Par ailleurs, la température moyenne $\langle \bar{T}_{l,p,\delta_1} \rangle$ d'une particule film p dans le cas 1 peut s'écrire :

$$\langle \bar{T}_{l,p,\delta_1} \rangle = \frac{1}{h_p} \left[\int_0^{\delta_1} \bar{T}_l(y) dy + T_{\delta,p} (h_p - \delta_{p,1}) \right] \quad (7.47)$$

De son côté, La température moyenne $\langle \bar{T}_{l,p,\delta_2} \rangle$ d'une particule film p dans le cas 2 peut s'écrire :

$$\langle \bar{T}_{l,p,\delta_2} \rangle = \frac{1}{h_p} \left[\int_{h_p - \delta_{p,2}}^{h_p} \bar{T}_l(y) dy + T_{\delta,p} (h_p - \delta_{p,2}) \right] \quad (7.48)$$

Ainsi, si $h_p(t) - \delta_{p,2} > \delta_{p,1}$, c'est à dire que la profondeur de pénétration de la chaleur $\delta_p(t)$ est plus petite que l'épaisseur du film $h_p(t)$, on obtient :

$$\langle \bar{T}_{l,p} \rangle = \langle \bar{T}_{l,p,\delta_1} \rangle + \langle \bar{T}_{l,p,\delta_2} \rangle - T_{\delta,p} \quad (7.49)$$

Par contre, si la profondeur de pénétration de la chaleur $\delta_p(t)$ est plus grande que l'épaisseur du film $h_p(t)$, on ne peut plus suivre le raisonnement précédent. Dans ce cas, on utilise tout simplement l'équation 7.15 donnant la température moyenne $\langle \bar{T}_{l,p} \rangle$ d'une particule p avec les flux de chaleur dans le liquide à la paroi $\varphi_{l,p}(0)$ et à la surface du film $\varphi_{l,p}(h_p)$ fournis respectivement par l'équation 7.29 et la dernière équation du système 7.37.

Ainsi, lorsque la profondeur de pénétration de la chaleur $\delta_p(t)$ est plus grande que l'épaisseur du film $h_p(t)$, l'expression de $\langle \bar{T}_{l,p} \rangle$ est donnée par :

$$\langle \bar{T}_{l,p}^{n+1} \rangle = \frac{E_{pn} + E_{imp} + \frac{3}{2} \frac{\lambda_l}{\rho_l} \frac{(T_P - T_{\delta,p})}{\delta_{p,1}} - \frac{M_p^{n+1} L_V + \varphi_{g,s}^{n+1}}{\rho_l}}{C_{tot}} \quad (7.50)$$

7.5 Calcul du débit évaporé \dot{M}

Toutes les équations nécessaires au calcul de la température d'interface liquide-gaz T_s et du débit évaporé \dot{M} ont été établies à travers les lois de paroi développées au chapitre précédent et le profil de température dans le film liquide déterminé lors des sections précédentes de ce chapitre. Il convient de présenter maintenant quelle méthodologie a été employée afin d'intégrer les lois de paroi dans le code de calculs IFP-C3D et comment ces lois ont été couplées avec la thermique dans le film liquide afin de calculer le débit masse évaporé \dot{M} .

7.5.1 Méthodologie d'intégration des lois de paroi dans un code de calcul

Afin d'établir le couplage entre les lois de paroi et les valeurs moyennes de la température du gaz et de la masse de fuel gazeuse fournies par un code de calcul, on résout les équations de conservation de la masse de fuel gazeuse et de l'enthalpie du gaz contenues dans une maille paroi située au-dessus d'un film liquide :

$$\langle \rho_g \bar{Y}_F \rangle_m = \frac{1}{L_m} \int_0^{L_m} \rho_g(y) \bar{Y}_F(y) dy \quad (7.51)$$

$$\langle \rho_g C_p \bar{T} \rangle_m = \frac{1}{L_m} \int_0^{L_m} \rho_g(y) C_p(y) \bar{T}(y) dy \quad (7.52)$$

où les variables affectées de l'opérateur $\langle \dots \rangle_m$ représentent les valeurs moyennes dans une maille paroi m de ces variables. Ce sont des données directement fournies par le code de calcul, et donc disponibles pour notre modèle. L_m désigne la taille d'une maille paroi m dans la direction normale à la paroi. Les profils de masse volumique $\rho_g(y)$, de capacité calorifique $C_p(y)$, de température $\bar{T}(y)$ et de fraction massique de fuel $\bar{Y}_F(y)$ dans le gaz sont quant à eux déduits des lois de paroi établies au chapitre précédent.

La résolution des équations couplées 7.51 et 7.52 fournit simultanément la vitesse de Stephan v_s et le flux de chaleur gazeux $\varphi_{g,s}$ à la surface du film puisque ce sont les deux paramètres libres des lois de parois développées au chapitre précédent. Mis à part l'utilisation de lois de parois spécifiques pour l'évaporation d'un film liquide, la méthodologie présentée dans cette section se distingue de l'intégration classique des lois de paroi dans un code de calcul (comme dans le modèle OA). En effet, cette intégration est habituellement effectuée en assurant l'égalité entre les valeurs (température du gaz et fraction massique du fuel) fournies par les lois parois et par le code de calcul au niveau de la surface du maillage située juste au dessus de la paroi. Cela présente le double inconvénient de manquer de précision (puisque la température du gaz ou la fraction massique de fuel ne sont pas directement calculées à la surface du maillage située juste au-dessus de la paroi) et de ne pas permettre aux profils fournis par les lois de parois d'assurer la conservation de la masse de fuel gazeuse et de l'enthalpie du gaz. Cette dernière constatation interdit d'utiliser les profils de température du gaz et de fraction massique couplés fournis par les lois de parois pour établir un couplage entre la combustion et l'évaporation du film. En outre, les phases transitoires présentes dans la couche limite turbulente ne peuvent être représentées correctement. Grâce à la méthodologie employée dans notre modèle, ces deux inconvénients sont écartés. Cependant, nous verrons qu'une adaptation des lois de paroi est néanmoins nécessaire pour tenir compte des phases transitoires.

En regroupant les équations 6.74, 6.75 et 6.78 du chapitre précédent qui régissent la loi de paroi massique, on obtient le profil explicite de fraction massique de fuel $\bar{Y}_F(y)$ suivant la normale au film liquide :

$$\bar{Y}_F(y) = 1 + (Y_F^s - 1) Hgm(y, v_s^+)^{2C_Y Sct} \quad (7.53)$$

avec :

$$\left\{ \begin{array}{l} Hgm(y, v_s^+) = 1 + \frac{v_s^+ \eta^+ Scl}{hden} \quad \text{si } \eta^+ \leq \eta_{lt,m}^+ \\ Hgm(y, v_s^+) = 1 + \frac{v_s^+}{hden} \left[Scl_{lt} \eta_{lt,m}^+ + \frac{C_u C_Y Sct}{k} \left[\frac{1 + \frac{v_s^+ \eta_{lt,m}^+ Scl_{lt}}{2C_Y Sct}}{1 + \frac{v_s^+ \eta_{lt,m}^+}{2}} \right] \ln \frac{\eta^+}{\eta_{lt,m}^+} \right] \quad \text{si } \eta^+ \geq \eta_{lt,m}^+ \end{array} \right. \quad (7.54)$$

avec :

$$hden = 2C_Y Sct P_m(\rho^+) \quad (7.55)$$

où $P_m(\rho^+)$ désigne une fonction de $\rho^+ = \frac{\rho_g}{\rho_{g,s}}$ qui permet de simplifier l'écriture du modèle LnKc donné par l'équation 6.75 et qui vérifie donc :

$$P_m(\rho^+) Y_{F_{eff}}^+ = \zeta_{eff}^+ = \int_0^{L_m} \frac{\rho_g}{\rho_{g,s}} dY_{F_{eff}}^+ \quad (7.56)$$

En pratique dans le modèle implémenté, $P_m(\rho^+)$ est calculé explicitement avec les données du temps t^n pour une utilisation au temps t^{n+1} . Ainsi, les profils de masse volumique et de fraction massique de fuel sont connus explicitement pour le calcul de $P_m(\rho^+)$. Cela simplifie considérablement l'implantation du modèle LnKc au sein du modèle d'évaporation de film liquide.

De façon analogue, en regroupant les équations 6.14, 6.73, 6.75 et 6.77 du chapitre précédent qui régissent la loi de paroi thermique, on obtient le profil explicite de température $\bar{T}(y)$ dans le gaz suivant la normale au film liquide :

$$\bar{T}(y) = T_s + \frac{\varphi_{g,s}}{r_{ct} v_s^+} \left[1 - HgT(y, v_s^+)^{2C_T Prt} \right] \quad (7.57)$$

avec :

$$r_{ct} = \rho_{g,s} C_p u_\tau \quad (7.58)$$

et :

$$\begin{cases} HgT(y, v_s^+) = 1 + \frac{v_s^+ \eta^+ Prl}{hTden} & \text{si } \eta^+ \leq \eta_{lt,T}^+ \\ HgT(y, v_s^+) = 1 + \frac{v_s^+}{hTden} \left[Prl \eta_{lt,T}^+ + \frac{C_u C_T Prt}{k} \left[\frac{1 + \frac{v_s^+ \eta_{lt,T}^+ Prl}{2C_T Prt}}{\frac{v_s^+ \eta_{lt,T}^+}{1 + \frac{v_s^+ \eta_{lt,T}^+}{2}}} \right] \ln \frac{\eta^+}{\eta_{lt,T}^+} \right] & \text{si } \eta^+ \geq \eta_{lt,T}^+ \end{cases} \quad (7.59)$$

avec :

$$hTden = 2C_T Prt P_T(\rho^+) \quad (7.60)$$

où $P_T(\rho^+)$ désigne une fonction de $\rho^+ = \frac{\rho_g}{\rho_{g,s}}$ qui permet de simplifier l'écriture du modèle LnKc donné par l'équation 6.75 et qui vérifie donc :

$$P_T(\rho^+) T_{eff}^+ = \theta_{eff}^+ = \int_0^{L_m} \frac{\rho_g}{\rho_{g,s}} dT_{eff}^+ \quad (7.61)$$

Ainsi, en remplaçant l'expression du profil de fraction massique de fuel $\bar{Y}_F(y)$ donné par l'équation 7.53 dans l'équation de conservation de la masse de fuel 7.51, on obtient l'équation 7.62 qui fournit la vitesse de Stephan \bar{v}_s en fonction de la fraction massique de fuel à la surface du film Y_F^s et de la vitesse de frottement u_τ :

$$\langle \rho_g \bar{Y}_F \rangle_m = \frac{1}{L_m} \int_0^{L_m} \rho_g(y) \left[1 + (Y_F^s - 1) Hgm(y, v_s^+)^{2C_Y Sct} \right] dy \quad (7.62)$$

De façon analogue, en remplaçant l'expression du profil de température $\bar{T}(y)$ donné par l'équation 7.57 dans l'équation de conservation de l'enthalpie du gaz 7.52, on obtient l'équation suivante :

$$\langle \rho_g C_p \bar{T} \rangle_m = \frac{1}{L_m} \int_0^{L_m} \rho_g(y) C_p(y) \left[T_s + \frac{\varphi_{g,s}}{r_{ct} v_s^+} \left[1 - HgT(y, v_s^+)^{2C_T Prt} \right] \right] dy \quad (7.63)$$

ou encore, écrite avec la température moyenne $\langle \bar{T} \rangle_m$ du gaz dans la maille paroi fournie par le code de calcul :

$$\langle \bar{T} \rangle_m = \frac{\frac{1}{L_m} \int_0^{L_m} \rho_g(y) C_p(y) \left[T_s + \frac{\varphi_{g,s}}{r_{ct} v_s^+} \left[1 - HgT(y, v_s^+)^{2C_T Prt} \right] \right] dy}{\frac{1}{L_m} \int_0^{L_m} \rho_g(y) C_p(y) dy} \quad (7.64)$$

Et après simplifications, on obtient l'expression du flux thermique gazeux à l'interface liquide-gaz $\varphi_{g,s}$ en fonction de la température à la surface du film T_s , de la vitesse de Stephan \bar{v}_s et de la vitesse de cisaillement u_τ :

$$\varphi_{g,s} = r_{ct} v_s^+ \frac{I_{rcp}}{I_{erg}(v_s^+)} \left[\langle \bar{T} \rangle_m - T_s \right] \quad (7.65)$$

avec :

$$I_{rcp} = \frac{1}{L_m} \int_0^{L_m} \rho_g(y) C_p(y) dy \quad (7.66)$$

$$I_{erg}(v_s^+) = \frac{1}{L_m} \int_0^{L_m} \rho_g(y) C_p(y) \left[1 - HgT(y, v_s^+)^{2C_T Prt} \right] dy \quad (7.67)$$

Il convient de noter que les profils de masse volumique $\rho_g(y)$ et de capacité calorifique dans le gaz $C_p(y)$ qui apparaissent dans les équations 7.62 et 7.65 sont calculés à partir des profils de température $\bar{T}(y)$ et de fraction massique de fuel $\bar{Y}_F(y)$ donnés par les équations 7.57 et 7.53. Cependant, afin de simplifier la résolution des équations 7.62 et 7.65, ces profils sont évalués avec un décalage temporel d'un pas de temps Δt (évaluation au temps t^n pour une utilisation au temps t^{n+1} dans les équations 7.62 et 7.65).

En ce qui concerne le couplage entre la vitesse moyenne tangentielle au film \bar{u} fournie par le code de calcul et la loi de paroi dynamique, on résout simplement l'équation suivante dans la mesure où les vitesses moyennes temporelles sont calculés aux noeuds dans le code de calcul RANS IFP-C3D dans lequel notre modèle a été intégré :

$$\bar{u}(y = L_m) = \bar{u}_{L_m} \quad (7.68)$$

où $\bar{u}(y = L_m)$ et \bar{u}_{L_m} sont respectivement la vitesse moyenne tangentielle au film liquide au niveau de la face du maillage situé juste au dessus de la face paroi fournie par la loi de paroi dynamique et fournie directement par le code de calcul.

En regroupant les équations 6.10, 6.72, 6.75 et 6.76 du chapitre précédent qui régissent la loi de paroi dynamique, on obtient le profil explicite de vitesse transversale $\bar{u}(y)$ suivant la normale au film liquide :

$$\bar{u}(y) = u_\tau \frac{\left[1 + \frac{v_s^+}{2P_u(\rho^+)} Hgu(y, u_\tau) \right]^2 - 1}{v_s^+} \quad (7.69)$$

où :

$$\begin{cases} Hgu(y, u_\tau) = \eta^+ & \text{si } \eta^+ \leq \eta_{lt}^+ \\ Hgu(y, u_\tau) = \eta_{lt}^+ + \frac{C_u}{k} \ln \frac{\eta^+}{\eta_{lt}^+} & \text{si } \eta^+ \geq \eta_{lt}^+ \end{cases} \quad (7.70)$$

et $P_u(\rho^+)$ désigne une fonction de $\rho^+ = \frac{\rho_g}{\rho_{g,s}}$ qui permet de simplifier l'écriture du modèle LnKc donné par l'équation 6.75 et qui vérifie donc :

$$P_u(\rho^+) U^+_{eff} = \phi^+_{eff} = \int_0^{L_m} \frac{\rho_g}{\rho_{g,s}} dU^+_{eff} \quad (7.71)$$

Ainsi, l'équation 7.72 écrite en remplaçant l'expression du profil de vitesse transversale $\bar{u}(y)$ donné par l'équation 7.69 dans l'équation 7.68 fournit une expression implicite de la vitesse de cisaillement à l'interface liquide gaz u_τ en fonction de la vitesse de Stephan \bar{v}_s .

$$u_\tau = \frac{\bar{u}_{L_m} v_s^+}{\left[1 + \frac{v_s^+}{2P_u(\rho^+)} Hgu(y = L_m, u_\tau) \right]^2} - 1 \quad (7.72)$$

L'intégration des lois de paroi dans un code de calcul nous a permis de mettre en évidence trois équations couplées 7.62, 7.65 et 7.72 fournissant la vitesse de Stephan \bar{v}_s , le flux thermique gazeux à l'interface liquide-gaz $\varphi_{g,s}$ et la vitesse de cisaillement u_τ en fonction de la température à la surface du film liquide T_s . Il ne reste donc plus qu'à coupler ces équations avec celles qui gouvernent la thermique dans le liquide afin de fermer le système et obtenir à la fois la température à l'interface liquide-gaz T_s et le débit de masse évaporée \dot{M} . Cependant, l'équation dynamique 7.72 fournissant la vitesse de cisaillement u_τ en fonction de la vitesse de Stephan \bar{v}_s est en fait résolue de façon indépendante dans la mesure où les aspects dynamiques du modèle sont déjà en partie inclus dans les lois de paroi thermique et massique. Ainsi, seules les équations 7.62 et 7.65 sont résolues de façon couplée avec les équations de la thermique dans le liquide. Le couplage entre les transferts de masse et d'énergie est en effet très fort puisque le débit de masse évaporé est directement lié à la quantité d'énergie disponible pour compenser la chaleur latente de vaporisation.

7.5.2 Calcul de la température d'interface liquide-gaz T_s et du débit évaporé \dot{M}

Afin de calculer le débit évaporé \dot{M}_p d'une particule film p, nous résolvons le système constitué des quatre équations couplées 7.62 et 7.65 de la phase gazeuse et 7.24 et 7.26 ou 7.42 et 7.44 de la phase liquide, donnant simultanément la température d'interface liquide-gaz $T_{s,p}$, la vitesse de Stephan \bar{v}_s , la température moyenne de la particule $\langle \bar{T}_{l,p} \rangle$ et le flux de chaleur dans le gaz à la surface du liquide $\varphi_{g,s}$.

Etant donné que la résolution d'un système de quatre équations peut s'avérer lourd et coûteux en temps de calcul, nous allons réduire ce système au minimum d'équations possible. Pour cela, il faut distinguer deux cas distincts selon l'évolution de la pénétration de la chaleur dans le film liquide (en cours ou complète). Nous verrons que dans le cas d'une thermique quasi stationnaire, le système se réduit à deux équations donnant la

température de surface du film $T_{s,p}$ et la vitesse de Stephan \bar{v}_s , alors qu'il faut ajouter en plus l'équation 7.65 donnant le flux de chaleur dans le gaz à la surface du liquide $\varphi_{g,s}$ dans le cas des transitoires de chaleur dans le liquide.

Avant de poursuivre avec chacun des différents cas, il convient de noter que la fraction massique de fuel à la surface du liquide $Y_F^{s,p}$ est liée à la température $T_{s,p}$, via la pression de vapeur saturante du fuel P_{FS} et la courbe de saturation selon l'expression :

$$Y_F^{s,p} = \frac{P_{FS}W_F}{P_sW_s} \approx \frac{W_F}{W_F + W_{air} \left(\frac{P_s}{P_{FS}} - 1 \right)} \quad (7.73)$$

où P_s désigne la pression à l'interface liquide-gaz, W_F la masse molaire du fuel, W_{air} la masse molaire de l'ensemble des espèces autre que le fuel, et W_s la masse molaire du mélange à la surface du film.

A - Cas d'une pénétration complète de chaleur dans le film liquide : équilibre thermique

En utilisant les équations 7.65, 7.24 et 7.26 donnant respectivement le flux de chaleur gazeux à l'interface liquide-gaz $\varphi_{g,s}$ et les températures $T_{s,p}$ et $\langle \bar{T}_{l,p} \rangle$, on obtient une équation de la température à l'interface liquide-gaz $T_{s,p}$ en fonction de la vitesse de Stephan \bar{v}_s :

$$T_{s,p}^{n+1} = \frac{8[C_{n1} + C_{n2}C_{n3}] - 3T_P - C_{n4}v_s^+ \left[\frac{C_p I_{rcp}}{I_{erg}(v_s^+)} \langle \bar{T} \rangle_m + L_V (T_{s,p}^{n+1}) \right]}{5 - C_{n4}v_s^+ \frac{C_p I_{rcp}}{I_{erg}(v_s^+)}} \quad (7.74)$$

où l'on a posé :

$$C_{n1} = \frac{E_{pn} + E_{imp}}{C_{tot} + \frac{12\lambda_l}{5\rho_l h_p^{n+1}}} \quad (7.75)$$

$$C_{n2} = \frac{6}{5\rho_l \left[C_{tot} + \frac{12\lambda_l}{5\rho_l h_p^{n+1}} \right]} \quad (7.76)$$

$$C_{n3} = \frac{2\lambda_l T_P}{h_p^{n+1}} \quad (7.77)$$

$$C_{n4} = \rho_{g,s} u_\tau \left[8C_{n2} + \frac{h_p^{n+1}}{\lambda_l} \right] \quad (7.78)$$

Ainsi, dans ce cas on obtient la vitesse de Stephan \bar{v}_s et donc le débit évaporé \dot{M}_p d'une particule film p au temps n+1 en résolvant les équations 7.62, 7.73 et 7.74 par une méthode de Newton.

B - Cas d'une pénétration incomplète de chaleur dans le film liquide : phase transitoire

De façon similaire au cas précédent, en utilisant les équations 7.42 et 7.44 donnant respectivement les températures $T_{s,p}$ et $\langle \bar{T}_{l,p,\delta_2} \rangle$, on obtient une équation implicite de la température à l'interface liquide-gaz $T_{s,p}$ en fonction de la vitesse de Stephan \bar{v}_s :

$$T_{s,p}^{n+1} = T_{\delta,p} - \frac{4S_{g,2}}{3} \sqrt{\frac{\left(T_{\delta,p} - \left[\frac{E_{pn,\delta_2} + E_{imp} - \frac{1}{\rho_l} (C_{n5} v_s^+ + \varphi_{g,s}^{n+1})}{C_{tot}} \right] \right) (C_{n5} v_s^+ + \varphi_{g,s}^{n+1}) h_p^{n+1}}{\lambda_l}} \quad (7.79)$$

où l'on a posé :

$$C_{n5} = \rho_{g,s} u_\tau L_V(T_{s,p}) \quad (7.80)$$

Cette équation 7.79 dépend bien uniquement de $T_{s,p}$ et \bar{v}_s puisque le flux de chaleur $\varphi_{g,s}$ s'exprime explicitement en fonction de $T_{s,p}$ et \bar{v}_s grâce à l'équation 7.65.

Ainsi, dans ce cas on obtient la vitesse de Stephan \bar{v}_s et donc le débit évaporé \dot{M}_p d'une particule film p au temps n+1 en résolvant les équations 7.62, 7.65, 7.73 et 7.79 par une méthode de newton.

Le développement d'un modèle d'évaporation de film liquide adapté au formalisme RANS et basé sur des lois de paroi et une méthodologie d'intégration innovantes est donc quasiment complet. Cependant, en l'état actuel, le modèle présenté jusqu'ici ne permet pas de prendre en compte les phénomènes transitoires présents dans les couches limites des moteurs automobiles. Il ne reste donc plus qu'à adapter les lois de paroi et le modèle à la gestion des phases transitoires afin d'en achever le développement. Cela fait l'objet de la section suivante.

7.6 Gestion des phases transitoires dans les couches limites thermique et massique

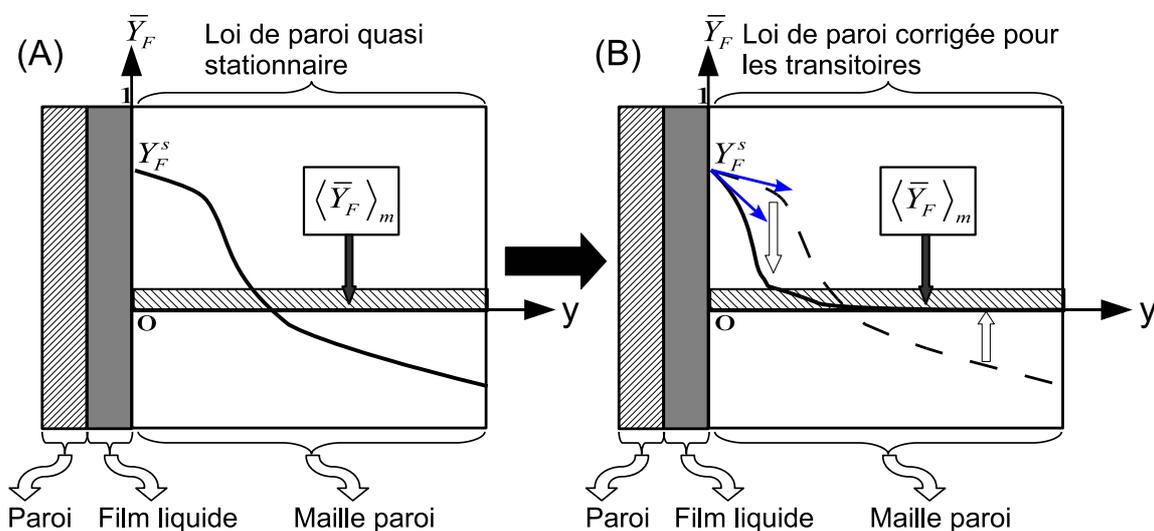


FIG. 7.10 – Correction de la loi de paroi massique durant les phases transitoires.

Les lois de paroi que nous avons développées au chapitre précédent grâce aux DNS sont basées sur une hypothèse de quasi stationnarité. De ce fait, les profils de fraction massique et de température issus de ces lois ne sont pas adaptés aux phases transitoires que l'on rencontre nécessairement dans les moteurs automobiles. En effet, la pression et la température dans la chambre de combustion évoluent continuellement au cours d'un cycle moteur entraînant une grande variation de la fraction massique de fuel à la surface du liquide Y_F^s et de la température moyenne du gaz dans les mailles paroi $\langle \bar{T} \rangle_m$, surtout lorsque la combustion atteint ces dernières. Par ailleurs, la richesse du gaz situé au dessus du film liquide évolue au cours la formation, de l'évaporation et du déplacement de ce dernier à la surface du piston ou du cylindre. Ainsi, durant ces phases transitoires, la couche limite turbulente (particulièrement massique) n'est pas encore établie de façon quasi stationnaire. En particulier, le mélange gazeux dans les mailles paroi est généralement très pauvre au moment de la formation du film. C'est également le cas lorsque le film se déplace d'une zone dans laquelle il s'est évaporé (donc assez riche) vers une zone préalablement dépourvue de film (donc souvent très pauvre). Dans ces cas de figure, le profil de fraction massique de fuel $\bar{Y}_F(y)$ selon la normale à la paroi donné par l'équation 7.53 est tellement inadapté qu'il peut devenir négatif afin de conserver la masse de fuel dans la maille paroi comme l'illustre le schéma A de la figure 7.10.

Afin de pallier ce problème, on corrige le profil de fraction massique de fuel $\bar{Y}_F(y)$ en l'empêchant de devenir négatif tout en restant conservatif comme l'illustre le schéma B de la figure 7.10. Ainsi, le profil de \bar{Y}_F devient plus raide à la surface du film et donc l'évaporation plus forte dans ce cas, ce qui nous semble plus conforme à la réalité.

D'un point de vue formel, l'équation 7.53 fournissant le profil de fraction massique de fuel $\bar{Y}_F(y)$ suivant la normale à la paroi devient donc dans le cas général :

$$\bar{Y}_F(y) = \max\left(0, 1 + (Y_F^s - 1) Hgm(y, v_s^+)^{2C_Y Sct}\right) \quad (7.81)$$

Par conséquent, l'équation 7.62 qui fournit la vitesse de Stephan \bar{v}_s en fonction de la fraction massique de fuel à la surface du film Y_F^s et de la vitesse de frottement u_τ devient :

$$\langle \rho_g \bar{Y}_F \rangle_m = \frac{1}{L_m} \int_0^{L_m} \rho_g(y) \max\left(0, \left[1 + (Y_F^s - 1) Hgm(y, v_s^+)^{2C_Y Sct}\right]\right) dy \quad (7.82)$$

Sous cette forme, l'équation 7.82 conduit (à la convergence du processus itératif) à un gradient de fraction massique de fuel \bar{Y}_F à la surface du film plus fort et donc à une évaporation plus intense comme cela a été souligné ci-dessus.

Le problème de gestion des transitoires par les lois de paroi est similaire pour la température. L'unique différence réside dans le fait que le profil de température $\bar{T}(y)$ fourni par l'équation 7.57 ne prend jamais de valeurs non physiques contrairement au profil quasi stationnaire de fraction massique de fuel. Néanmoins, des phases transitoires existent bel et bien dans la couche limite thermique, notamment lorsque la combustion a lieu à proximité du film liquide. Il est ainsi plus délicat de déterminer une limite pour le profil de température comme nous l'avons fait pour le profil de fraction massique de fuel. Afin d'établir cette température limite T_{lim} , on suppose que l'évolution de la température dans la couche limite est quasiment monotone sur plusieurs mailles à condition toutefois que ce soit possible. Pour cela, il faut que la condition donnée par l'équation 7.83 suivante soit vérifiée :

$$|\langle \bar{T} \rangle_{2m} - T_s| > |\langle \bar{T} \rangle_m - T_s| \quad (7.83)$$

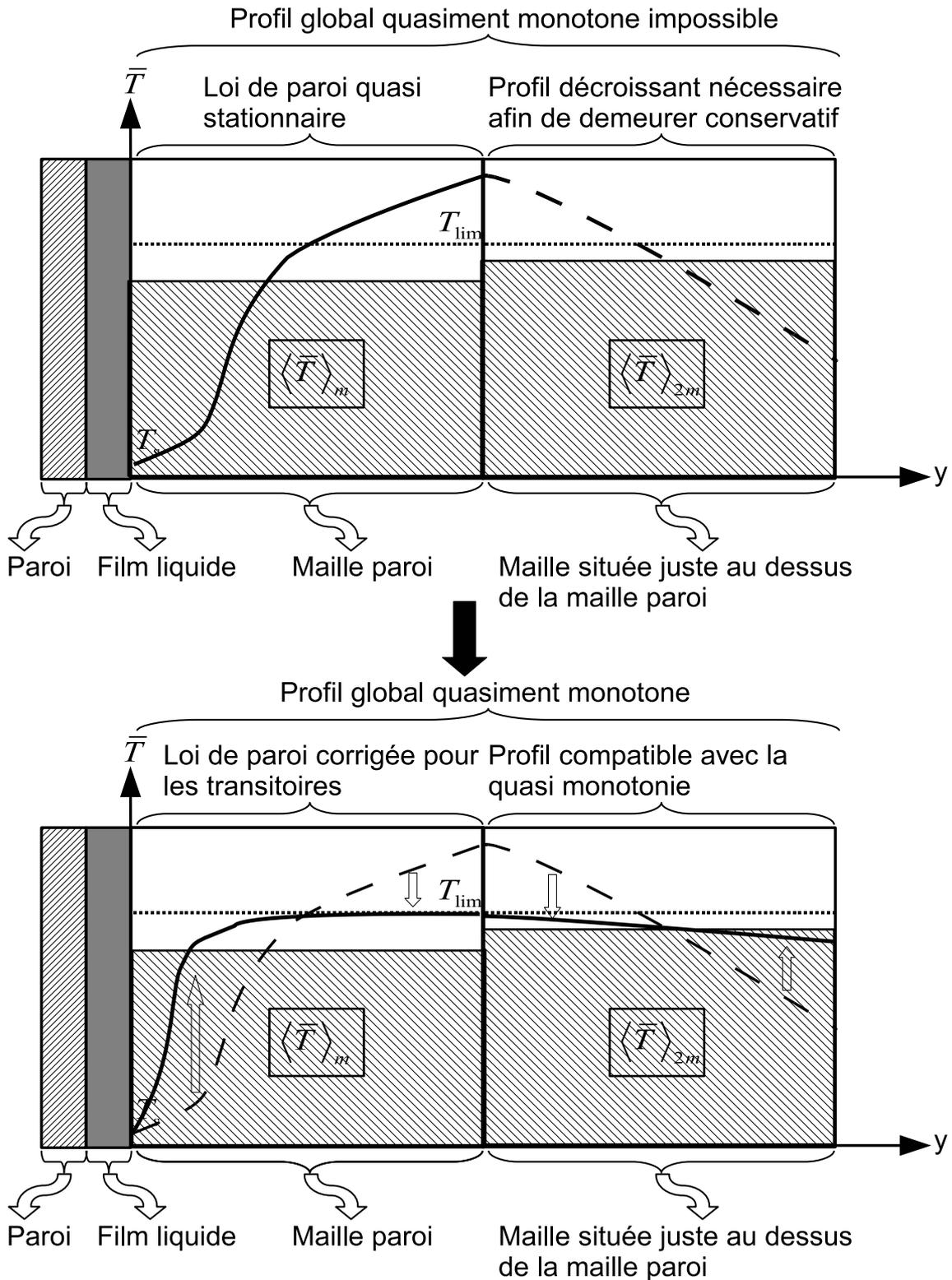


FIG. 7.11 – Correction de la loi de paroi thermique durant les phases transitoires.

où $\langle \bar{T} \rangle_{2m}$ désigne la température moyenne du gaz dans la maille située juste au-dessus de la maille paroi. Dans le cas contraire aucune limite n'est appliquée au profil de température par manque d'informations compatibles.

Ainsi, si la condition de l'équation 7.83 est vérifiée, la limite T_{lim} du profil de tempéra-

ture dans la maille paroi est nécessairement une valeur proche de la température moyenne du gaz dans la maille située juste au dessus de la maille paroi $\langle \bar{T} \rangle_{2m}$ comme l'illustre la figure 7.11. Dans la pratique, la température limite T_{lim} est donnée par l'équation suivante :

$$T_{lim} = (1 + K_{lim}) \langle \bar{T} \rangle_{2m} \quad (7.84)$$

où K_{lim} est une constante laissée à l'appréciation de l'utilisateur et qui constitue un paramètre d'entrée du modèle d'évaporation de film liquide. Dans les cas moteurs qui seront présentés au chapitre 9, la valeur de K_{lim} a été fixée à 0.1. Par ailleurs, une étude de sensibilité de cette constante a été effectuée en testant le modèle avec $K_{lim} = 0$ afin d'évaluer le niveau d'incertitude engendré par l'introduction de cette constante. On notera que plus la constante K_{lim} est élevée moins le modèle est contraignant sur les transitoires et donc moins ceux-ci seront pris en compte. Dans la limite d'une constante K_{lim} très grande, les transitoires de température ne sont plus du tout pris en compte par le modèle.

Une fois cette température limite T_{lim} établie, on corrige le profil de température $\bar{T}(y)$ dans la maille paroi en l'empêchant de dépasser T_{lim} tout en restant conservatif comme l'illustre le schéma du bas de la figure 7.11.

D'un point de vue formel, l'équation 7.57 fournissant le profil de température $\bar{T}(y)$ suivant la normale à la paroi devient donc :

$$\bar{T}(y) = F \left(T_{lim}, T_s + \frac{\varphi_{g,s}}{r_{ct} v_s^+} \left[1 - HgT(y, v_s^+)^{2C_T Prt} \right] \right) \quad (7.85)$$

où F désigne respectivement la fonction *min* ou *max* suivant que le profil de température $\bar{T}(y)$ dans la maille paroi est respectivement croissant ou décroissant.

Par conséquent, l'équation 7.65 qui fournit l'expression du flux thermique gazeux à l'interface liquide-gaz $\varphi_{g,s}$ en fonction de la température à la surface du film T_s , de la vitesse de Stephan \bar{v}_s et de la vitesse de cisaillement u_τ devient l'équation implicite suivante :

$$I_{erg}(v_s^+, \varphi_{g,s}) = I_{rcp} [\langle \bar{T} \rangle_m - T_s] \quad (7.86)$$

avec :

$$I_{erg}(v_s^+, \varphi_{g,s}) = \frac{1}{L_m} \int_0^{L_m} \rho_g(y) C_p(y) F \left(T_{lim} - T_s, \frac{\varphi_{g,s}}{r_{ct} v_s^+} \left[1 - HgT(y, v_s^+)^{2C_T Prt} \right] \right) dy \quad (7.87)$$

L'implémentation de l'équation 7.86 est très difficile à réaliser sans alourdir énormément le modèle d'évaporation de film liquide, notamment à cause de son caractère implicite. C'est pourquoi dans la pratique, on applique simplement une correction au flux de chaleur $\varphi_{g,s}^{n+1}$ calculé au temps $t^n + 1$ avec l'équation 7.65. Cette correction correspond à la modification du profil de température $\bar{T}(y)$ au temps t^n . Ainsi, on découple la correction du flux de chaleur lors des transitoires de température dans le gaz de la résolution des équations couplées fournissant la température à la surface du film T_s et le débit de masse évaporée \dot{M} .

L'avantage de cette façon de corriger les lois de paroi est que l'on conserve la structure de la couche limite au voisinage de la surface du film liquide. En particulier, le soufflage de la couche limite par la vitesse de Stephan est conservé. Cela correspond bien aux

observations des résultats des DNS durant la phase transitoire qui montrent que la couche limite est très rapidement soufflée au voisinage immédiat du film liquide. En effet, cela signifie que le temps caractéristique d'établissement de la forme des profils de fraction massique, température et vitesse juste au dessus de la surface du film liquide est très court devant le temps caractéristique d'évolution de la masse de fuel ou de la température globale dans une maille paroi.

Finalement, nous avons établi un modèle d'évaporation de film liquide qui tient compte de la majorité des contraintes rencontrées dans les moteurs automobiles comme les transitoires dans le film liquide et dans la couche limite située au dessus de ce dernier. Notre modèle se distingue ainsi largement du sous modèle d'évaporation OA. En effet, ce dernier ne tient pas compte des transitoires, utilise un profil de température dans le film liquide et des lois de paroi simplifiées. En outre, la méthodologie d'intégration de ces lois est classique et donc très différente de celle employée dans notre modèle. Cependant, le travail présenté lors des six premières sections de ce chapitre ne permet en rien d'assurer la validité de notre modèle ni même d'évaluer le gain de prédictibilité apporté par rapport au modèle OA. La section suivante va donc pallier ce manque en présentant une validation du modèle ainsi qu'une comparaison de résultats avec le modèle OA. Par contre, il ne s'agira pas d'une validation complète du modèle. En effet, par manque de mesures expérimentales sur des cas académiques, seule la partie concernant l'intégration des lois de paroi dans le code IFP-C3D sera validée.

7.7 Validation du modèle de film liquide implémenté dans le code de calcul IFP-C3D

7.7.1 Méthodologie

Comme nous n'avons pas trouvé des données expérimentales permettant de valider le modèle d'évaporation de film liquide dans sa globalité, une validation partielle a été faite. Elle concerne les lois de paroi décrites à la section 6.7 du chapitre 6 et leur intégration dans le code IFP-C3D décrite dans la section 7.5 de ce chapitre. Pour ce faire, nous avons utilisé les résultats d'évaporation de film liquide obtenus avec les DNS afin d'effectuer des comparaisons avec les données fournies par le IFP-C3D en utilisant le modèle d'évaporation avec la température d'interface liquide-gaz T_s fixée. En réalité, nous n'avons pas effectué des comparaisons avec tous les cas de DNS mais uniquement avec le cas 2 de la section 6.5 du chapitre 6 qui constitue notre référence. Le choix d'une configuration RANS fournissant des résultats comparables avec ceux des DNS n'est pas évident. Il est en effet très complexe de simuler un canal turbulent périodique avec le code IFP-C3D en raison de la nécessité d'introduire des sources. L'approche adoptée a donc consisté à calculer un vrai canal avec une entrée et une sortie, mais qui se rapproche le plus possible de celui que nous avons utilisé dans les calculs DNS. La configuration utilisée en RANS avec le code IFP-C3D est donnée sur le schéma de la figure 7.12 où la demi hauteur h du canal est identique à celle du cas DNS utilisé pour les comparaisons. Le maillage utilisé est régulier dans toutes les directions avec $(192 \times 8 \times 1)$ cellules de telle sorte que la partie supérieure de la maille paroi se trouve dans la région pleinement turbulente de la couche limite (qui débute à $\Delta\eta^+ \approx 21.5$ d'après les résultats de DNS du chapitre précédent pour le cas considéré). La condition limite d'entrée du canal est simplement constituée par des profils uniformes de vitesse, de température et de fraction massique d'heptane, d'azote

et d'oxygène dont les valeurs sont spécifiées sur la figure 7.12. A l'autre extrémité, une condition limite de pression \bar{P}_{out} imposée est utilisée à la sortie de canal.

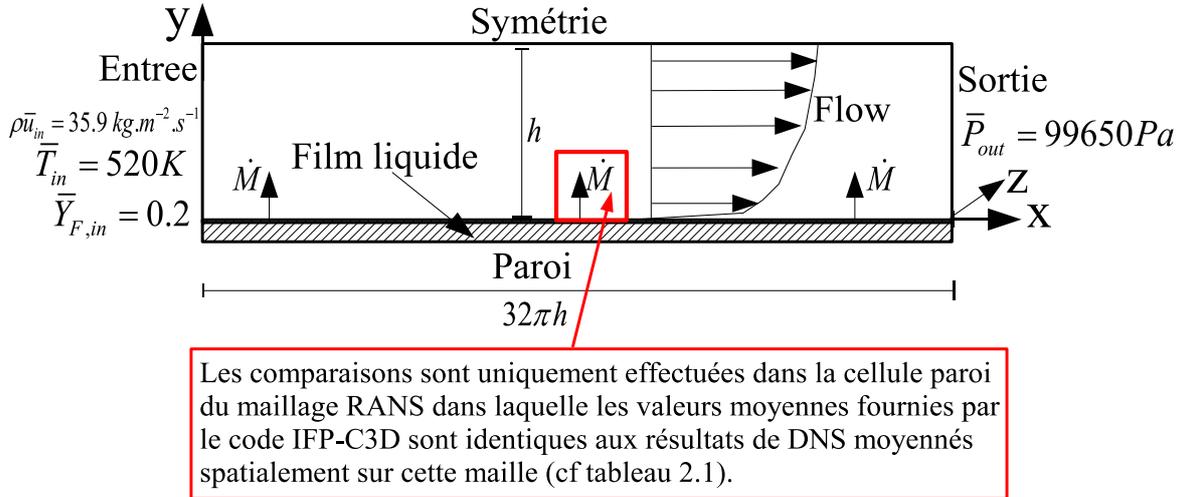


FIG. 7.12 – Domaine de calcul pour les simulations effectuées avec IFP-C3D.

Bien que la longueur du canal utilisé pour les calculs RANS (visible sur la figure 7.12) soit plus importante que celle utilisée dans les DNS, la comparaison des résultats le long de la totalité de la hauteur du canal n'est pas évidente à obtenir. En effet, l'évaporation et les flux de chaleur dans le film liquide empêchent la couche limite d'être pleinement développée sur une largeur suffisante du canal. C'est pourquoi, la comparaison des résultats RANS et DNS a été limitée à la maille paroi du canal RANS dans laquelle les valeurs moyennes de la température $\langle \bar{T} \rangle_m$, pression $\langle \bar{P} \rangle_m$, masse volumique du fuel $\langle \rho_g \bar{Y}_F \rangle_m$ et vitesse selon l'axe du canal \bar{u}_m sont identiques à celles données par la DNS (comme indiquée sur la figure 7.12). Ces conditions sont résumées dans le tableau 7.1.

$\langle \bar{P} \rangle_m = 99750 Pa$	$\langle \bar{T} \rangle_m = 400.8 K$
$\langle \rho_g \bar{Y}_F \rangle_m = 0.52 kg.m^{-3}$	$\bar{u}_m = 35.9 m.s^{-1}$

TAB. 7.1 – Résultats de DNS moyennés spatialement sur la hauteur totale d'une cellule paroi du maillage RANS (pour la DNS du cas 2 de la section 6.5 du chapitre 6).

7.7.2 Analyse des résultats

Dans cette partie, les résultats issus du modèle d'évaporation présenté dans ce chapitre (modèle GD) sont comparés avec ceux des DNS et également avec les résultats fournis par le modèle OA également implémenté dans le code IFP-C3D selon la méthodologie de la sous section précédente. Les comparaisons sont effectuées pour la vitesse de frottement

u_τ et les flux de chaleur $\varphi_{g,s}$ et de masse \dot{M} à la surface du film et exposées dans les tableaux 7.2 et 7.3. Pour chaque simulation (modèle GD ou modèle OA), les conditions limites à l'entrée du canal ont été ajustées afin d'obtenir les valeurs du tableau 7.1 dans la maille paroi choisie pour effectuer les comparaisons.

Variabes	u_τ	$\varphi_{g,s}$	\dot{M}
Unités	$[m.s^{-1}]$	$[kJ.m^{-2}.s^{-1}]$	$[kg.m^{-2}.s^{-1}]$
Résultats de DNS	1, 52	24, 4	$9, 63.10^{-2}$
Modèle GD	1, 54	22, 8	$9, 17.10^{-2}$
Modèle OA	2, 62	34, 3	$4, 49.10^{-2}$

TAB. 7.2 – Résultats comparatifs entre les modèles RANS (GD et OA) et la DNS (cas 2 de la section 6.5 du chapitre 6).

Variabes	u_τ	$\varphi_{g,s}$	\dot{M}
Modèle GD	+1, 3%	-6, 6%	-4, 8%
Modèle OA	+72, 4%	+40, 6%	-53, 4%

TAB. 7.3 – Erreur relative entre les modèles RANS (GD et OA) et la DNS (cas 2 de la section 6.5 du chapitre 6).

Les tableaux 7.2 et 7.3 montrent que les résultats fournis par le modèle présenté dans cette étude (modèle GD) sont très proches des résultats de DNS avec une erreur maximale inférieure à 7% pour le flux de chaleur à l'interface liquide-gaz. Les différences observées semblent être principalement dues au fait que les profils donnés par les lois de paroi ne sont pas exactement identiques à ceux des DNS dans la zone tampon (voir les figures 6.51, 6.52 et 6.53 de la section 6.7 du chapitre 6). Cela peut expliquer pourquoi l'erreur est plus significative pour les flux de chaleur $\varphi_{g,s}$ et de masse \dot{M} que pour la vitesse de frottement u_τ . En effet, les profils de température et de fraction massique de fuel dans le gaz sont intégrés sur une maille paroi qui contient la zone tampon, pour laquelle la précision des lois de paroi est la pire. Cependant, le modèle GD améliore très nettement la précision des résultats en comparaison du modèle OA. En effet, les résultats fournis par ce dernier sont relativement éloignés de la DNS. C'est d'autant plus vrai que la version du modèle OA implémenté dans IFP-C3D ne tient absolument pas compte du soufflage de la couche limite par l'évaporation pour le calcul de la vitesse de frottement u_τ . Ainsi, la valeur de cette dernière est énormément surévaluée par rapport à la DNS. En conséquence, le flux de chaleur à la surface du film est également largement surévalué comme on le voit dans le tableau 7.3. Cela a tendance à augmenter l'évaporation. Ainsi, le débit de masse évaporée \dot{M} serait encore plus sous évalué que ne le montre le tableau 7.3 si le modèle OA tenait compte du soufflage de la couche limite pour le calcul de u_τ . Tous ces résultats prouvent l'importance qu'il y avait de développer de nouvelles lois de paroi mieux adaptées à l'évaporation d'un film liquide que celles existantes dans la littérature.

7.8 Conclusions

Au cours de cette étude, un modèle d'évaporation de film liquide mono composant a été développé pour une température de paroi plus faible que la température de saturation du liquide (lorsque cette température est dépassée, un modèle d'ébullition de film liquide développé par Habchi prend le relais). Les équations du modèle sont basées sur les lois de paroi développées avec la DNS au chapitre précédent et leur adaptation éventuelle aux phases transitoires lorsque cela est nécessaire et l'utilisation d'un profil de température du troisième ordre dans le film liquide. Les phases transitoires de la thermique dans le film liquide sont également prises en compte. Par ailleurs, ce modèle a été implémenté dans le code de calcul IFP-C3D en utilisant une méthodologie innovante d'intégration des lois de paroi. Enfin, le modèle a été partiellement validé en montrant un très bon accord avec les résultats de DNS. La validation du modèle d'évaporation complet par confrontation avec des mesures expérimentales serait cependant nécessaire. Malheureusement, cela n'a pas été possible au cours de cette thèse dans la mesure où les données expérimentales permettant des comparaisons exploitables sont très rares. On peut néanmoins être rassuré par le travail effectué puisque outre la validation de l'intégration des lois de paroi, la partie thermique du modèle a également été validée de façon indirecte avec NTMIX3D lors de la section 3.2 du chapitre 3. En effet, la très bonne adéquation entre le profil de température utilisé et un calcul complet de la température dans le film liquide par différences finies a été montrée. Enfin, le dernier chapitre de ce manuscrit permettra de comparer les modèles d'évaporation OA et GD sur des simulations réalistes de moteurs automobiles et d'évaluer les évolutions apportées par le nouveau modèle d'évaporation.

Chapitre 8

Modèle de combustion RANS pour l'interaction flamme film liquide

8.1 Introduction

Dans ce chapitre, un modèle d'interaction de la combustion turbulente avec un film liquide de carburant en évaporation va être présenté. Il est basé sur un formalisme RANS et ne concerne que les flammes de prémélange. En effet, les flammes de diffusion et l'auto inflammation n'ont pas été étudiés bien que ces modes de combustion soient présents dans les moteurs diesels. Néanmoins, cela ne signifie pas que l'interaction n'est pas prise en compte pour ces modes de combustion. Elle est tout simplement modélisée de façon indirecte par le calcul de l'évaporation du film liquide qui contrôle la préparation du mélange air/carburant et ainsi la combustion. Ce chapitre est organisé en deux sections. Tout d'abord, une description générale de l'équation donnant le taux de réaction d'une flamme de prémélange en régime turbulent est présentée. Ensuite, une modification du terme de vitesse de consommation locale de flamme S_l de cette équation, basée sur l'analyse des travaux effectués en DNS, est proposée afin de tenir compte de l'interaction de la combustion avec le film liquide.

8.2 Equation du taux de réaction d'une flamme de prémélange dans un formalisme RANS

Une façon de modéliser une flamme de prémélange turbulente est d'utiliser l'approche classique des flammelettes (Cant et al [16]; Candel et al [13], [15], [14]). Dans cette approche, l'interaction de la flamme avec l'écoulement est décrite par deux quantités : une vitesse de consommation locale ou vitesse de flamme laminaire S_l qui caractérise la structure interne de la flamme, et une densité surfacique de flamme qui caractérise le plissement par la turbulence.

Ainsi, comme cela a été proposé par Trouvé et Poinso [57], le taux de réaction moyen peut s'écrire :

$$\overline{w_R} = \rho_{gf}^0 Y_{F,gf}^0 \langle S_l \rangle_S \Sigma \quad (8.1)$$

où :

- $\Sigma = \langle \Sigma' \rangle$ est la densité d'interface entre les gaz frais et les gaz brûlés.
- Σ' est le rapport surface sur volume local.
- $\langle S_l \rangle_S = \langle S_l \Sigma' \rangle / \Sigma$ est la moyenne surfacique de la vitesse de consommation.
- S_l est la vitesse de consommation locale de la flamme.
- ρ_{gf}^0 est la densité initiale dans les gaz frais.
- $Y_{F,gf}^0$ est la fraction massique de fuel initiale dans les gaz frais.
- $\langle \rangle$ désigne une moyenne d'ensemble standard (moyenne selon un plan parallèle à la paroi).

Afin de fermer l'équation 8.1, il faut donc déterminer à la fois la densité surfacique de flamme Σ et la vitesse de consommation moyenne des flammelettes $\langle S_l \rangle_S$.

La densité surfacique de flamme Σ est généralement connue à travers une équation de conservation. Dans le code de calcul IFP-C3D dans lequel nos modèles d'évaporation de film liquide et d'interaction avec la combustion ont été implantés, cette équation est basée sur le modèle CFM ([13], [15]; [10]) qui s'écrit (pour une flamme turbulente monodimensionnelle se propageant dans la direction y normale à la paroi) :

$$\frac{d\Sigma}{dt} = \frac{\partial}{\partial y} \left(\frac{\nu_t}{S_{ct}} \frac{\partial \Sigma}{\partial y} \right) + \alpha_m K_t \Sigma - \beta_m D_\Sigma \Sigma \quad (8.2)$$

où $\frac{\partial}{\partial y} \left(\frac{\nu_t}{S_{ct}} \frac{\partial \Sigma}{\partial y} \right)$ est à la modélisation du terme de diffusion, ν_t est la viscosité turbulente, S_{ct} est le nombre de Schmidt turbulent, $\alpha_m K_t \Sigma$ est la modélisation du terme de production par le taux de contrainte turbulente K_t . $\beta_m D_\Sigma \Sigma$ est le terme de destruction par effet combiné de la propagation et de la courbure de flamme regroupé dans le taux d'annihilation D_Σ , α_m et β_m désignent deux constantes du modèle.

Les différents termes de l'équation 8.2 gouvernant la densité surfacique de flamme Σ sont affectés par le coincement de la flamme engendré par les pertes thermiques et de la modification de la turbulence lors de l'interaction flamme paroi comme l'a montré Bruneaux [11], [12]. Des termes correctifs ont été établis pour adapter le modèle CFM lorsque la flamme interagit avec la paroi. Ces termes ne seront pas détaillés ici. En effet, d'après les résultats obtenus aux chapitre 6 à l'aide de la DNS, nous avons montré que l'évaporation d'un film liquide ne modifie pas l'ordre de grandeur de l'intensité de la turbulence bien que la structure de la couche limite soit largement affectée. Ainsi, on suppose que les termes de l'équation 8.2 sont identiques pour une interaction flamme/film liquide et pour une interaction flamme paroi sèche. Cependant, d'après les résultats de l'interaction flamme/film liquide en régime laminaire présentés au chapitre 3, nous avons observé que l'extinction de la flamme se fait selon un processus bien différent selon que la flamme interagit avec une paroi sèche ou un film liquide. D'une part, la vitesse de flamme laminaire s'effondre à cause des pertes thermiques dans un interaction flamme paroi sèche. D'autre part, lorsque la combustion entre en interaction avec la vapeur de fuel évaporée par le film, la vitesse de flamme laminaire est affectée par la richesse du mélange air/carburant qui augmente rapidement à l'approche du film. Ainsi, selon la température T_s et la pression P_s à la surface du film qui gouvernent la richesse locale du

mélange air/carburant à l'interface liquide-gaz, la flamme aura tendance à s'éteindre dans les fortes richesses présentes à proximité du film ou à subir des pertes thermiques dans le film liquide. Ainsi, le modèle permettant de connaître la moyenne surfacique de la vitesse de consommation $\langle S_l \rangle_S$ à l'approche du film liquide doit permettre de tenir compte :

1. des pertes thermiques éventuelles de la flamme dans le film liquide comme pour une paroi sèche
2. la forte stratification de richesse du mélange air/carburant près du film liquide

Pour ce faire, nous avons combiné le modèle de flamme laminaire établi par Bruneaux ([11], [12]) pour une interaction flamme paroi sèche avec une description de la vitesse de flamme laminaire S_l en fonction de la richesse $\bar{\phi}$ des gaz frais.

8.3 Modèle pour la vitesse de flamme laminaire S_l

Etant donné que pour une interaction flamme paroi sèche, l'extinction de la flamme résulte d'une perte d'enthalpie par la flamme, les travaux de Bruneaux ([11], [12]) ont conduit à la loi de comportement suivante de la moyenne surfacique de la vitesse de consommation $\langle S_l \rangle_S$:

$$\langle S_l \rangle_S = \langle S_l^0 \rangle_m e^{-\gamma_Q \beta \bar{L}_H} \quad (8.3)$$

où $\langle S_l^0 \rangle_m$ désigne la vitesse de flamme laminaire non étirée et sans pertes thermiques moyennée sur une maille paroi. γ_Q est une constante du modèle. β est l'énergie d'activation réduite. \bar{L}_H est la perte d'enthalpie moyenne au niveau de la flamme définie par :

$$\bar{L}_H = \frac{\overline{H_F^0 - H}}{H_F^0 - H_P^0} \quad (8.4)$$

où $H = \sum H_i Y_i$ est l'enthalpie du gaz, H_F^0 est l'enthalpie du carburant à la température des gaz frais, et H_P^0 est l'enthalpie des produits de combustion dans le même état.

Afin de tenir compte de la forte stratification de richesse présente dans la couche limite au dessus du film liquide, il suffit d'utiliser la loi de comportement suivante de la vitesse de flamme laminaire moyenne sans pertes thermiques $\langle S_l^0 \rangle_m$ qui intègre le profil de richesse $\bar{\phi}(y)$ selon la normale à la paroi comme le montre la figure 8.1 :

$$\langle S_l^0 \rangle_m = \frac{1}{L_m} \int_0^{L_m} S_l^0(\bar{\phi}(y)) dy \quad (8.5)$$

où L_m désigne la taille de maille paroi dans la direction y normale à la paroi.

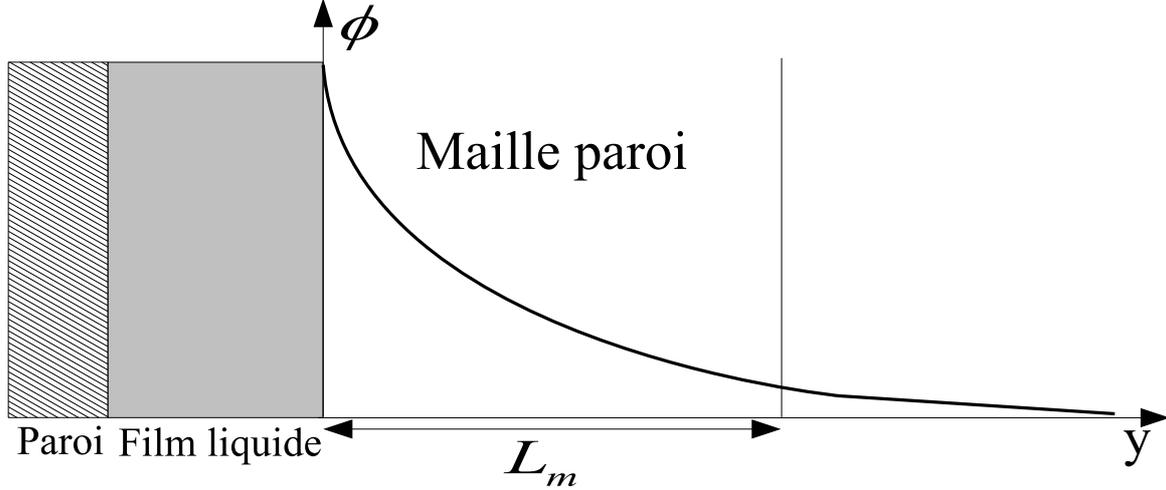


FIG. 8.1 – Représentation du profil de richesse dans la maille paroi située au-dessus du film liquide.

Le profil de richesse $\bar{\phi}(y)$ nécessaire à la fermeture de l'équation 8.5 est établi en supposant un mélange d'air et de carburant et en utilisant la loi de paroi massique établie au chapitre précédent pour obtenir le profil de fraction massique de fuel $\bar{Y}_{F,gf}(y)$ dans les gaz frais. En effet, dans un mélange composé uniquement d'air et de fuel, la fraction massique de l'oxydant $\bar{Y}_{O_2,gf}(y)$ dans les gaz frais s'exprime directement en fonction de la fraction massique de fuel $\bar{Y}_{F,gf}(y)$ par les équations suivantes :

$$\bar{Y}_{O_2,gf}(y) = 1 - \bar{Y}_{F,gf}(y) - \bar{Y}_{N_2,gf}(y) \quad (8.6)$$

$$\bar{Y}_{N_2,gf}(y) = 3.76\bar{Y}_{O_2,gf}(y) \quad (8.7)$$

Par ailleurs, la richesse s'exprime en fonction de la fraction massique de fuel $\bar{Y}_{F,gf}(y)$ et de la fraction massique de l'oxydant $\bar{Y}_{O_2,gf}(y)$ par la relation suivante :

$$\bar{\phi}(y) = S \frac{\bar{Y}_{F,gf}(y)}{\bar{Y}_{O_2,gf}(y)} \quad (8.8)$$

où S désigne ici le rapport de stoechiométrie qui dépend du carburant utilisé.

Ainsi, il ne reste plus qu'à déterminer le profil de fraction massique de fuel $\bar{Y}_{F,gf}(y)$ dans les gaz frais. L'équation qui fournit $\bar{Y}_{F,gf}(y)$ est dérivée de l'équation 7.62 du chapitre 7 dans laquelle on a remplacé la masse moyenne de fuel dans la maille paroi $\langle \rho_g \bar{Y}_F \rangle_m$ par la masse moyenne de fuel dans les gaz frais de cette maille $\langle \rho_{gf} \bar{Y}_{F,gf} \rangle_m$:

$$\langle \rho_{gf} \bar{Y}_{F,gf} \rangle_m = \frac{1}{L_m} \int_0^{L_m} \rho_g(y) \left[1 + (Y_F^s - 1) H g m(y, v_s^\alpha)^{2C_Y Sct} \right] dy \quad (8.9)$$

où tous les termes de l'équation 8.9 ont été définis à la section 7.5. La résolution de cette équation donne lieu à une "pseudo vitesse de Stephan" v_s^α potentiellement différente de la vraie vitesse de Stephan donnée par le modèle d'évaporation dans la mesure où $\langle \rho_{gf} \bar{Y}_{F,gf} \rangle_m$ est généralement différente de $\langle \rho_g \bar{Y}_F \rangle_m$. Ce nouveau paramètre permet en définitive d'ajuster le profil de fraction massique dans les gaz frais afin de conserver la masse de fuel dans les gaz frais.

8.4 Conclusion

Un modèle d'interaction d'une flamme de prémélange avec un film liquide a été développé en calculant une vitesse de consommation moyenne de flamme $\langle S_l \rangle_S$ qui tient à la fois compte des pertes thermiques éventuelles de la flamme dans le film liquide et du profil de richesse dans la couche limite située au-dessus du film liquide. Ce modèle de combustion couplé avec le modèle de film liquide sera noté modèle GD alors que le modèle de film seul sera noté modèle GD2 dans le chapitre suivant consacré à la simulation de deux cas moteurs. On rappelle que le modèle d'évaporation de film liquide développé par O'Rourke et Amsden sera toujours noté modèle OA.

Chapitre 9

Application à des cas moteurs

9.1 Introduction

Afin de mesurer l'impact des modèles d'évaporation de film liquide et de combustion développés dans cette thèse et de mieux comprendre le phénomène d'interaction de la combustion avec un film liquide dans une configuration moteur réelle, des simulations numériques d'un moteur essence et d'un moteur diesel dans lesquels un film liquide à tendance à se former à la surface du piston ont été réalisées. Dans ce chapitre, les résultats obtenus avec différents modèles d'évaporation de film liquide et de combustion (OA, GD2 et GD) et sans modèle de film liquide sont comparés et analysés. Cela nous permet d'étoffer notre compréhension de l'impact de la formation d'un film liquide sur la combustion, les transferts thermiques et le niveau des émissions de polluants. Dans tout ce chapitre, on rappelle que OA désigne le modèle d'évaporation de film développé par O'Rourke et Amsden et implanté dans IFP-C3D, que GD2 désigne le modèle d'évaporation de film développé au cours de cette étude et présenté au chapitre 7 et que GD désigne le modèle GD2 couplé avec le modèle de combustion établi et présenté au chapitre 8. Par ailleurs, on notera que la constante K_{lim} du modèle de transfert thermique (section 7.6) a été choisie égale à 0.1 pour tous les calculs (sauf mention contraire). On estime en effet que la valeur de 0.1 représente la limite supérieure que peut prendre la constante K_{lim} pour modéliser correctement les transferts thermiques. Etant donné que les phénomènes transitoires sont très difficiles à résoudre avec un code RANS, une incertitude demeure. Les différences majeures obtenues avec $K_{lim} = 0$ permettront de mieux cerner le degré d'incertitude introduit par la constante K_{lim} .

9.2 Moteur essence

9.2.1 Présentation

Le moteur essence étudié dans cette section est le premier moteur IDE ou GDI "Gasoline Direct Injection", vendu depuis 1997 par le constructeur automobile Japonais "Mitsubishi". Ce moteur a été conçu pour améliorer à la fois la consommation et les performances des moteurs essence, en introduisant l'essence directement dans la chambre de combustion, au lieu de l'injecter dans les conduites d'admission. Deux modes de combus-

tion sont possibles avec les moteurs IDE : 1. Le mode combustion-homogène : il consiste à injecter le carburant assez tôt dans le cycle moteur (i.e. idéalement durant l'admission d'air pour maximiser le remplissage en refroidissant la charge par l'évaporation du liquide) afin d'obtenir un mélange quasiment homogène au moment de l'allumage de la bougie. 2. Le mode combustion-stratifiée : il consiste à injecter le carburant assez tard dans le cycle moteur (i.e. près du point mort haut de la combustion (PMHC)) afin de confiner le mélange dans une partie du cylindre et d'optimiser la combustion.

Le moteur " Mitsubishi GDI" utilise le mode de combustion homogène pour les pleines charges et le mode de combustion stratifiée pour les charges partielles. C'est ce dernier mode qui, a priori, est le plus prometteur en terme de réduction de consommation de carburant. Mais, c'est lui aussi qui présente le plus de difficultés de calibrage. L'injection étant effectuée près du PMHC, le jet liquide impacte le piston et forme un film liquide à sa surface, qui s'évapore très lentement, notamment lors de démarrage à froid. Le carburant sous forme vapeur est transporté vers la bougie par l'entraînement de l'air généré par le spray et par la forme du bol du piston qui dévie le mélange air-carburant vers la bougie (Figure 9.1). Dans ces conditions, plusieurs auteurs [37], [54] and [33] ont observé une augmentation des émissions d'hydrocarbures imbrûlés (HC) et des suies.

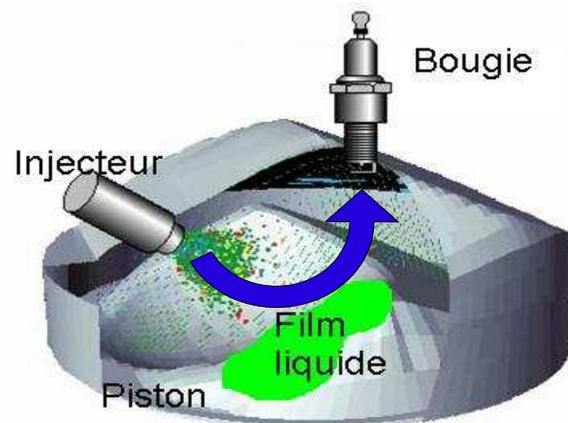


FIG. 9.1 – Schéma de la chambre de combustion du moteur IDE "Mitsubishi".

9.2.2 Simulations

Afin de tester l'apport des développements effectués au cours de cette thèse et d'améliorer la compréhension du mode de combustion stratifiée, plusieurs calculs ont été effectués pour différentes températures de paroi et différents choix de modèles d'évaporation de film liquide et d'interaction avec la combustion (tableau 9.1). Pour chaque cas, deux températures de paroi sont indiquées : la première correspond à la température du piston T_P alors que la seconde correspond à la température du cylindre et de la culasse T_C . Les conditions de fonctionnement du moteur simulé sont données dans le tableau 9.2.

Tous les calculs effectués dans cette section commencent à -149° vilebrequin (149° avant le PMHC) et se terminent à 100° vilebrequin. On estime qu'au début des calculs, la température des gaz dans la chambre de combustion est de 370 K et la pression de 0.8 bars. Un injecteur à swirl, ayant un trou de $900\mu m$ de diamètre et fonctionnant sous une pression de 50 bars, est utilisé pour injecter l'essence dans la chambre de combustion. L'essence est représentée par un pseudo-carburant "gfl1" obtenu par la procédure décrite

dans la référence [27]. Les calculs sont effectués avec une avance d'injection $AVI=74^\circ$ et d'allumage $AVA=28^\circ$ avant le PMHC. Le modèle AKTIM est utilisé pour simuler l'allumage. Le modèle ECFM est utilisé pour calculer la combustion. Pour la turbulence, le modèle $k-\epsilon$ *RNG* est utilisé. Les détails sur les modèles de combustion utilisés peuvent être trouvés dans la référence [19].

Numéro de cas	T_P	T_C	Modèle de film liquide	Couplage avec la combustion	K_{lim}
1	300K	300K	modèle OA	non	0.1
2	300K	300K	modèle GD2	non	0.1
3	300K	300K	modèle GD	oui	0.1
4	370K	350K	aucun	non	0.1
5	370K	350K	modèle OA	non	0.1
6	370K	350K	modèle GD2	non	0.1
7	370K	350K	modèle GD	oui	0.1
8	370K	350K	modèle GD	oui	0
9	480K	420K	modèle OA	non	0.1
10	480K	420K	modèle GD2	non	0.1
11	480K	420K	modèle GD	oui	0.1

TAB. 9.1 – Paramètres des différents cas de calculs.

Régime	2000 tr/min
Remplissage	0.6
Richesse	0.4
Masse injectée	4.5 mg/coup
Pression d'injection	50 bars

TAB. 9.2 – Point de fonctionnement du moteur essence calculé.

Le maillage (figure 9.2) représente la moitié de la chambre de combustion et contient 38937 noeuds et 35869 cellules. Le mouvement de maillage est réalisé à l'aide d'une méthode d'homothétie du maillage initial.

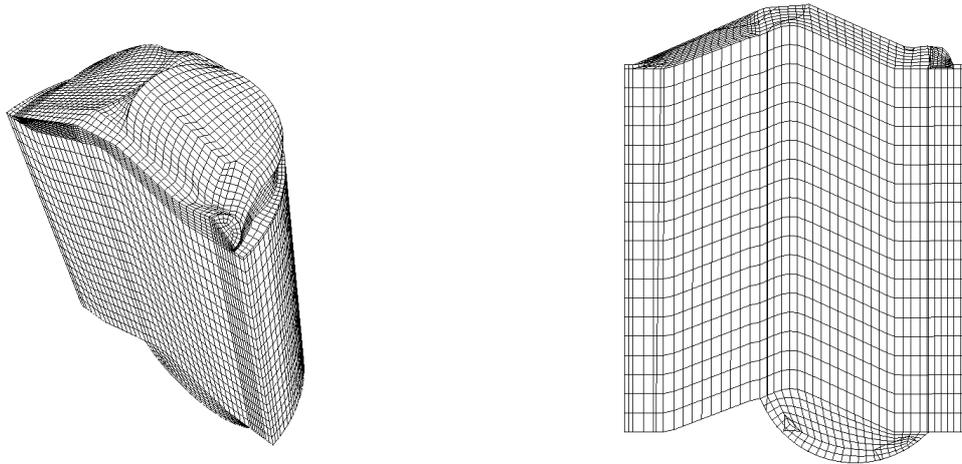


FIG. 9.2 – Maillage non structuré GDI

9.2.3 Résultats

A - Description qualitative

Afin de donner une vision globale des résultats obtenus, une analyse qualitative de la formation du mélange et de la combustion dans un moteur GDI est effectuée pour une température de paroi intermédiaire ($T_P = 370K$ correspondant aux cas 4 à 7 du tableau 9.1). Pour ce faire, les champs 3D de plusieurs variables sont fournis à différents instants du cycle moteur. Sur chaque figure (de 9.3 à 9.10), on trouve trois colonnes d'images. Sur la première colonne (gauche), la chambre de combustion a été coloriée par la température du gaz et le film liquide qui apparaît sous forme de particules par son épaisseur locale. Sur la deuxième colonne (milieu), la chambre de combustion et une coupe de celle-ci ont été coloriées par la richesse du mélange. Le spray a lui été colorié par le rayon de ces particules. Sur la troisième colonne (droite), la chambre de combustion a été coloriée par le dégagement de chaleur de la flamme de diffusion. Chaque ligne d'images correspond quand à elle à l'utilisation d'un modèle différent. De haut en bas, on trouve le cas 4 (sans modèle de film liquide), le cas 7 (modèle GD), le cas 6 (modèle GD2) et le cas 5 (modèle OA). Par contre, tous les cas n'ont pas été fournis à chaque instant correspondant aux figures fournies, mais uniquement ceux qui présentent des différences perceptibles.

• Injection et formation du mélange pendant la phase de compression (de -60° à 0° vilebrequin)

A -60° vilebrequin, le liquide vient d'être injecté sous forme d'un cône creux comme le montre la figure 9.3 (b). Les gouttes les plus grosses se trouvent en l'avant et en périphérie du jet. L'évaporation des particules qui a déjà débuté provoque l'apparition d'une zone de forte richesse au coeur du spray (figure 9.3 (b)) et le refroidissement de la charge (figure 9.3 (a)). Comme aucun film liquide ne s'est encore formé, tous les modèles donnent le même résultat. Ensuite à -30.2° vilebrequin, on peut voir sur les figures 9.4 (b),(c) et (d) que le jet liquide a impacté le bol du piston. Cela a provoqué la formation d'un film liquide lorsque le modèle est activé (figure 9.4 (c)) et la déviation des plus petites particules par l'entraînement d'air généré par le spray vers la culasse et la bougie (figures 9.4 (b)

et (d)). On obtient ainsi une stratification de richesse du bol du piston vers la bougie. La zone la plus riche se trouvant dans le bol du piston et son étendue étant légèrement moins importante avec modèle de film (figure 9.4 (d)) que sans (figure 9.4 (b)) car le film liquide s'évapore moins fortement que les gouttes et de façon plus confinée. A ce stade du cycle les différences entre les différents modèles (OA, GD et GD2) sont négligeables car le film vient de se former. A -20° vilebrequin (figures 9.5), la formation du mélange se poursuit par la dispersion et l'évaporation des gouttes restantes (figures 9.5 (b), (d) et (f)), l'évaporation du film liquide lorsqu'il existe (figures 9.5 (c) et (e)) et le déplacement de la zone riche se trouvant dans le bol du piston vers la bougie par l'entraînement d'air. On constate que la poche de mélange fuel-air formée est beaucoup moins riche avec le modèle de film (figures 9.5 (d) et (f)) que sans (figure 9.5 (b)) surtout dans le bol du piston puisque le film s'évapore beaucoup plus lentement que le spray. On peut également noter que la quantité de film liquide est un peu plus faible avec le modèle OA (figure 9.5 (e)) qu'avec le modèle GD (figure 9.5 (c)) à ce stade du cycle moteur car le modèle OA induit une évaporation plus intense que le modèle GD jusqu'à 30° vilebrequin comme nous le montrerons lors de l'analyse quantitative du film liquide. Par contre, il n'existe aucune différence entre les modèles GD et GD2 puisque la combustion n'a pas encore eu lieu.

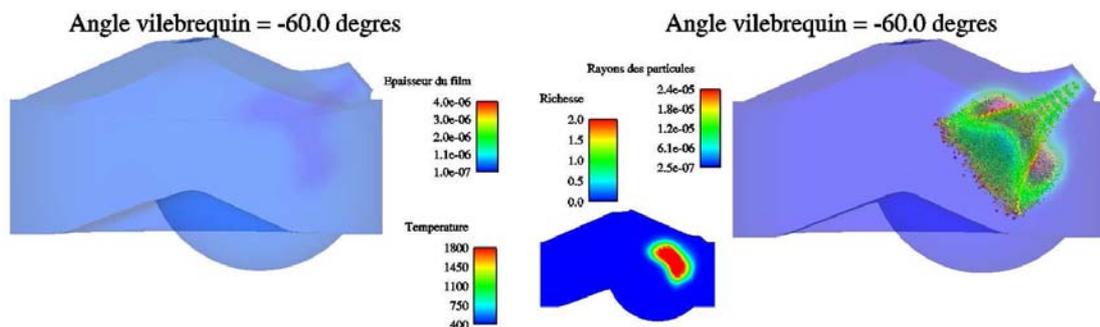
- Combustion pendant le début de la détente (de 0° à 60° vilebrequin)

Les figures 9.6 montrent la situation au point mort haut (0° vilebrequin). On voit que la combustion a débuté et qu'elle commence à se propager depuis la bougie. On constate également que la poche de forte richesse s'est bien dispersée puisqu'elle a pratiquement disparu. En outre, cette poche est beaucoup moins riche avec modèle de film (figures 9.6 (d) et (f)) que sans (figure 9.6 (b)). On peut également remarquer que la quantité de film est toujours plus faible et surtout plus sensible à la combustion avec le modèle OA (figure 9.6 (e)) qu'avec le modèle GD (figure 9.6 (c)) puisque la partie du film située sur le dessous de la culasse à disparu avec le modèle OA. Enfin, il n'existe toujours pas de différences entre le modèle GD et GD2 puisque l'interaction de la combustion avec le film n'a pas encore eu lieu. A 30.2° vilebrequin, la flamme de prémélange a déjà interagit avec le film liquide et visuellement il existe peu de différences qualitatives suivant les modèles utilisés (figures 9.7). On remarque surtout qu'une flamme de diffusion commence à s'installer à proximité du film liquide lorsqu'il existe et que cette flamme est plus intense avec le modèle GD2 (figure 9.7 (l)) qu'avec les autres modèles (vignettes (c) et (f)) à ce moment du cycle moteur. On peut également noter que la quantité de film est toujours plus faible avec le modèle OA (figure 9.7 (j)) qu'avec les autres modèles (figures 9.7 (d) et (g)). A 40° vilebrequin, les figures 9.8 montre que la flamme de diffusion à proximité du film est devenue plus intense avec les modèles GD et GD2 (figures 9.8 (f) et (i)) alors qu'elle s'est pratiquement éteinte avec le modèle OA (figure 9.8 (l)) puisque le film liquide ne s'évapore pas suffisamment avec ce modèle. L'augmentation de l'évaporation du film engendrée par la flamme de diffusion commence à enrichir le mélange dans le bol du piston (figures 9.8 (e), (h) et (k)), surtout si on effectue une comparaison avec le cas sans modèle de film (figure 9.8 (b)). On constate également qu'une poche relativement riche continue de subsister sans film liquide (figure 9.8 (b)) alors que ce n'est pas le cas lorsqu'un film liquide existe (figures 9.8 (e), (h) et (k)). Ensuite, à 60° vilebrequin, les figures 9.9 montrent que l'évaporation du film engendrée par la flamme de diffusion a été beaucoup plus forte avec le modèle GD qu'avec le modèle OA et encore un peu plus intense sans couplage du film avec la combustion (modèle GD2). En effet, on constate qu'une poche de vapeur très riche s'est formée au dessus du film liquide avec le modèle GD2 (figure 9.9 (h)) et dans une moindre mesure avec le modèle GD (figure 9.9 (e)) alors que cette poche est absente sans modèle de film (figure 9.9 (b)) et quasiment inexistante avec le modèle OA (figure 9.9

(k)). Par ailleurs, on peut voir sur les figures 9.9 (d) et (g) que la température du gaz proche de la surface du film est très élevée, ce qui montre que la flamme de diffusion a été intense avec les modèles GD et GD2. En ce qui concerne la flamme de diffusion à ce moment du cycle moteur, on constate qu'elle est quasiment éteinte et persiste uniquement à la périphérie du film liquide avec les modèles GD et GD2 (figures 9.9 (f) et (i)) ou de façon plus uniforme mais très peu intense avec le modèle OA (figure 9.9 (l)).

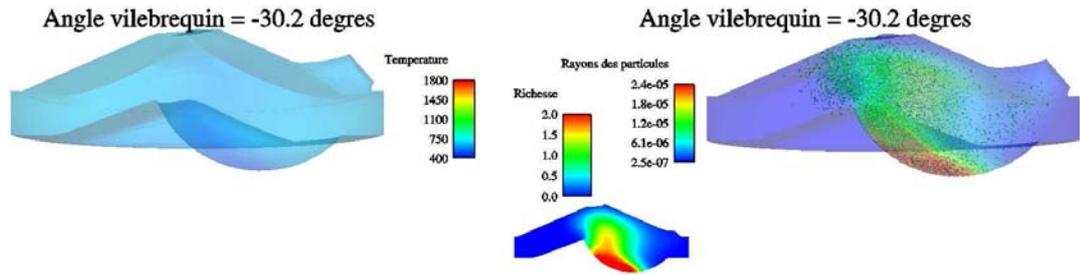
- Poursuite de la détente (de 60° à 100° vilebrequin)

Pour terminer cette analyse qualitative, à 100° vilebrequin, on voit sur les figures 9.10 que la quantité de film est devenue plus faible avec les modèles GD et GD2 (figures 9.10 (d) et (g)) qu'avec le modèle OA (vignette (j)). On remarque également que la vapeur de fuel due à l'évaporation du film s'accumule plus rapidement dans le bol du piston avec les modèles GD et GD2 (figures 9.10 (e) et (h)) qu'avec le modèle OA (figure 9.10 (k)). Par ailleurs, on constate que la richesse du mélange dans la partie gauche de la chambre de combustion est un peu plus élevée sans modèle de film liquide (figure 9.10 (b)) que l'on compare aux figures 9.10 (e), (h) et (k)). Cette observation est le témoin d'une combustion incomplète même sans modèle de film (il reste du fuel imbrûlé). De la même façon, on remarque que l'extension de la zone des hautes températures est plus importante sans modèle de film liquide (figure 9.10 (a)) que l'on compare aux figures 9.10 (d), (g) et (j)). Cela est logique puisqu'une proportion plus importante du fuel initialement injecté a brûlé en l'absence de modèle de film.

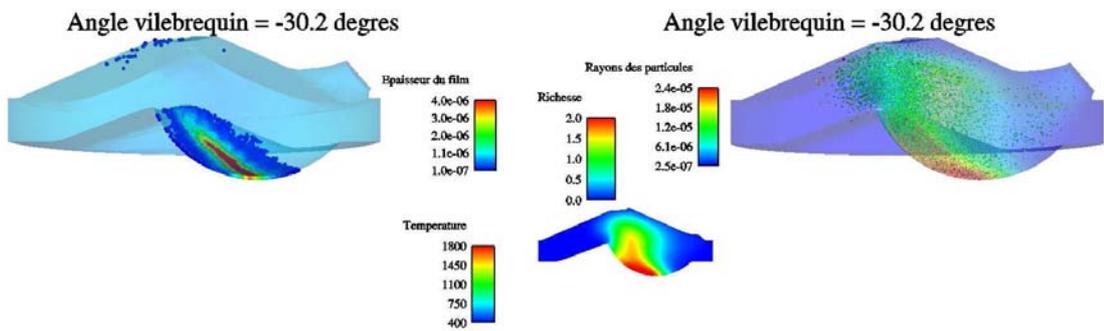


(a) Température du gaz et épaisseur du film liquide. (b) Rayon des particules du spray et richesse du mélange gazeux.

FIG. 9.3 – Champs 3D pour le moteur GDI avec $T_P = 370K$ et le modèle GD activé (cas 7).

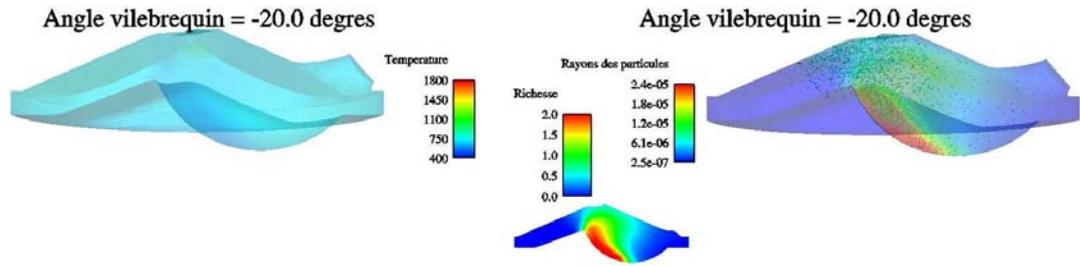


(a) Température du gaz (cas 4 : sans film liquide). (b) Rayon des particules du spray et richesse du mélange gazeux (cas 4 : sans film liquide).

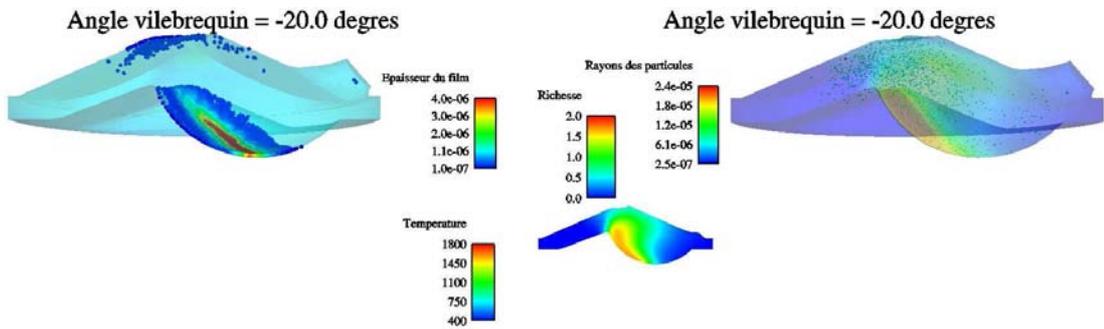


(c) Température du gaz et épaisseur du film liquide (cas 7 : modèle GD). (d) Rayon des particules du spray et richesse du mélange gazeux (cas 7 : modèle GD).

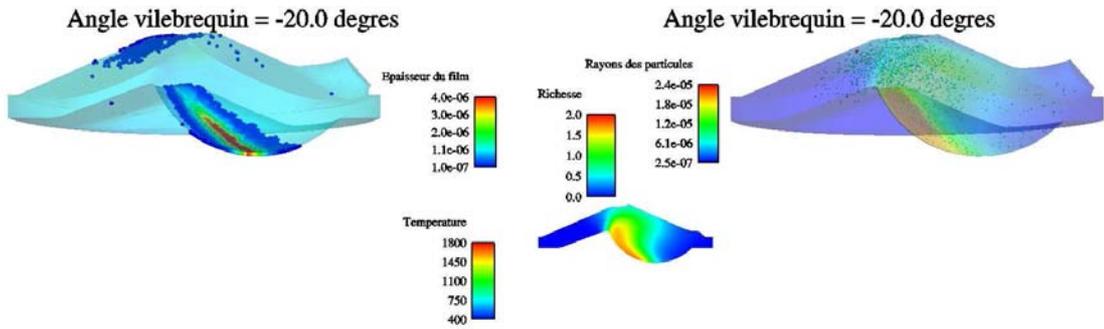
FIG. 9.4 – Champs 3D pour le moteur GDI avec et sans modèle de film liquide et $T_P = 370K$ (cas 4 et 7).



(a) Température du gaz (cas 4 : sans film liquide). (b) Rayon des particules du spray et richesse du mélange gazeux (cas 4 : sans film liquide).

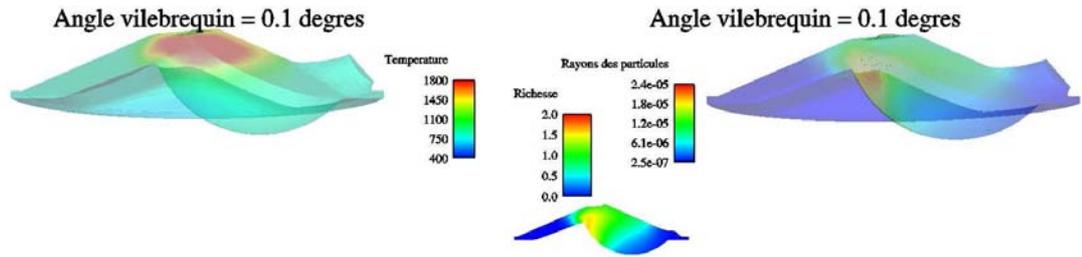


(c) Température du gaz et épaisseur du film liquide (cas 7 : modèle GD). (d) Rayon des particules du spray et richesse du mélange gazeux (cas 7 : modèle GD).



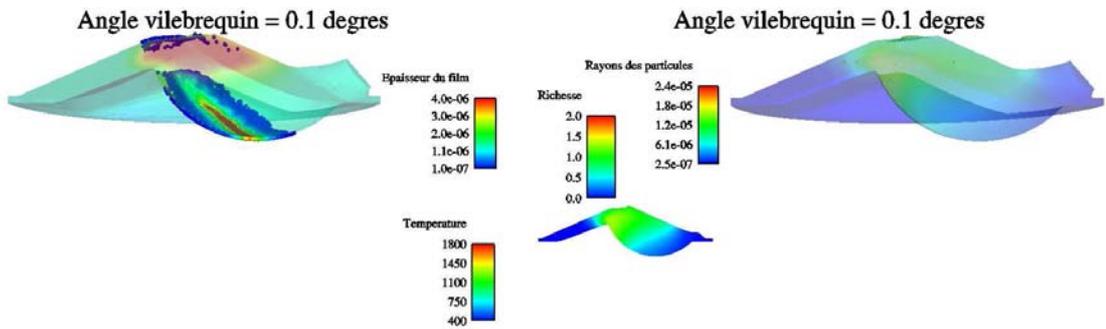
(e) Température du gaz et épaisseur du film liquide (cas 5 : modèle OA). (f) Rayon des particules du spray et richesse du mélange gazeux (cas 5 : modèle OA).

FIG. 9.5 – Champs 3D pour le moteur GDI avec et sans modèle de film liquide et $T_P = 370K$ (cas 4,5 et 7).



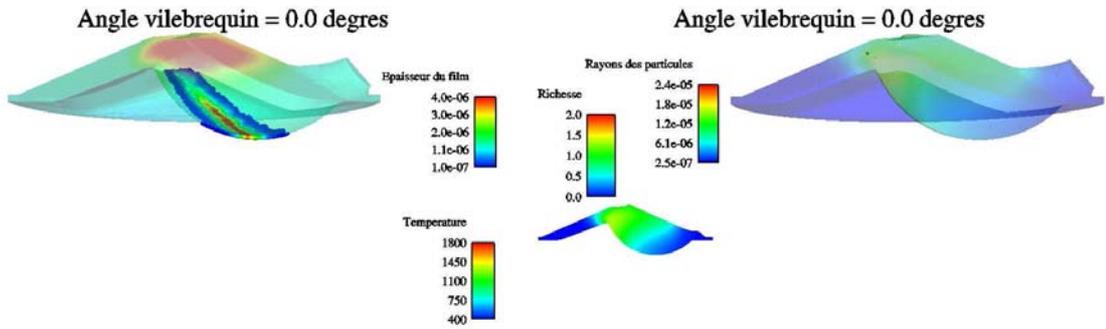
(a) Température du gaz (cas 4 : sans film liquide).

(b) Rayon des particules du spray et richesse du mélange gazeux (cas 4 : sans film liquide).



(c) Température du gaz et épaisseur du film liquide (cas 7 : modèle GD).

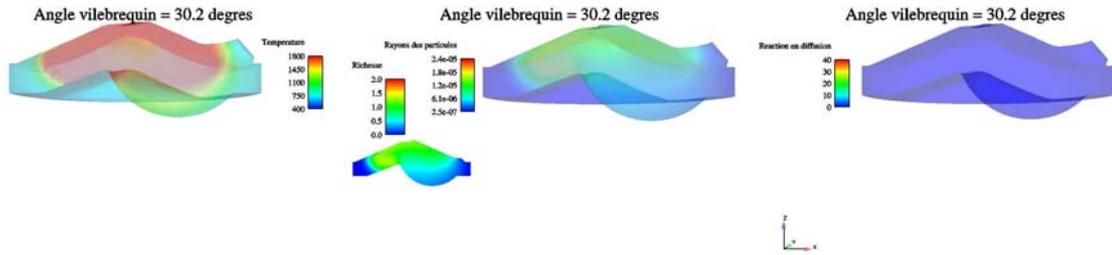
(d) Rayon des particules du spray et richesse du mélange gazeux (cas 7 : modèle GD).



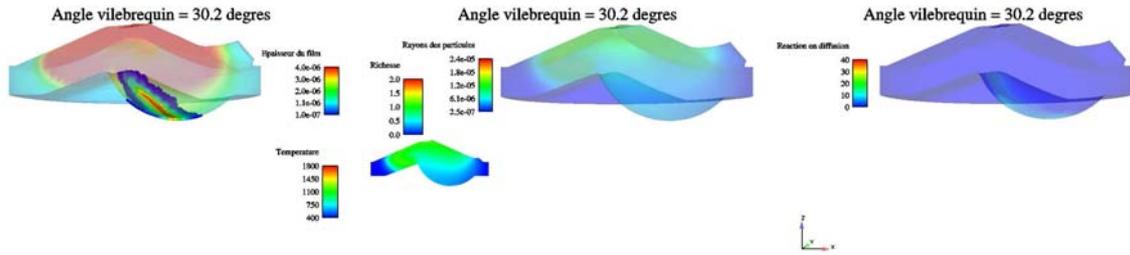
(e) Température du gaz et épaisseur du film liquide (cas 5 : modèle OA).

(f) Rayon des particules du spray et richesse du mélange gazeux (cas 5 : modèle OA).

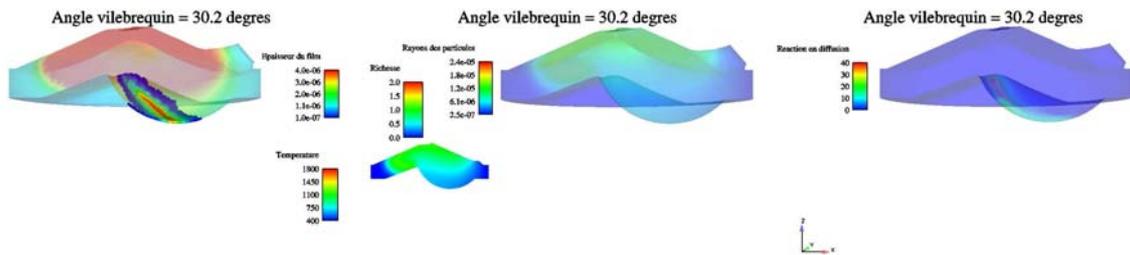
FIG. 9.6 – Champs 3D pour le moteur GDI avec et sans modèle de film liquide et $T_P = 370K$ (cas 4,5 et 7).



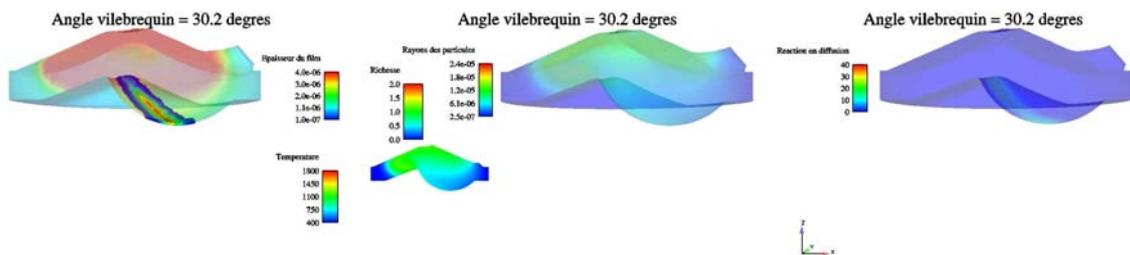
(a) Température du gaz (cas 4 : sans film liquide). (b) Rayon des particules du spray et (c) Dégagement de chaleur par la richesse du mélange gazeux (cas 4 : combustion en diffusion sans film liquide).



(d) Température du gaz et épaisseur du film liquide (cas 7 : modèle GD). (e) Rayon des particules du spray et (f) Dégagement de chaleur par la richesse du mélange gazeux (cas 7 : combustion en diffusion modèle GD).

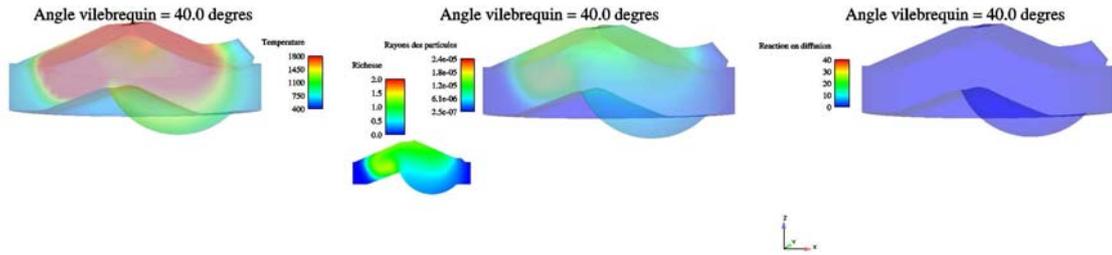


(g) Température du gaz et épaisseur du film liquide (cas 6 : modèle GD2). (h) Rayon des particules du spray et (i) Dégagement de chaleur par la richesse du mélange gazeux (cas 6 : combustion en diffusion modèle GD2).

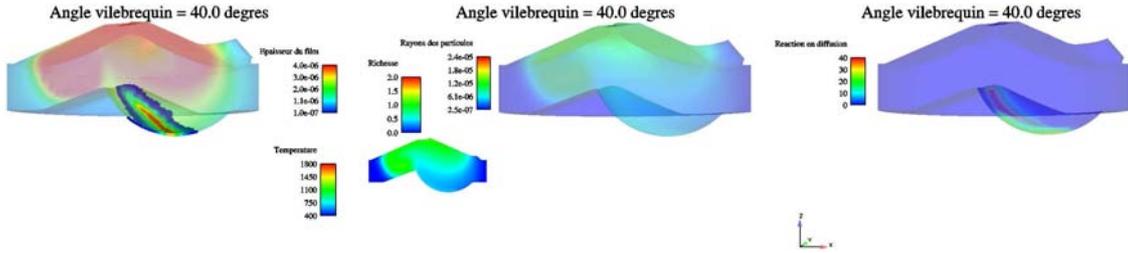


(j) Température du gaz et épaisseur du film liquide (cas 5 : modèle OA). (k) Rayon des particules du spray et (l) Dégagement de chaleur par la richesse du mélange gazeux (cas 5 : combustion en diffusion modèle OA).

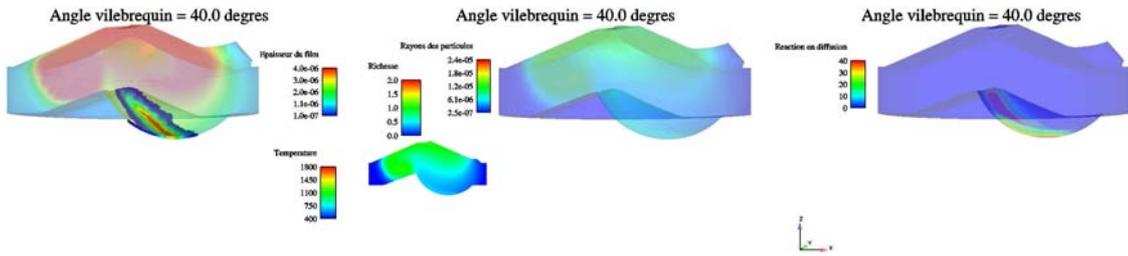
FIG. 9.7 – Champs 3D pour le moteur GDI avec et sans modèle de film liquide et $T_P = 370K$ (cas 4,5,6 et 7).



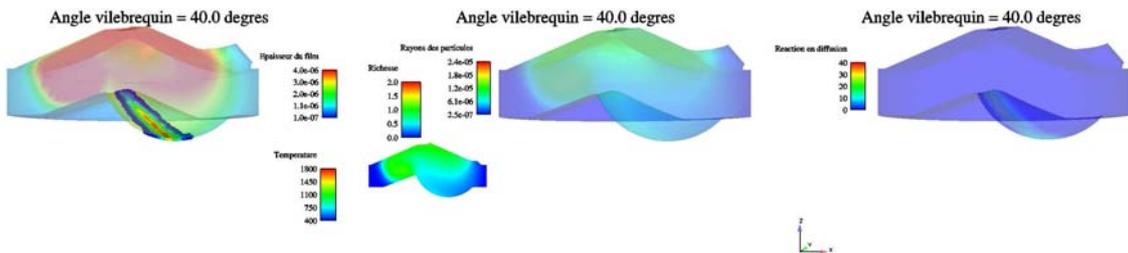
(a) Température du gaz (cas 4 : sans film liquide). (b) Rayon des particules du spray et (c) Dégagement de chaleur par la richesse du mélange gazeux (cas 4 : combustion en diffusion sans film liquide).



(d) Température du gaz et épaisseur du film liquide (cas 7 : modèle GD). (e) Rayon des particules du spray et (f) Dégagement de chaleur par la richesse du mélange gazeux (cas 7 : combustion en diffusion modèle GD).

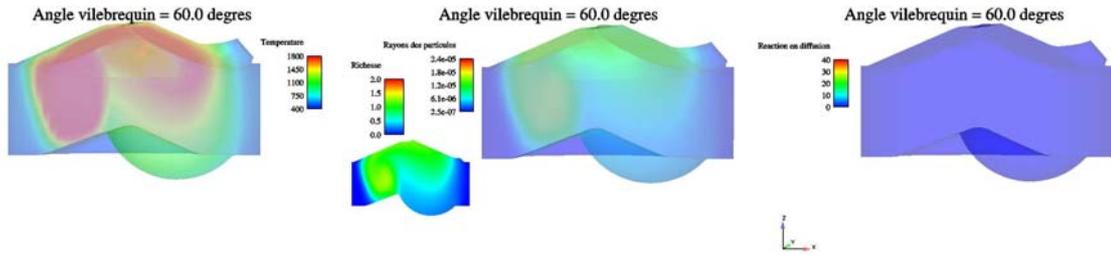


(g) Température du gaz et épaisseur du film liquide (cas 6 : modèle GD2). (h) Rayon des particules du spray et (i) Dégagement de chaleur par la richesse du mélange gazeux (cas 6 : combustion en diffusion modèle GD2).

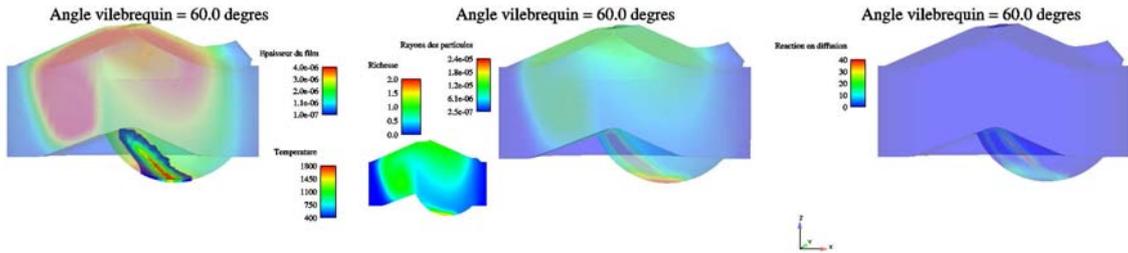


(j) Température du gaz et épaisseur du film liquide (cas 5 : modèle OA). (k) Rayon des particules du spray et (l) Dégagement de chaleur par la richesse du mélange gazeux (cas 5 : combustion en diffusion modèle OA).

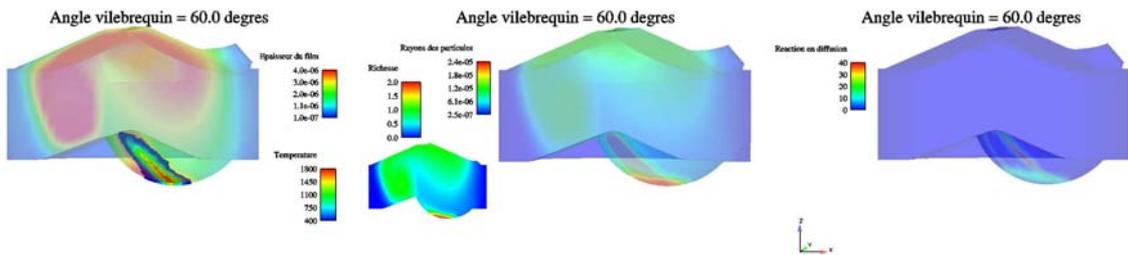
FIG. 9.8 – Champs 3D pour le moteur GDI avec et sans modèle de film liquide et $T_P = 370K$ (cas 4,5,6 et 7).



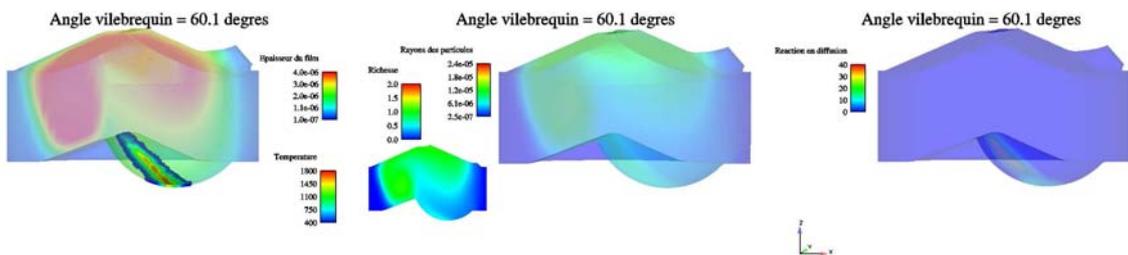
(a) Température du gaz (cas 4 : sans film liquide). (b) Rayon des particules du spray et (c) Dégagement de chaleur par la richesse du mélange gazeux (cas 4 : combustion en diffusion (cas 4 : sans film liquide)).



(d) Température du gaz et épaisseur du film liquide (cas 7 : modèle GD). (e) Rayon des particules du spray et (f) Dégagement de chaleur par la richesse du mélange gazeux (cas 7 : combustion en diffusion (cas 7 : modèle GD)).

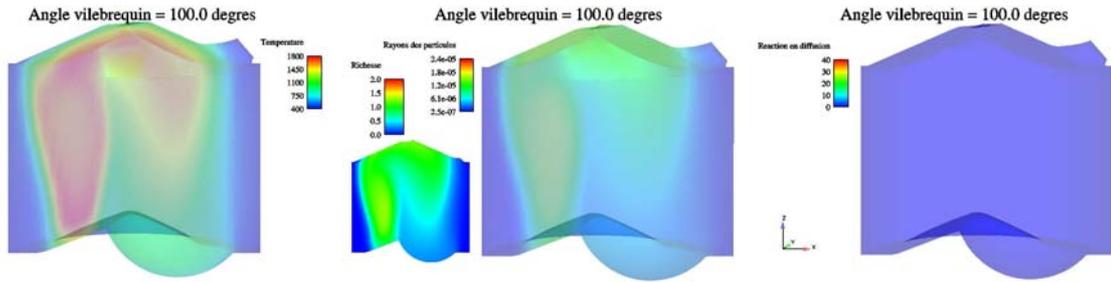


(g) Température du gaz et épaisseur du film liquide (cas 6 : modèle GD2). (h) Rayon des particules du spray et (i) Dégagement de chaleur par la richesse du mélange gazeux (cas 6 : combustion en diffusion (cas 6 : modèle GD2)).

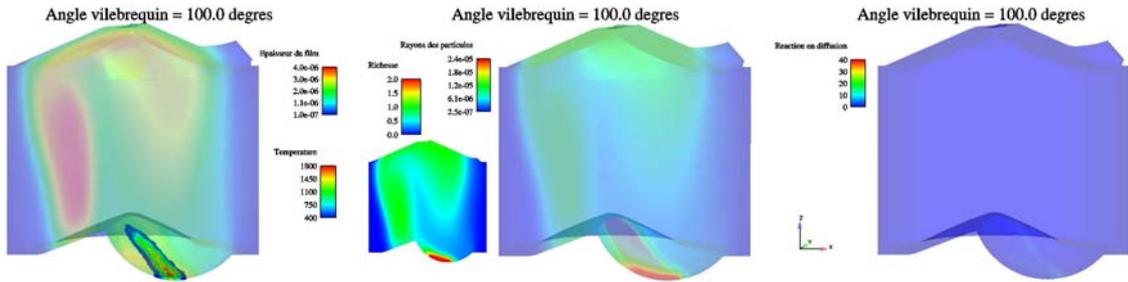


(j) Température du gaz et épaisseur du film liquide (cas 5 : modèle OA). (k) Rayon des particules du spray et (l) Dégagement de chaleur par la richesse du mélange gazeux (cas 5 : combustion en diffusion (cas 5 : modèle OA)).

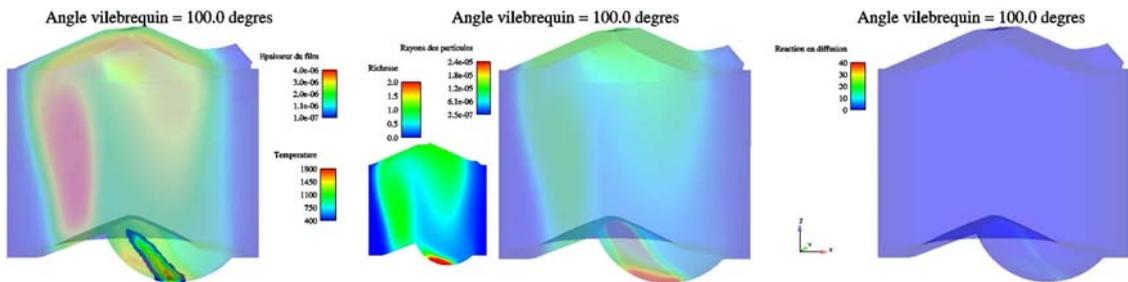
FIG. 9.9 – Champs 3D pour le moteur GDI avec et sans modèle de film liquide et $T_P = 370K$ (cas 4,5,6 et 7).



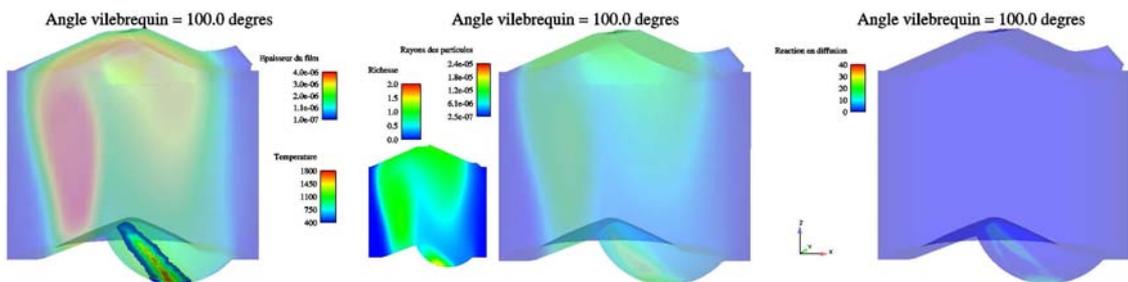
(a) Température du gaz (cas 4 : sans film liquide). (b) Rayon des particules du spray et (c) Dégagement de chaleur par la richesse du mélange gazeux (cas 4 : combustion en diffusion sans film liquide).



(d) Température du gaz et épaisseur du film liquide (cas 7 : modèle GD). (e) Rayon des particules du spray et (f) Dégagement de chaleur par la richesse du mélange gazeux (cas 7 : combustion en diffusion (cas 7 : modèle GD)).



(g) Température du gaz et épaisseur du film liquide (cas 6 : modèle GD2). (h) Rayon des particules du spray et (i) Dégagement de chaleur par la richesse du mélange gazeux (cas 6 : combustion en diffusion (cas 6 : modèle GD2)).



(j) Température du gaz et épaisseur du film liquide (cas 5 : modèle OA). (k) Rayon des particules du spray et (l) Dégagement de chaleur par la richesse du mélange gazeux (cas 5 : combustion en diffusion (cas 5 : modèle OA)).

FIG. 9.10 – Champs 3D pour le moteur GDI avec et sans modèle de film liquide et $T_P = 370K$ (cas 4,5,6 et 7).

B - Analyse des courbes de pression moyenne dans le cylindre en fonction de l'angle vilebrequin

La figure 9.11 montre les courbes de pression obtenues entre -20° et 50° vilebrequin pour tous les cas (modèles et températures de paroi) considérés pour le moteur GDI. Tout d'abord, on constate que plus la température de paroi T_P est élevée plus la pression est importante. C'est logique puisque l'augmentation de la température de paroi entraîne d'une part l'augmentation de l'évaporation du film liquide et d'autre part la diminution des flux thermiques dans les parois de la chambre de combustion. Tout cela contribue à améliorer la combustion et diminuer les pertes thermiques donc à augmenter le travail mécanique que l'on retrouve sur la courbe de pression.

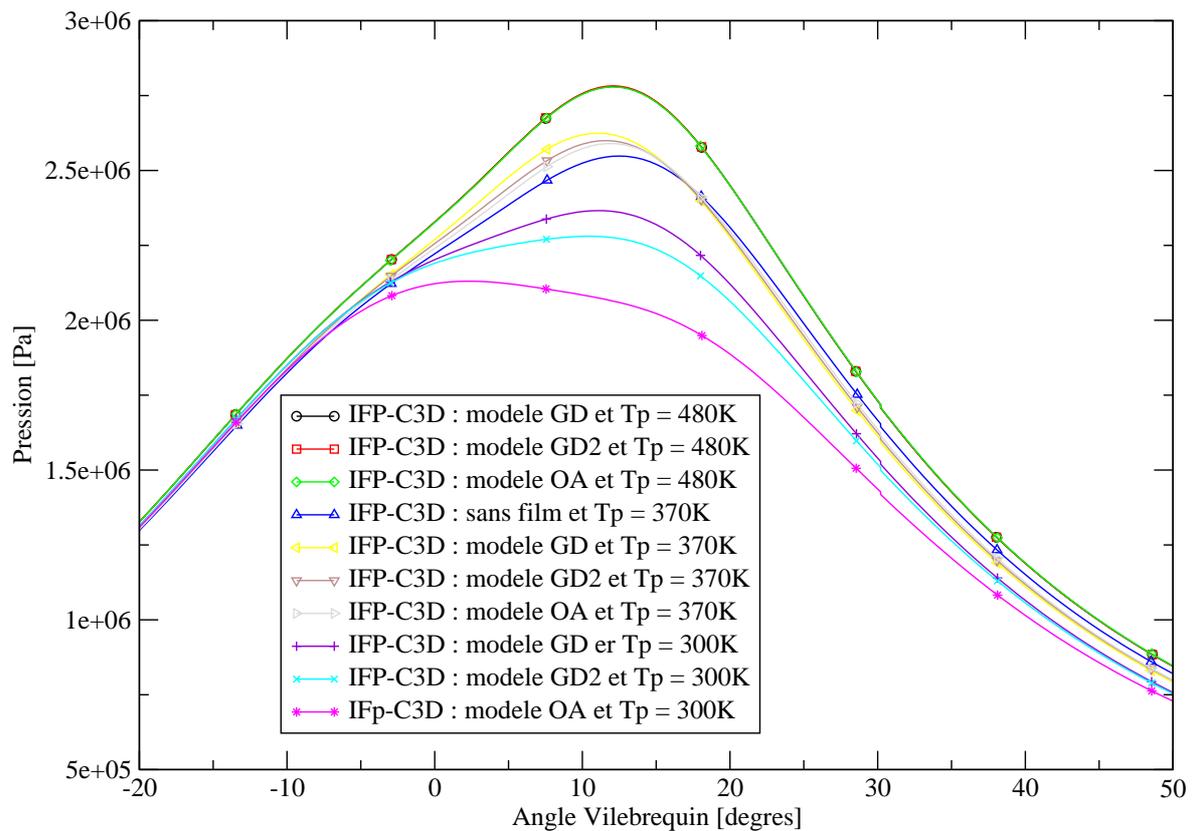


FIG. 9.11 – Pression moyenne dans la chambre de combustion du moteur GDI pour différentes températures de paroi T_P et différents modèles d'évaporation de film liquide.

Ensuite, on remarque que la courbe de pression est identique pour tous les modèles d'évaporation de film liquide lorsque la température de paroi est de 480K (cas 9,10 et 11). Cette observation découle de l'évaporation très rapide des gouttes lorsqu'elles impactent une paroi aussi chaude. En outre, les gouttes ont tendance à rebondir dans ces conditions et ne forment donc plus un film liquide. Celui-ci n'a d'ailleurs pas été observé pour une température de paroi de 480K .

Pour une température de paroi intermédiaire (i.e. $T_P = 370\text{K}$), on constate que le maximum de pression augmente lorsque l'on passe d'une simulation sans modèle de film liquide (cas 4) au modèle OA (cas 5) puis au modèle GD2 (cas 6) puis au modèle GD (cas 7) alors que l'intensité de la combustion suit le cheminement inverse comme le montrent les courbes de taux de réaction des figures 9.12 (a) et (b).

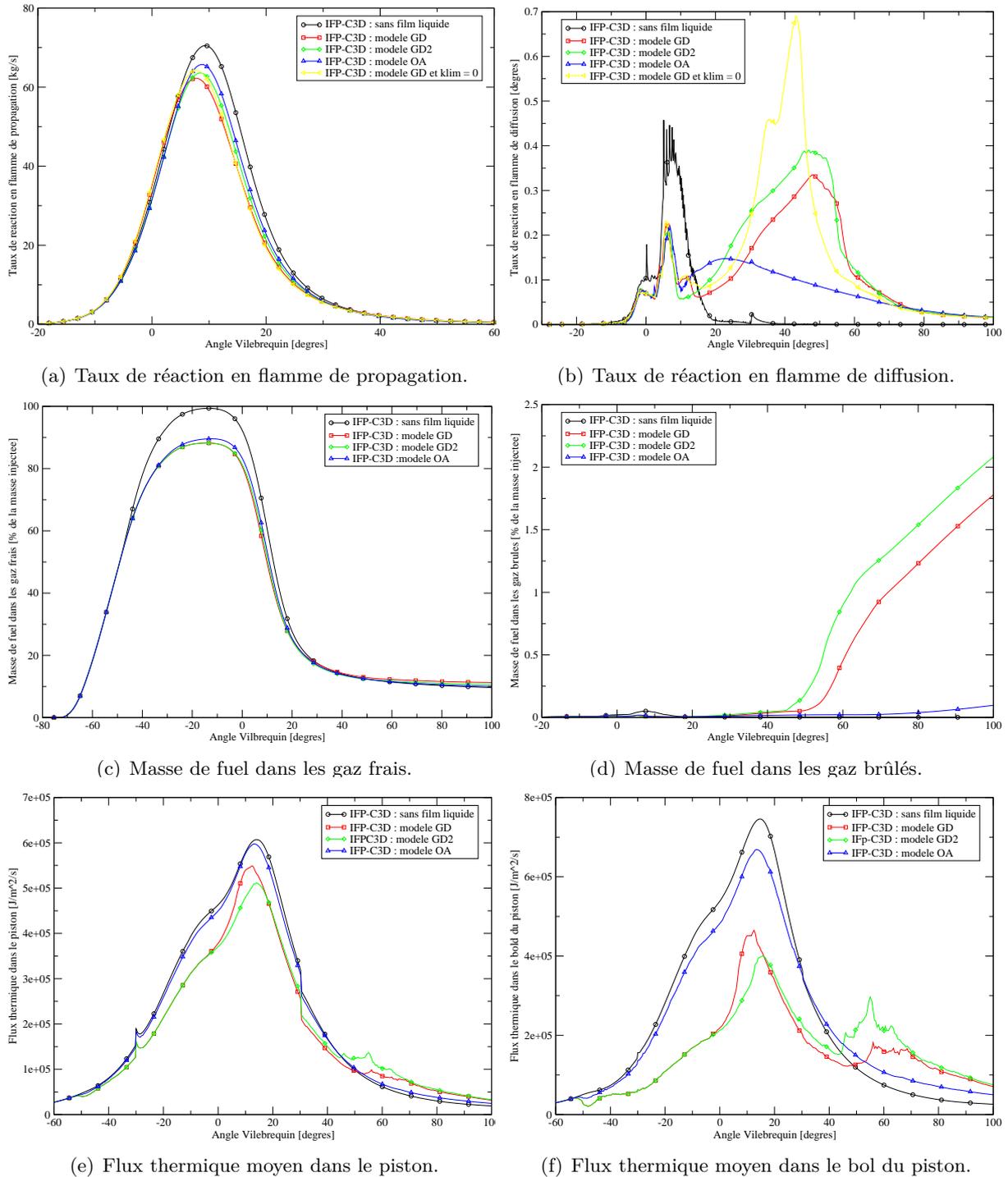


FIG. 9.12 – Combustion, masse de fuel gazeux et flux thermique moyen à la surface du piston dans la chambre de combustion du moteur GDI avec une température de paroi $T_P = 370K$ pour différents modèles d'évaporation de film liquide.

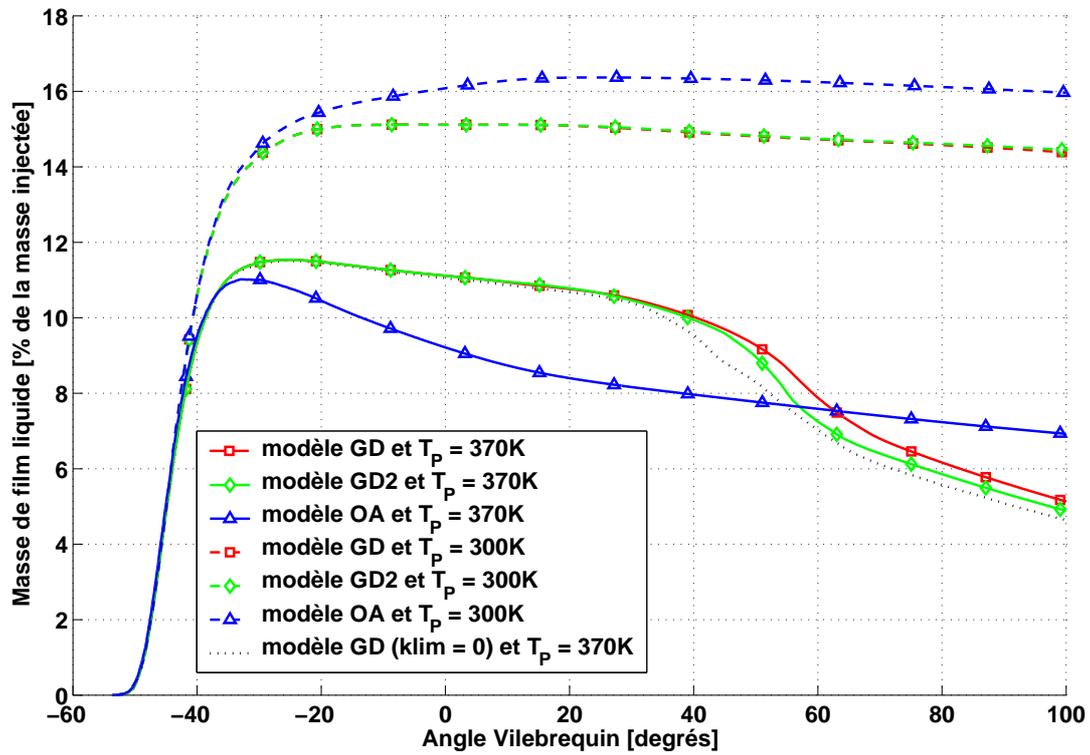
En ce qui concerne le résultat en l'absence de modèle de film (cas 4), l'explication provient essentiellement du fait que la masse de fuel gazeuse supplémentaire par rapport aux cas avec modèle de film est disponible très tôt (avant -10° vilebrequin sur la figure 9.12 (c)) et dans une zone très confinée comme le montre la figure 9.6 (b). En effet, l'évaporation supplémentaire provoque un refroidissement de la charge qui diminue la pression maximale alors que ce fuel évaporé brûle mal et tardivement à cause des fortes

hétérogénéités de richesse du mélange. Ainsi, une évaporation rapide du jet liquide ne se traduit pas nécessairement par une meilleure combustion.

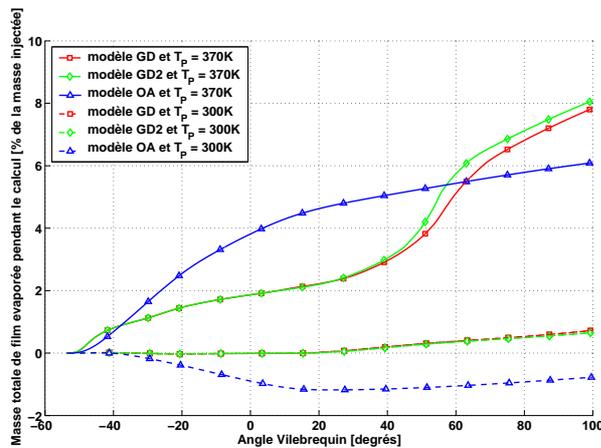
En ce qui concerne la comparaison entre le modèle OA (cas 5) et les modèles GD (cas 6) et GD2 (cas 7), on constate que les pertes thermiques dans le bol du piston sont beaucoup plus faibles avec les modèles GD et GD2 qu'avec le modèle OA comme le montre la figure 9.12 (f). Cette observation découle directement de la faiblesse des flux thermiques dans la paroi obtenus avec le modèle GD (cas 7) et de l'étendue importante du film liquide sur le bol du piston comme nous le verrons lors de l'analyse quantitative du film liquide. Par conséquent, la perte thermique moyenne dans le piston est nettement plus faible avec les modèles GD et GD2 (cas 6 et 7) comme le montre la figure 9.12 (e), d'où une pression maximale plus élevée qu'avec le modèle OA (cas 4). En ce qui concerne l'obtention d'un maximum de pression plus élevé avec le modèle GD qu'avec le modèle GD2, cela provient de la combustion plus intense obtenue jusqu'à 5° vilebrequin grâce au couplage de la combustion avec le film liquide (modèle GD) comme le montre la figure 9.12 (a). Après 5° vilebrequin, on notera que le taux de réaction est plus élevé sans modèle de couplage de la combustion avec le film liquide. Cependant, cela ne change rien sur le maximum de pression puisque cette inversion de tendance est trop tardive.

Enfin, pour une température de paroi froide (i.e. $T_P = 300K$), la figure 9.11 montre que la courbe de pression est beaucoup plus élevée avec le modèle GD2 (cas 6) qu'avec le modèle OA (cas 5). Deux raisons sont à l'origine de cette observation. Premièrement, la masse de film liquide est supérieure avec le modèle OA comme le montre la figure 9.13 (a), ce qui réduit la masse de fuel gazeux disponible pour la combustion. Deuxièmement, les pertes thermiques pendant la phase de compression sont beaucoup plus faibles avec les modèles GD et GD2 (cas 7 et 6) qu'avec le modèle OA (cas 5) comme on le voit sur les figures 9.15 (e) et (f). Par ailleurs, le modèle GD améliore la combustion dans les mailles paroi dans lesquelles se trouve du film liquide, ce qui augmente encore la pression de façon sensible sur toute la plage angulaire visible sur la 9.11 par rapport au modèle GD2.

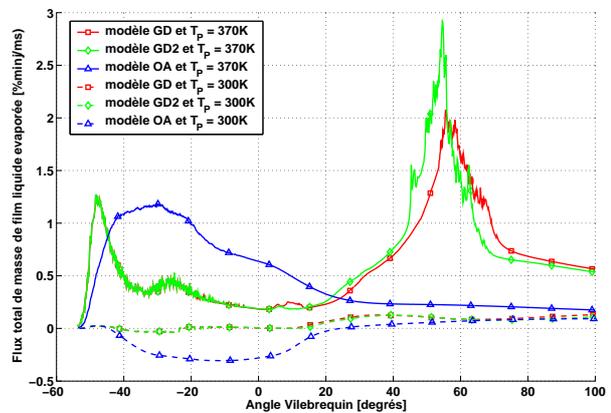
C - Analyse du film liquide



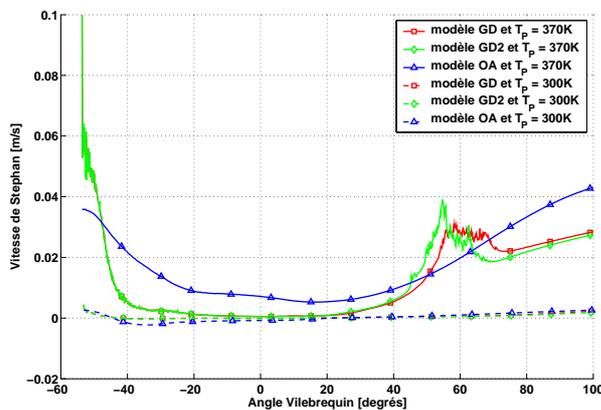
(a) Masse totale du film liquide.



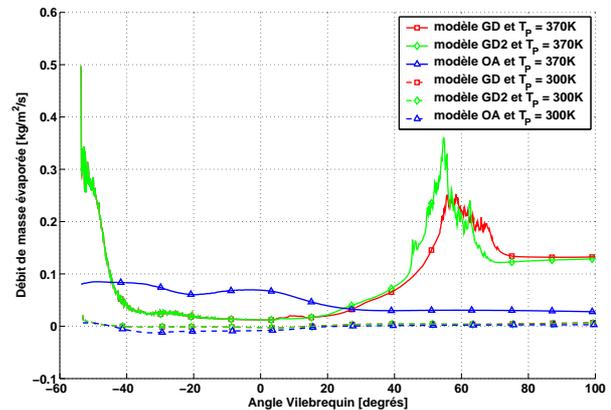
(b) Masse totale de film liquide évaporée.



(c) Flux total de masse de film liquide évaporée.

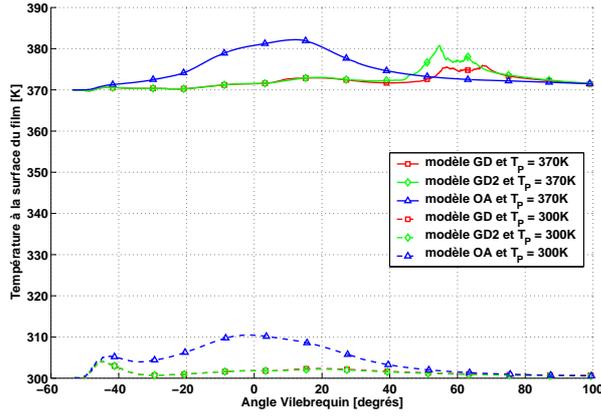


(d) Vitesse de Stephan moyenne.

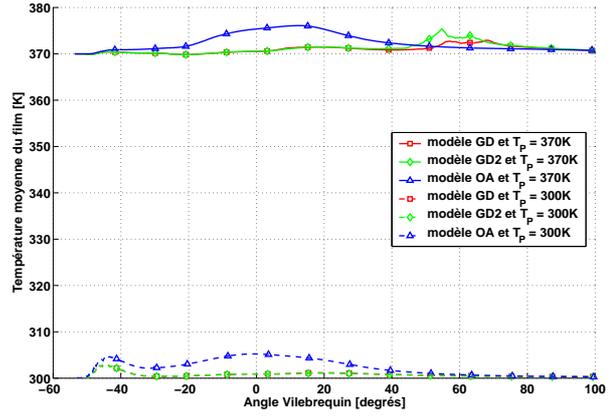


(e) Débit moyen de masse évaporée.

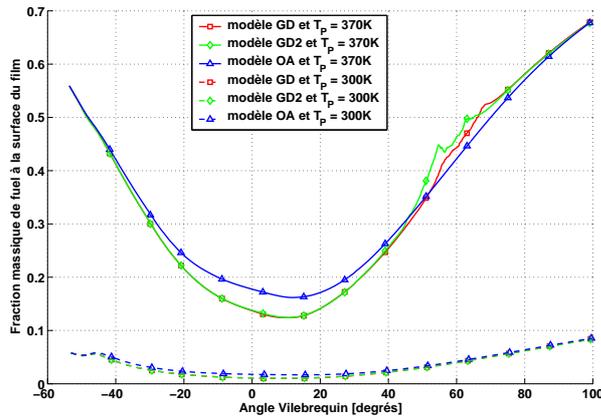
FIG. 9.13 – Comportement du film liquide dans un moteur GDI pour différentes températures de paroi T_p et différents modèles d'évaporation de film liquide.



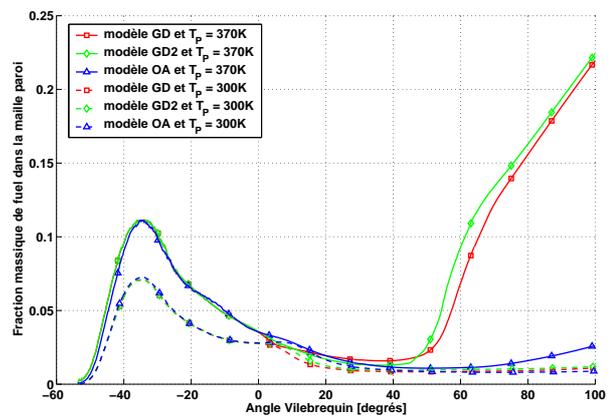
(a) Température moyenne à la surface du film liquide.



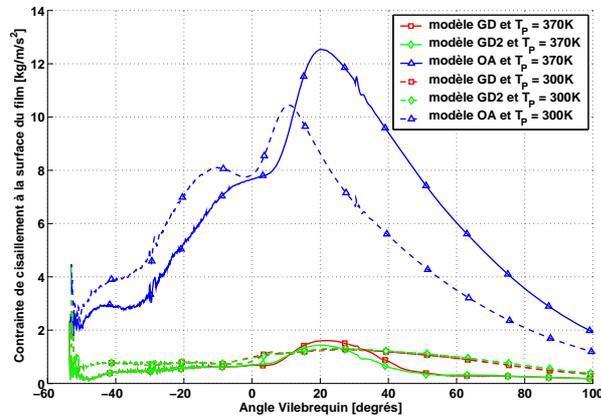
(b) Température moyenne du film liquide.



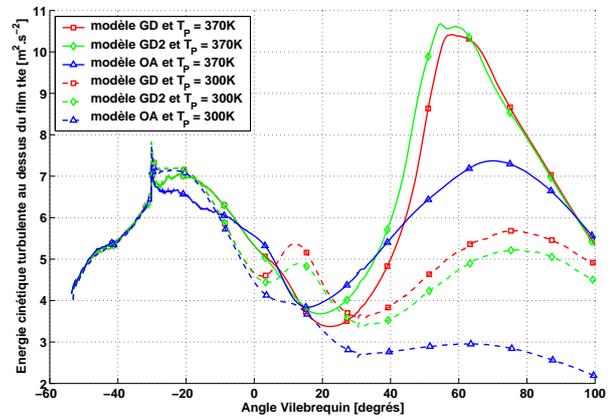
(c) Fraction massique moyenne de fuel à la surface du film liquide.



(d) Fraction massique moyenne de fuel dans les mailles parois contenant du film.



(e) Contrainte de cisaillement moyenne à la surface du film liquide.



(f) Energie cinétique turbulente moyenne dans les mailles parois contenant du film.

FIG. 9.14 – Comportement du film liquide dans un moteur GDI pour différentes températures de paroi T_P et différents modèles d'évaporation de film liquide.

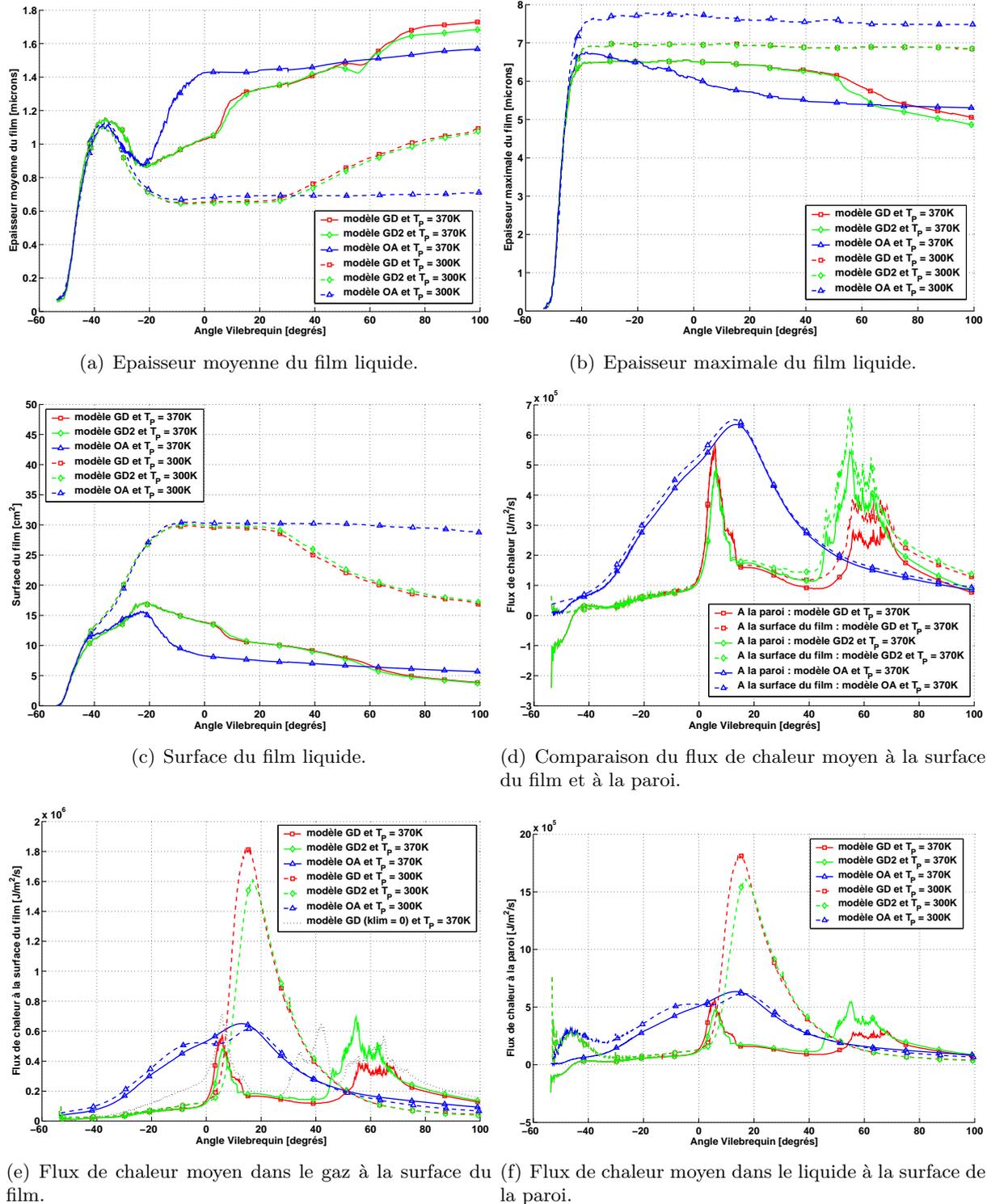


FIG. 9.15 – Comportement du film liquide dans un moteur GDI pour différentes températures de paroi T_P et différents modèles d'évaporation de film liquide.

- Comportement du film liquide en fonction de la température de piston T_P

La figure 9.13 (a) montre que la masse de film liquide formé dans le bol du piston atteint entre 14 et 16 % de la masse injectée pour des conditions de fonctionnement froides (démarrage à froid par exemple), suivant le modèle d'évaporation de film liquide utilisé (cas 1,2 et 3). Cette quantité diminue au fur et mesure que l'on augmente la

température du piston. Nous avons constaté l'absence totale de film liquide lorsque la température du piston est égale à $480K$ (cas 9,10 et 11). Ceci est en accord avec les observations expérimentales, qui montrent une réduction importante des émissions de fumées à l'échappement lorsque le moteur est chaud. Par ailleurs, les figures 9.13, 9.14 et 9.15 montrent que les différences entre le modèle d'évaporation de film liquide développé au cours de cette étude et couplé avec la combustion (modèle GD) et le modèle développé par O'Rourke et Amsden (modèle OA) sont les plus significatives pour une température de paroi T_P intermédiaire (i.e. $T_P = 370K$: cas 5,6,7 et 8). En effet, pour des conditions de moteur froid (i.e. $T_P = 300K$), le film s'évapore très lentement bien que la température des gaz soit élevée et, la différence majeure de comportement entre les deux modèles réside dans le fait que le modèle OA (cas 1) condense beaucoup plus fortement que le modèle GD (cas 3) comme le montre les figures 9.13 (a) et (c). Cependant, la masse condensée est très faible dans les deux cas ; ce qui ne conduit pas à une augmentation significative de la masse du film liquide déposée sur le piston du moteur par impact du jet liquide dans les condition froides (i.e. $T_P = 300K$). On remarquera simplement sur les figures 9.15 (e) et (f) que les flux thermiques à la surface du film liquide et de la paroi obtenus avec le modèle GD (cas 3) sont beaucoup plus élevés pendant l'interaction de la combustion avec le film liquide mais beaucoup plus faibles avant et après. Les valeurs élevées s'expliquent par la prise en compte des phases transitoires de l'évolution de la masse de fuel et de la température dans le modèle GD comme nous l'avons montré au chapitre 7.

- Evaporation du film liquide pour une température de piston T_P intermédiaire

La figure 9.13 montre que le comportement du modèle GD (cas 7) est fortement différent de celui du modèle OA (cas 5). En effet, le débit de masse évaporée est beaucoup plus élevé avec le modèle GD qu'avec le modèle OA pendant les phases transitoires de la formation du film liquide (i.e. entre -50° et -40° vilebrequin) et d'interaction flamme/film liquide (uniquement entre 20° et 70° vilebrequin). Si on s'attarde sur la masse totale de film liquide évaporée pendant le calcul (figure 9.13 (b)), on constate que l'évaporation totale est 25 % plus faible avec le modèle OA (cas 5) qu'avec le modèle GD (cas 6) à la fin du calcul (i.e. à 100° vilebrequin).

- Comportement du film liquide pendant sa formation pour une température de piston T_P intermédiaire

Pendant la formation du film liquide (i.e. avant -40° vilebrequin), le débit de masse évaporée fourni par le modèle GD (cas 7) est supérieur à celui fourni par le modèle OA (cas 5) comme le montre la figure 9.13 (e). Cela s'explique par le fait que le modèle GD tient compte des phases transitoires d'évolution de la masse de fuel et de la température dans la couche limite gazeuse du modèle GD mais également dans le film liquide comme nous l'avons montré au chapitre 7. En effet, La figure 9.15 (d) montre une différence beaucoup plus importante entre le flux thermique à la surface du film et à la paroi avant -40° vilebrequin pour le modèle GD (cas 7) que pour le modèle OA (cas 5). Or, cette différence de flux correspond à l'énergie disponible pour l'évaporation du film.

- Comportement du film liquide entre sa formation et son interaction avec la flamme de prémélange pour une température de piston T_P intermédiaire

Entre -40° et 0° vilebrequin, la tendance s'inverse avec un débit de masse évaporée supérieur pour le modèle OA (cas 5). Cela provient directement de la surestimation de la contrainte de cisaillement et du flux thermique à la surface du film par le modèle OA comme nous l'avons déjà observé lors de la validation du modèle d'évaporation de film

GD2 à la section 7.7. En effet, la figure 9.14 (e) montre que la contrainte de cisaillement à la surface du film $\tau_{g,s}$ est entre 5 et 10 fois plus élevée avec le modèle OA (cas 5) qu'avec le modèle GD (cas 7). Or, la vitesse de Stephan (figure 9.13 (d)) et le flux thermique gazeux à la surface du film (figure 9.15 (e)) sont quasiment proportionnels à la vitesse de frottement $u_\tau = \sqrt{\frac{\tau_{g,s}}{\rho_{g,s}}}$. Ainsi, pendant cette phase du cycle moteur (i.e. entre -40° et 0° vilebrequin), les flux thermiques à la surface du film et à la paroi sont très faibles avec le modèle GD (cas 7) comparativement au modèle OA (cas 5) comme le montre la figure 9.15 (d).

- Interaction du film liquide avec la flamme de prémélange pour une température de piston T_P intermédiaire

Pendant l'interaction de la flamme de prémélange avec le film liquide (i.e. entre 0° et environ 30° vilebrequin), on constate que l'augmentation brutale du flux thermique à la surface du film observée sur la figure 9.13 (c) avec le modèle GD (cas 7) ne sert pas à l'évaporation dans la mesure où la quasi totalité de ce flux est perdue dans la paroi (figure 9.15 (d)) en raison notamment de la très faible épaisseur du film (figures 9.15 (a) et (b)). Les figures 9.14 (a) et (b) montrent d'ailleurs un échauffement plus important du film liquide avec le modèle OA (cas 5) qu'avec le modèle GD (cas 7) entre -40° et 40° vilebrequin. Par conséquent, la fraction massique de fuel à la surface du film Y_F^s est également plus élevée avec le modèle OA pendant cet intervalle temporel comme le montre la figure 9.14 (c), ce qui favorise encore l'évaporation du modèle OA.

D'un façon plus générale, l'influence de la flamme de prémélange sur le film liquide est vraiment très faible quelque soit la température de paroi et le modèle d'évaporation de film utilisé. Par contre, contrairement à ce que l'on a observé lors de l'interaction d'une flamme prémélangée laminaire avec un film liquide au chapitre 3, les flux thermiques lors de l'interaction d'une flamme de prémélange turbulente avec un film liquide dans un moteur demeurent élevés. On peut expliquer cette observation par deux différences essentielles entre le cas moteur traité dans ce chapitre et les cas traités au chapitre 3. D'une part, la pression qui règne dans la chambre de combustion au moment de l'interaction est beaucoup plus élevée dans le cas moteur (environ 20 bar : figure 9.11), ce qui conduit à une évaporation plus lente et à une richesse à la surface du film plus faible que dans les cas traités au chapitre 3. D'autre part, en régime turbulent les profils de richesse et de température sont beaucoup plus raides qu'en régime laminaire. Ainsi, dans le cas moteur GDI la flamme de prémélange s'approche beaucoup plus près du film que dans les cas laminaires et les flux thermiques sont nettement plus élevés.

- Apparition d'une flamme de diffusion pour une température de piston T_P intermédiaire

A partir de 30° vilebrequin, le débit évaporé fourni par le modèle GD (cas 7) devient beaucoup plus élevé que celui donné par le modèle OA (cas 5). La différence la plus notable se matérialise par la présence d'un pic d'évaporation entre 50° et 60° vilebrequin avec le modèle GD comme le montre les figures 9.13 (c) et (e). Pendant ce pic, le modèle GD (cas 7) évapore au moins dix fois plus fortement que le modèle OA (cas 5).

Ce renversement de tendance provient d'un certain nombre de différences essentielles entre les deux modèles :

- Dans le modèle GD, la masse volumique à la surface du film $\rho_{g,s}$ est calculée à partir de la composition du mélange, de la température et de la pression à l'interface liquide-gaz en utilisant l'hypothèse des gaz parfaits alors que la version du modèle OA implémenté

dans IFP-C3D utilise la masse volumique moyenne dans la maille ($\rho_{g,s} = \langle \rho_g \rangle_m$). Or, la pression baisse pendant la détente. Cela augmente donc la fraction massique de fuel à la surface du film comme le montre la figure 9.14 (c) tout en diminuant la fraction massique moyenne de fuel dans les mailles paroi $\langle \rho_g \rangle_m$ par dépression comme le montre la figure 9.14 (d). Ainsi, à partir de 30° vilebrequin, la masse volumique à la surface du film $\rho_{g,s}$ calculée par le modèle GD devient beaucoup plus élevée que celle donnée par le modèle OA. Par conséquent, bien que la vitesse de Stephan soit quasiment toujours plus élevée avec le modèle OA (à l'exception du pic d'évaporation du modèle GD) comme le montre la figure 9.13 (d), le débit de masse évaporée devient plus fort avec le modèle GD à partir de 30° vilebrequin (figure 9.13 (e)).

- Le coefficient de diffusion du fuel dépend de la composition du mélange dans le modèle GD (via notamment la correction du nombre de Schmidt laminaire du fuel S_{cl} donnée par l'équation 6.80 de la section 6.7) alors que ce n'est pas le cas dans le modèle OA. La correction de S_{cl} a tendance à augmenter le coefficient de diffusion du fuel dans le mélange gazeux et donc à favoriser l'évaporation.
- Le traitement de la thermique dans le film liquide est différent entre les deux modèles et donc leurs réponses aux flux thermiques venant du gaz ne sont pas les mêmes. Ainsi, bien que le flux thermique gazeux à la surface du film liquide soit beaucoup plus faible avec le modèle GD qu'avec le modèle OA aux alentours de 30° vilebrequin, l'énergie disponible pour l'évaporation (différence entre le flux thermique à la surface du film et à la paroi) est supérieure avec le modèle GD à ce moment là comme le montre la figure 9.15 (d).

Une fois que le débit de masse évaporée et la richesse du mélange gazeux situé au-dessus du film ont atteint un certain seuil, une flamme de diffusion tardive (maximum d'intensité vers 50° vilebrequin) s'installe à proximité de la surface du film liquide avec le modèle GD (cas 7) et de façon beaucoup moins prononcée et plus tardive avec le modèle OA (cas 5) comme le montre les figures 9.12 (b) et 9.8 (f), (i) et (l). L'observation de telles flammes de diffusion dans les moteurs est confirmée expérimentalement. Il s'en suit une augmentation brutale du débit de masse évaporée avec le modèle GD (figure 9.13 (e)) à cause de l'augmentation brutale du flux thermique à la surface du film (figure 9.15 (d)) engendrée par l'énergie dégagée par la flamme de diffusion et la prise en compte des transitoires thermiques avec le modèle GD. Ce flux thermique provoque une augmentation de la température du film liquide et de la fraction massique de fuel à la surface du film comme le montre les figures 9.14 (a), (b) et (c), ce qui participe à l'augmentation de l'évaporation. Le fuel ainsi évaporé avec le modèle GD permet d'entretenir la flamme de diffusion jusqu'à l'épuisement de l'oxydant. Ce phénomène ne se produit pas avec le modèle OA parce que le débit évaporé n'est pas suffisant et la flamme de diffusion n'entraîne pas une augmentation du flux thermique significative à cause de l'absence de prise en compte des transitoires thermiques avec ce modèle. Ainsi, contrairement à ce qui se produit avec la flamme de prémélange, l'interaction de la flamme de diffusion tardive avec le film liquide donne lieu à un couplage réciproque intense, mais uniquement avec le modèle GD ou GD2.

- Analyse de la turbulence du gaz situé au-dessus du film liquide

Il convient de remarquer que l'énergie cinétique turbulente dans les mailles parois contenant du film obtenue avec tous les modèles d'évaporation de film liquide est du même ordre de grandeur (figure 9.14 (f)) bien que la contrainte de cisaillement fournie par le modèle GD (cas 3 et 7) soit 5 à 10 fois plus faible que celle donnée par le modèle OA (cas 1 et 5) (figure 9.14 (e)). En fait, on constate même que l'énergie cinétique turbulente est en général plus élevée avec le modèle GD qu'avec le modèle OA surtout lors des fortes

évaporations. Cela provient du fait que la contrainte de cisaillement $\langle \tau_g \rangle$ utilisée pour modéliser la turbulence en proche paroi est calculée dans tous les cas comme pour un écoulement isotherme au dessus d'une paroi sèche alors que la contrainte de cisaillement $\tau_{g,s}$ utilisée pour mettre à jour la quantité de mouvement tient compte de l'évaporation avec le modèle GD mais pas avec le modèle OA comme le montre le schéma de la figure 9.16. Ainsi, la vitesse moyenne tangentielle et par conséquent la contrainte de cisaillement obtenue pour le calcul du terme de production sont en général un peu plus élevées avec le modèle GD. C'est d'autant plus vrai que le modèle GD tient également compte de la quantité de mouvement introduite par la vitesse de Stephan alors que ce n'est pas le cas du modèle OA. Ces observations sont conformes avec les résultats de DNS que l'on a montré lors de la section 6.6.

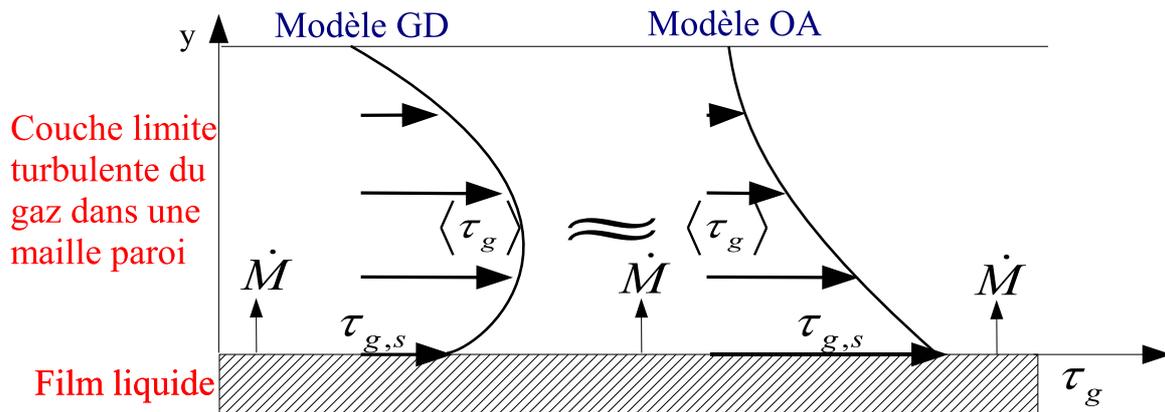


FIG. 9.16 – Représentation comparative entre les modèles OA et GD du profil de contrainte dans la maille paroi située au-dessus du film liquide.

- Influence de la constante K_{lim} et du modèle de couplage entre la combustion et le film liquide

On constate sur la figure 9.13 (a) que l'incertitude liée à la constante K_{lim} et l'influence du modèle de combustion sur la masse de film liquide sont relativement faibles. Par contre, les différences sont plus marquées si on regarde le débit de masse évaporée. En effet, la figure 9.13 (e) montre que la très forte augmentation du débit de masse évaporée entre 40° et 60° vilebrequin est nettement plus importante avec le modèle GD2 (cas 6) qu'avec le modèle GD (cas 7). Cette observation s'explique par le fait que la flamme de diffusion qui se développe à proximité du film liquide entre 40° et 60° vilebrequin est un peu plus intense sans couplage du modèle de film avec la combustion (cas 6 comparé au cas 7) comme la figure 9.12 (b). De la même façon, si on s'intéresse à l'influence de la constante K_{lim} sur le flux thermique gazeux à surface du film liquide, on constate sur la figure 9.15 (e) que celle-ci est importante. En effet, une diminution de la constante K_{lim} conduit à une augmentation du flux thermique à la surface du film pendant la première interaction flamme film liquide (i.e. entre 0° et 20° vilebrequin) et entraîne le déclenchement plus précoce de l'augmentation brutale du flux thermique à cause de la flamme de diffusion (i.e. déclenchement vers 30° vilebrequin pour le modèle GD avec $K_{lim} = 0$ contre 50° vilebrequin avec $K_{lim} = 0.1$).

D - Analyse des niveaux de polluants

Pour terminer cette étude sur le moteur GDI, nous avons regroupé les résultats concernant les émissions de polluants obtenues en terme de monoxyde de carbone CO et d'hydrocarbures imbrûlés HC pour tous les cas calculés dans le tableau 9.3. Il convient de noter que l'on a distingué les émissions de HC totales (film liquide restant à la fin du calcul auquel s'ajoute les imbrûlés sous forme gazeuse) et uniquement gazeuses. On constate que les émissions de CO augmentent avec la température de paroi T_P . Le résultat sur le CO provient sans doute d'une combustion dans des zones riches dont la formation est favorisée par une évaporation rapide qui résulte de l'augmentation de la température de paroi. En ce qui concerne les HC, la tendance est inversée. C'est logique puisque la formation de film liquide favorise l'émission de HC. Or, comme nous l'avons montré lors des paragraphes précédents, plus la température de paroi T_P est basse plus la quantité de film est importante puisque celui ci s'évapore de moins en moins rapidement. Cependant, l'intensité de l'évaporation du film liquide n'est pas la seule explication. En effet, ce qui compte aussi beaucoup est le moment de l'évaporation puisque cela va conditionner en partie si ce fuel évaporé va pouvoir brûler ou non. C'est en grande partie ce qui détermine les émissions de HC sous forme gazeuse. C'est pourquoi, on peut remarquer dans le tableau 9.3 que les émissions de HC gazeux obtenues avec le modèle GD pour $T_P = 370K$ et $T_P = 300K$ sont très proches. Si maintenant on compare les résultats obtenus sans modèle de film et avec les différents modèles d'évaporation de film, on constate qu'il n'y a pas de tendance valable quelle que soit la température de paroi. En effet, on peut tout d'abord noter que les différences ne sont pas significatives pour une température de piston T_P de $480K$ car aucun film liquide ne subsiste. Par ailleurs, pour une température de piston T_P de $370K$, on constate que les différences sont très importantes selon que le modèle de film est activé ou non puisque les émissions de CO sont environ 8 fois moins fortes avec un modèle de film que sans. Les différences sont également marquées entre les modèles GD et GD2 d'un côté et le modèle OA de l'autre. En effet, les modèles GD et GD2 conduisent à une diminution de 25 % des émissions de CO et une augmentation de 25 % des émissions de HC gazeux par rapport à l'utilisation du modèle OA. Par contre les émissions totales de HC sont similaires puisqu'il reste moins de film liquide à la fin du calcul avec les modèles GD et GD2 qu'avec le modèle OA. Cela signifie qu'une grande partie du fuel gazeux provenant de l'évaporation du film liquide ne brûle pas. Enfin, pour une température de piston T_P de $300K$ la tendance s'inverse. D'une façon générale, on notera également que le modèle de couplage de la combustion avec le film liquide a peu d'influence sur la prédiction des émissions de polluants à l'exception de $T_P = 300K$ où la différence entre les modèles GD et GD2 atteint 10 % en terme de HC sous forme gazeuse mais beaucoup moins pour la totalité des émissions de HC. En définitive, il faut garder à l'esprit que l'obtention des niveaux corrects d'émissions des polluants est très délicate puisqu'elle dépend de la formation du mélange, de la combustion, de la post oxydation mais également des modèles spécifiques de formation des polluants. Les résultats présentés ici ne doivent donc être considérés que comme des tendances. Celles-ci s'avèrent en accord avec les observations expérimentales en ce qui concerne la variation des niveaux de polluants en fonction des températures de paroi.

Température du piston T_P [K]	480K			
Modèle utilisé	sans film	GD	GD2	OA
CO [g/(kW.h)]	X	24.7	24.7	24.9
HC total [ppmc]	X	4019	4012	3898
HC gazeux [ppmc]	X	4019	4012	3898
Température du piston T_P [K]	370K			
Modèle utilisé	sans film	GD	GD2	OA
CO [g/(kW.h)]	30.4	3.9	3.7	5.0
HC total [ppmc]	4897	9249	8948	8676
HC gazeux [ppmc]	4897	6638	6462	5151
Température du piston T_P [K]	300K			
Modèle utilisé	sans film	GD	GD2	OA
CO [g/(kW.h)]	X	1.8	1.5	1.2
HC total [ppmc]	X	13101	13693	16220
HC gazeux [ppmc]	X	6341	6900	8708

TAB. 9.3 – Emissions de polluants pour les différents cas moteur GDI calculés.

9.2.4 Conclusions

Afin de conclure sur l'étude du cas moteur GDI à travers l'influence du nouveau modèle d'évaporation de film liquide et d'interaction de la combustion avec le film, on rappelle les résultats essentiels :

- La température de paroi T_P est un paramètre déterminant sur la formation et l'évaporation du film liquide et donc les émissions de polluants. Plus T_P est grande, plus le film liquide s'évapore rapidement.
- Le nouveau modèle d'évaporation de film liquide développé au cours de cette thèse (modèle GD2) et éventuellement couplé avec la combustion (modèle GD) induit un profil de masse évaporée très différent de celui obtenu avec le modèle développé par O'Rourke et Amsden et repris par Habchi dans le code de calcul IFP-C3D (modèle OA).
- La masse totale évaporée à la fin du calcul (i.e. 100° vilebrequin) est plus importante avec les modèles GD et GD2 qu'avec le modèle OA et cela quelque soit la température de paroi.
- La flamme de prémélange a peu d'influence sur l'évaporation du film liquide car la majeure partie du flux thermique induit par la combustion est directement perdue dans la paroi.
- Lorsqu'il existe, le film liquide a une forte influence sur la flamme de prémélange et donc sur la courbe de pression et en particulier son maximum.
- Les flux thermiques à la surface d'une paroi sur laquelle se trouve un film liquide sont fortement réduits par rapport à une paroi sèche d'après les modèles GD et GD2 alors que ce n'est pas le cas du modèle OA puisqu'il surestime fortement les flux thermiques. Le film liquide joue en quelque sorte un rôle de barrière thermique, ce qui entraîne une modification de la courbe de pression.
- Pour une température de paroi intermédiaire (i.e. $T_P = 370K$), les modèles GD et GD2 entraînent l'apparition d'une flamme de diffusion tardive à proximité de la surface du film liquide qui est entretenue par l'évaporation de ce dernier alors que ce n'est pas le

cas du modèle OA.

- La flamme de diffusion tardive qui apparaît pour $T_P = 370K$ et les modèles GD et GD2 entraîne à son tour une augmentation des flux thermiques à l’interface liquide-gaz conduisant à intensifier l’évaporation du film liquide. Ainsi, l’interaction de la flamme de diffusion avec le film liquide est réciproque alors que seul le film liquide est affecté lors de son interaction avec la flamme de prémélange.
- Le comportement qualitatif des modèles GD et GD2 est identique bien que des différences quantitatives en termes de débit évaporé, de taux de réaction et d’émissions de polluants existent. Cela prouve que l’interaction flamme film liquide est essentiellement contrôlée par la formation du mélange et donc l’évaporation du film liquide.

9.3 Moteur diesel

9.3.1 Présentation

Afin de réduire les émissions à l’échappement, à la fois des oxydes d’azote (NOx) et des particules tout en conservant les performances standards des moteurs diesel à injection directe, l’IFP a développé le concept de combustion NADI [58]. Ce concept est basé sur le nouveau mode de combustion HCCI pour les charges partielles et conserve un mode de combustion conventionnel pour les pleines charges. Les principaux inconvénients du mode de combustion HCCI sont les émissions importantes de HC et de monoxyde de carbone (CO). Ces émissions sont d’autant plus fortes que la masse injectée est importante. Ces polluants peuvent être en partie dus à l’impact du jet liquide sur le piston, comme dans le cas du moteur IDE étudié dans la section précédente. En effet, la formation d’un film liquide sur le piston est très probable pour les raisons suivantes :

- Le faible taux de compression de ce type de moteur (taux =14) offre une faible densité au moment de l’injection, même tardive.
- Le faible angle de nappe de l’injecteur (cf. figure 9.19 (b)) réduit la distance qui sépare l’injecteur des parois du piston.

9.3.2 Simulations

Afin d’améliorer la compréhension du mode de combustion HCCI et d’étudier l’influence de la température de paroi et des développements effectués au cours de cette thèse sur la formation éventuelle d’un film liquide et son évaporation, et sur la préparation du mélange et la combustion qui en résultent, plusieurs calculs ont été effectués pour différentes températures de paroi et différents choix de modèles d’évaporation de film liquide et d’interaction avec la combustion (tableau 9.4). Pour chaque cas, deux températures de paroi sont indiquées : la première correspond à la température du piston T_P alors que la seconde correspond à la température du cylindre et de la culasse T_C .

Numéro de cas	T_P	T_C	Modèle de film liquide	Couplage avec la combustion
1	450K	400K	modèle OA	non
2	450K	400K	modèle GD2	non
3	450K	400K	modèle GD	oui
4	550K	500K	modèle OA	non
5	550K	500K	modèle GD2	non
6	550K	500K	modèle GD	oui
7	650K	600K	aucun	non
8	650K	600K	modèle OA	non
9	650K	600K	modèle GD2	non
10	650K	600K	modèle GD	oui

TAB. 9.4 – Paramètres des différents cas de calculs.

Les conditions de fonctionnement du moteur simulé sont données dans le tableau 9.5. La pression moyenne indiquée PMI est la pression spécifique moyenne sur la surface de piston durant une course double compression-détente. Elle représente le travail mécanique fourni par le moteur sans tenir compte des pertes. Le taux d'EGR est le taux de recirculation des gaz d'échappement dans les gaz frais.

Régime	1500 tr/min
PMI	4 bars
EGR	21 %
Masse injectée	13.4 mg/coup
Pression d'injection	1000 bars

TAB. 9.5 – Paramètres du point de fonctionnement moteur diesel calculé.

Tous les calculs effectués dans cette section commencent à -150° vilebrequin (150° avant le PMHC : Point Mort Haut de Combustion) et se terminent à 140° vilebrequin. Un injecteur à 6-trous, ayant un angle de nappe de 60° et fonctionnant sous une pression de 1000 bars, est utilisé pour injecter du fuel dans la chambre de combustion. Le carburant diesel est représenté par un pseudo-carburant "dff1" obtenu par la procédure décrite dans la référence [27]. Pour l'auto-inflammation et la combustion, le modèle ECFM3Z [19] a été utilisé. Dans cette étude paramétrique, les calculs sont effectués avec une avance d'injection $AVI=10^\circ$ avant le PMHC. Le Tableau 9.6 donne les détails des conditions initiales.

Pression	1.08e5 Pa
Température du gaz	324 K
Fraction massique de O2	0.204
Fraction massique de N2	0.761
Fraction massique de CO2	0.025
Fraction massique de H2O	0.010
Température du carburant injecté	320 K
Nombre de swirl	1.1

TAB. 9.6 – Principales conditions initiales.

Le maillage donné par la figure 9.17 est un secteur de 60° qui comprend ($25 \times 15 \times 38 = 14250$) noeuds au début des calculs (150° avant le PMHC) et représente $1/6^{eme}$ de la chambre de combustion. La taille caractéristique des mailles dans le bol est de l'ordre de 1 mm. De plus, notons que le code IFP-C3D limite le pas de temps Δt automatiquement, notamment au cours de l'injection en utilisant un critère du type CFL empêchant les gouttelettes injectées de parcourir plus d'une maille pendant un pas de temps Δt . Ainsi, ce dernier peut atteindre $0.1 \mu s$ pendant l'injection. Puis, il augmente de nouveau pour atteindre un pas de temps typique de l'ordre de $1 \mu s$.

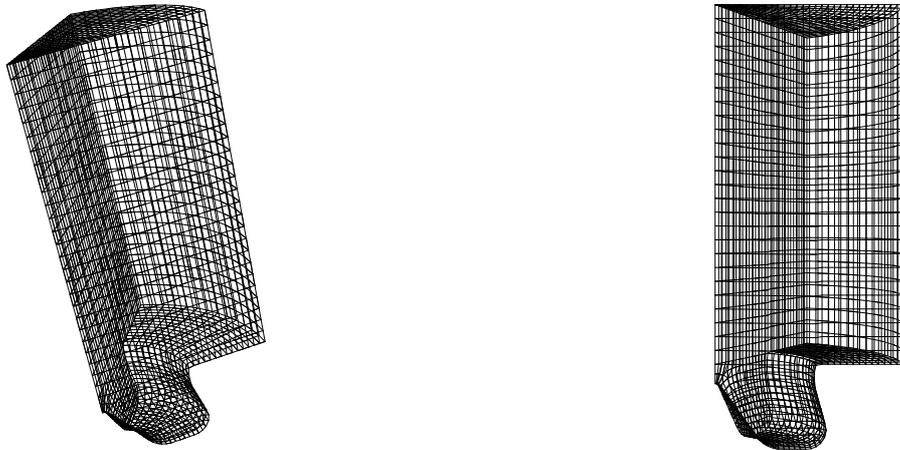


FIG. 9.17 – Maillage d'un secteur du moteur diesel NADI

9.3.3 Résultats

A - Description qualitative

Afin d'analyser qualitativement la formation du mélange et la combustion dans un moteur NADI et d'en visualiser ainsi le comportement dans sa globalité, les champs 3D de plusieurs variables vont être examinés à différents instants du cycle moteur pour une température de paroi de $650K$ (cas 7 à 10 montrés sur les figures 9.18 à 9.26). Cette

température de paroi a été choisie dans la mesure où c'est la température la plus représentative du cas moteur qui a tourné au banc. Pour chaque figure, la colonne de gauche permet de visualiser la température du gaz dans la chambre de combustion et le film liquide colorié par son épaisseur, la colonne du milieu permet de visualiser la richesse du mélange gazeux dans la chambre de combustion et sur un plan qui par l'axe de symétrie du piston ainsi que les particules du jet liquide colorisées par leur rayon et la colonne de droite permet de voir le taux de réaction global de la combustion (i.e. somme des taux de réaction de la flamme d'auto inflammation, de propagation et de diffusion).

- Injection et formation du mélange avant le début de l'auto inflammation (de -8° à -3° vilebrequin)

L'injection du liquide dans la chambre de combustion commence 8° vilebrequin avant le PMHC car il existe un délai d'environ 2° vilebrequin entre l'activation de la commande d'injection qui correspond à l'AVI et la sortie du liquide de l'injecteur. On voit que l'angle de nappe du jet est effectivement très étroit (figure 9.18 (b)). Par la suite, le jet liquide se propage en s'évaporant (ce qui forme une poche de gaz très riche comme on le voit sur la figure 9.19 (b)) jusqu'à impacter le bol du piston pour commencer à y former un film liquide lorsque le modèle est activé (figure 9.19 (d)). A ce stade du cycle moteur, aucune différence n'est encore perceptible entre les modèles d'évaporation de film puisque ce dernier commence seulement à se former.

- Phase de combustion (de -3° à 30° vilebrequin)

Quelques degrés vilebrequin plus tard, l'injection du carburant est terminée et la poche de carburant évaporé (spray et film liquide) s'est étendue (figure 9.20 (b)). On peut déjà remarquer que cette poche est un peu moins volumineuse avec le modèle de film liquide (figure 9.20 (e)) que sans (figure 9.20 (b)) car le film liquide s'évapore moins vite que le jet liquide. Par ailleurs, la formation et le déplacement du film liquide se poursuit vers le sommet du piston (figure 9.20 (d)) tandis que l'auto inflammation débute dans le bol du piston et à proximité de l'injecteur (figures 9.20 (c) et (f)). Ensuite, lorsque le piston parvient au PMHC (0° vilebrequin), le film liquide a atteint le sommet du bol du piston (figure 9.21 (d)) et l'auto inflammation a commencé à se propager aux endroits où se trouve du carburant sous forme gazeuse (figures 9.21 (c) et (f)). A ce stade du cycle, on constate également les premières différences importantes de formation du mélange entre les calculs avec et sans modèle de film liquide. En effet, la poche de carburant s'est concentré vers la culasse en l'absence de modèle de film liquide puisque l'évaporation est achevée et que l'entraînement d'air engendré par le spray achemine le carburant vers le sommet du piston (figure 9.21 (b)). En revanche, le carburant gazeux est beaucoup plus dilué et le mélange moins riche avec un modèle de film (figure 9.21 (e)) puisqu'une grosse proportion du carburant se trouve encore sous forme d'un film liquide qui occupe une surface relativement grande et qui s'évapore lentement. Par la suite, la combustion se développe dans une grande partie du domaine de calcul (figures 9.22 (c), (f) et (i)) avec un intensité un peu plus importante pour le cas sans modèle de film puisqu'il y a d'avantage de carburant gazeux à brûler. Il en résulte la formation d'une poche de gaz brûlés ayant des températures élevées (figures 9.22 (a), (d) et (g)), mais également l'évaporation d'une grande partie du film liquide ayant interagi avec la combustion lorsque le modèle GD est utilisé (figure 9.22 (d)) alors que ce n'est pas le cas avec le modèle OA (figure 9.22 (g)). On aperçoit d'ailleurs une poche de carburant gazeux dans la partie supérieure de la chambre de combustion qui provient de cette évaporation avec le modèle GD (figure 9.22 (e)). 5° vilebrequin plus tard, le phénomène se poursuit. Cela provoque la disparition complète du film liquide sur la partie supérieure du piston lorsque le modèle GD est utilisé (figure

9.23 (d)) alors que le film est beaucoup moins affecté avec le modèle OA (figure 9.23 (g)). L'évaporation qui en résulte (figure 9.23 (e)) alimente une flamme de diffusion forcément plus intense avec le modèle GD (figure 9.23 (f)) qu'avec le modèle OA (figure 9.23 (i)). A 30° vilebrequin, il ne reste plus que quelques traces de combustion et on peut constater que les gaz brûlés sont plus importants en l'absence de modèle de film liquide (figure 9.24 (a)) puisque l'évaporation du carburant a été plus rapide et donc la combustion plus intense. Il convient également de noter qu'il reste beaucoup moins de film liquide avec le modèle GD qu'avec le modèle OA (figures 9.24 (d) et (g)) à cet instant du cycle moteur. L'évaporation plus intense observée avec le modèle GD se retrouve sur la richesse du mélange qui est en moyenne plus élevée avec le modèle GD (figure 9.24 (e)) qu'avec le modèle OA (figure 9.24 (h)), en particulier à proximité de la partie supérieure du piston.

- Poursuite de la détente (de 30° à 100° vilebrequin)

Après la fin de la phase de combustion, il ne se passe plus grand chose. A 60° vilebrequin, on notera simplement que le film liquide a disparu avec le modèle GD (figure 9.25 (d)) alors qu'il n'a toujours pas fini de s'évaporer à le modèle OA (figure 9.25 (g)). Finalement, lorsque l'on parvient à 100° vilebrequin, on constate sur les figures 9.26 que le film liquide n'est toujours pas complètement évaporé avec le modèle OA et que la température dans la chambre de combustion semble globalement un peu plus faible qu'avec le modèle GD qui semble à son tour un peu moindre que sans modèle de film. En ce qui concerne le mélange gazeux, on s'aperçoit qu'il est un peu plus riche dans le fond du bol du piston avec un modèle de film liquide en raison de son évaporation tardive (figures 9.26 (e) et (h)) que sans (figure 9.26 (b)). Par contre, si on laisse de côté le fond du bol du piston, le mélange gazeux à ce stade du cycle moteur gagne en homogénéité lorsque l'on passe d'un calcul sans modèle de film à un calcul avec le modèle GD puis avec le modèle OA.

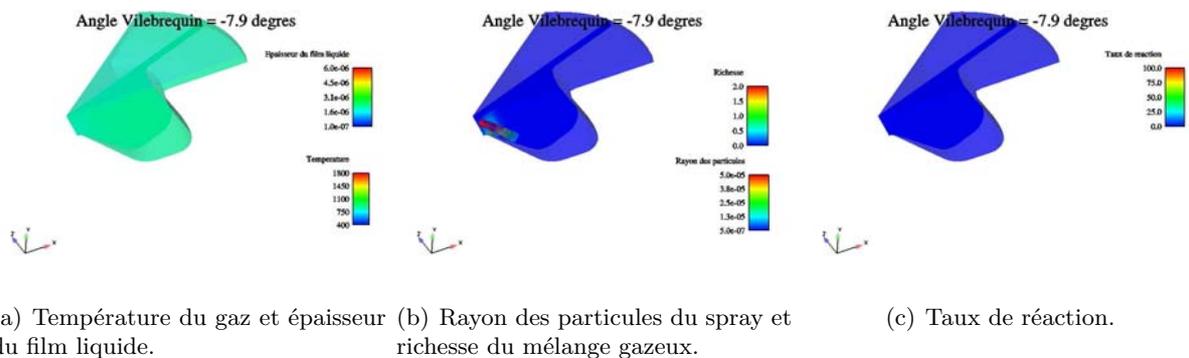


FIG. 9.18 – Champs 3D pour le moteur NADI avec $T_P = 650K$ et le modèle GD activé (cas 10).

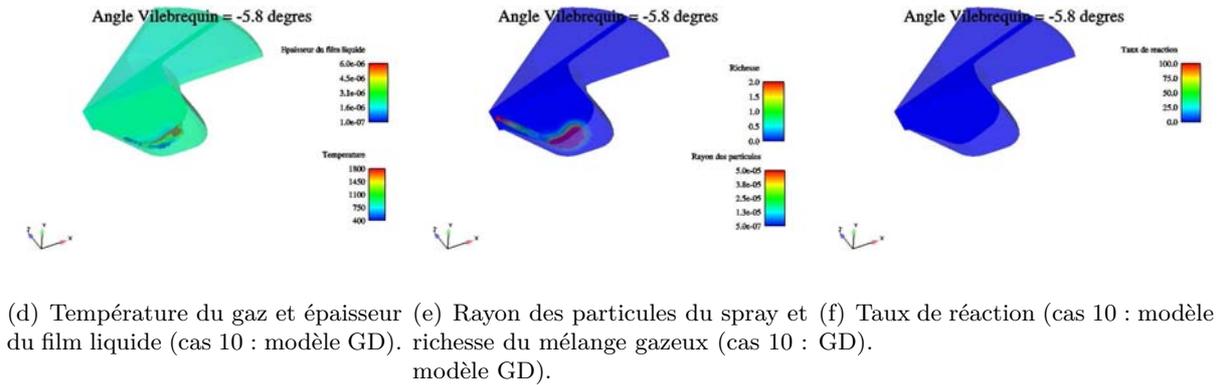
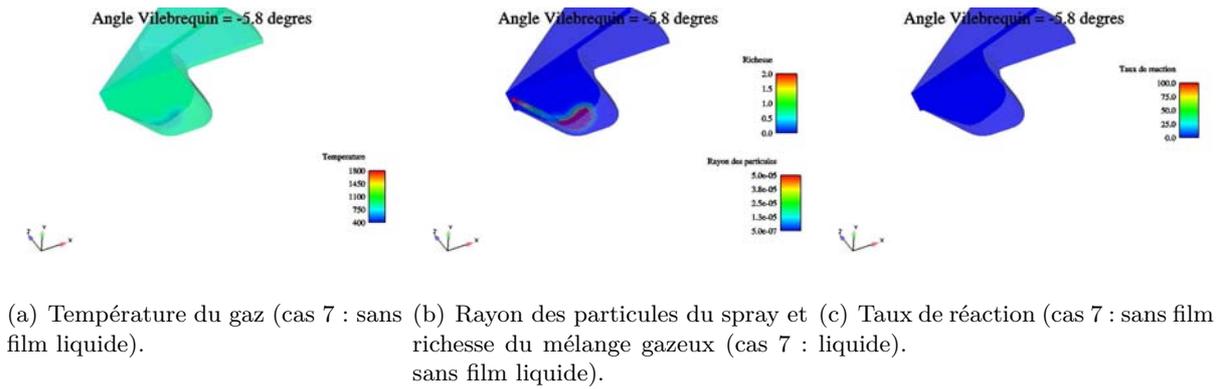


FIG. 9.19 – Champs 3D pour le moteur NADI avec et sans modèle de film liquide et $T_P = 650K$ (cas 7 et 10).

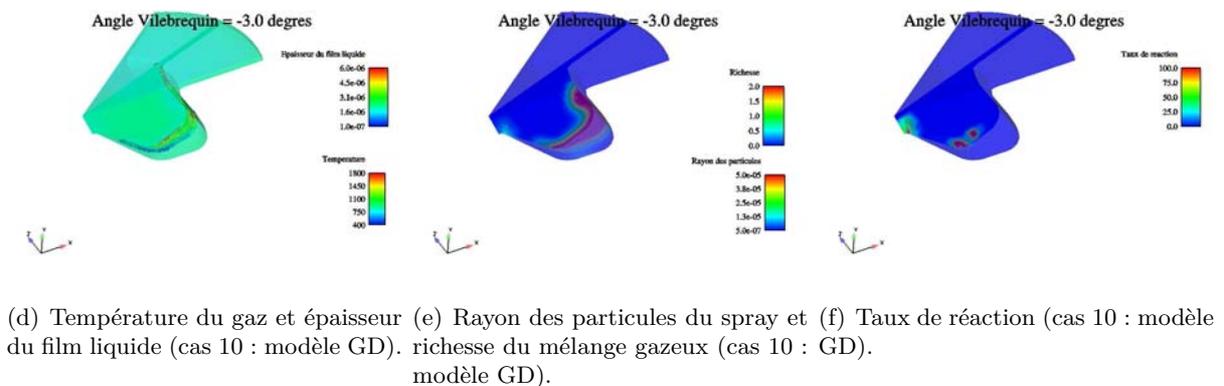
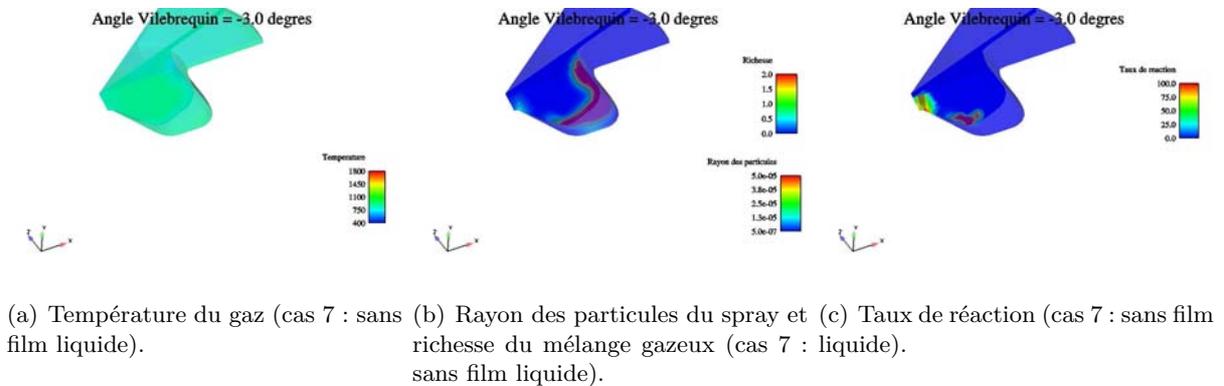
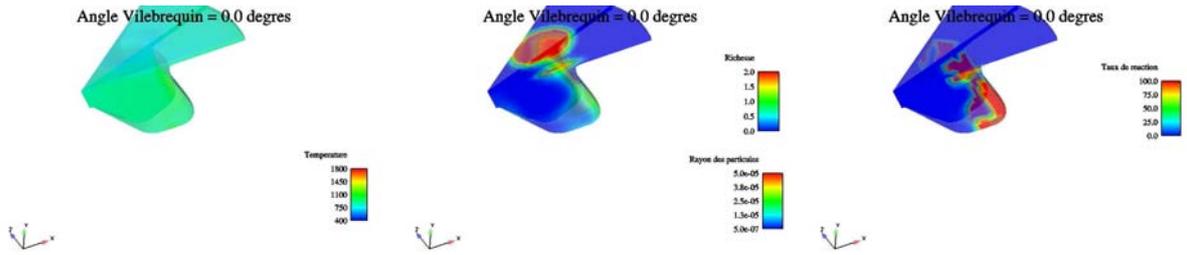
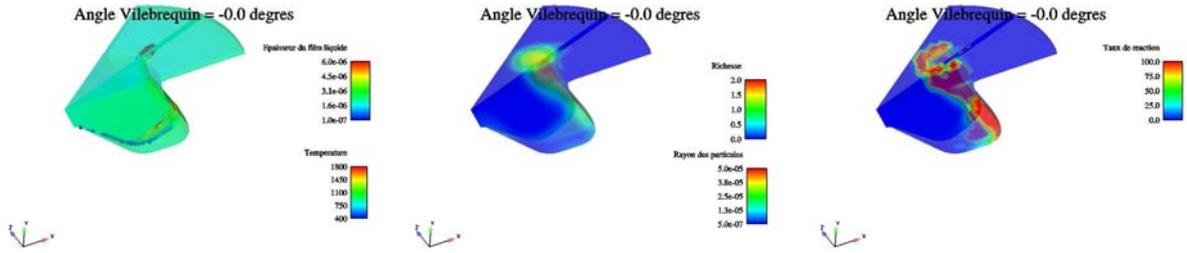


FIG. 9.20 – Champs 3D pour le moteur NADI avec et sans modèle de film liquide et $T_P = 650K$ (cas 7 et 10).

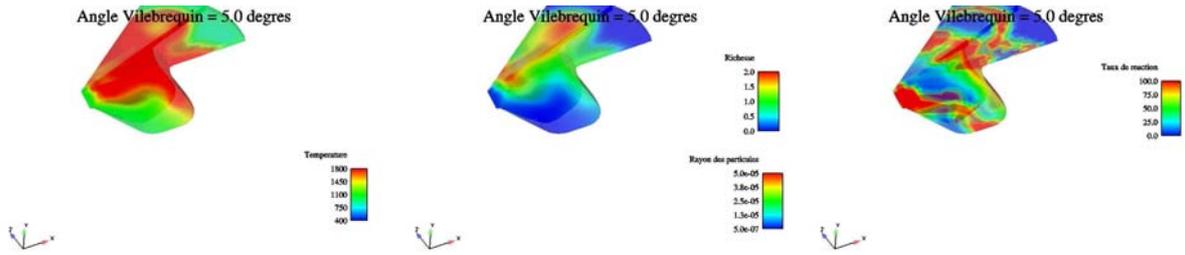


(a) Température du gaz (cas 7 : sans film liquide). (b) Rayon des particules du spray et (c) Taux de réaction (cas 7 : sans film liquide).
 (d) Température du gaz et épaisseur du film liquide (cas 10 : modèle GD). (e) Rayon des particules du spray et (f) Taux de réaction (cas 10 : modèle GD).
 (g) Richesse du mélange gazeux (cas 7 : liquide). (h) Richesse du mélange gazeux (cas 10 : GD).

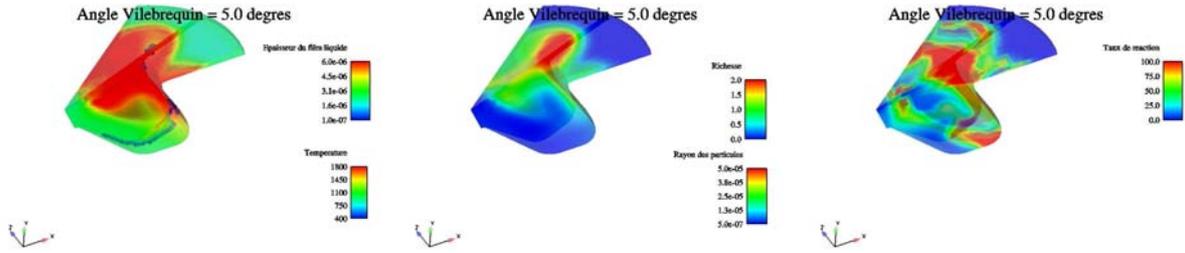


(d) Température du gaz et épaisseur du film liquide (cas 10 : modèle GD). (e) Rayon des particules du spray et (f) Taux de réaction (cas 10 : modèle GD).
 (g) Richesse du mélange gazeux (cas 7 : liquide). (h) Richesse du mélange gazeux (cas 10 : GD).

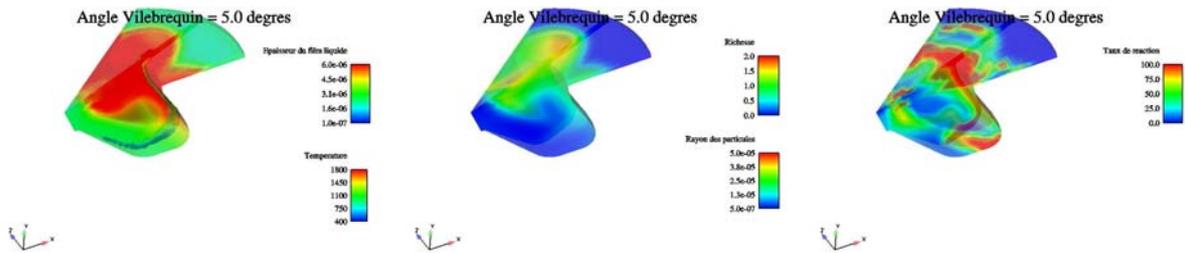
FIG. 9.21 – Champs 3D pour le moteur NADI avec et sans modèle de film liquide et $T_P = 650K$ (cas 7 et 10).



(a) Température du gaz (cas 7 : sans film liquide). (b) Rayon des particules du spray et (c) Taux de réaction (cas 7 : sans film liquide).

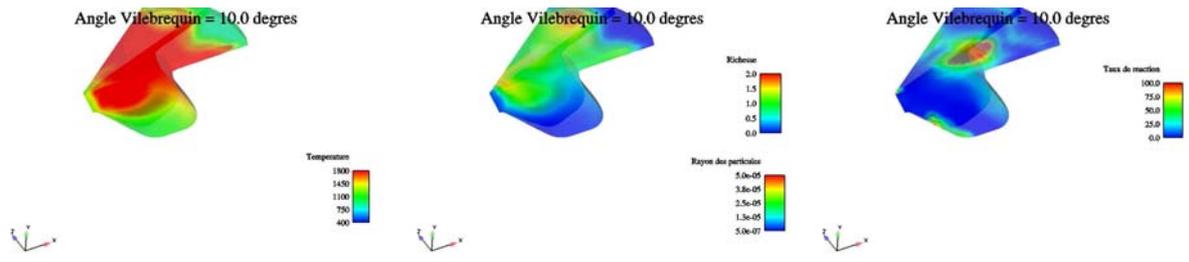


(d) Température du gaz et épaisseur du film liquide (cas 10 : modèle GD). (e) Rayon des particules du spray et (f) Taux de réaction (cas 10 : modèle GD).

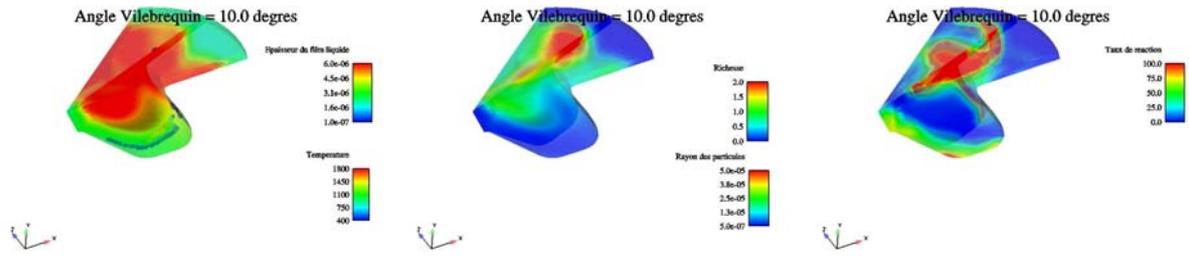


(g) Température du gaz et épaisseur du film liquide (cas 8 : modèle OA). (h) Rayon des particules du spray et (i) Taux de réaction (cas 8 : modèle OA).

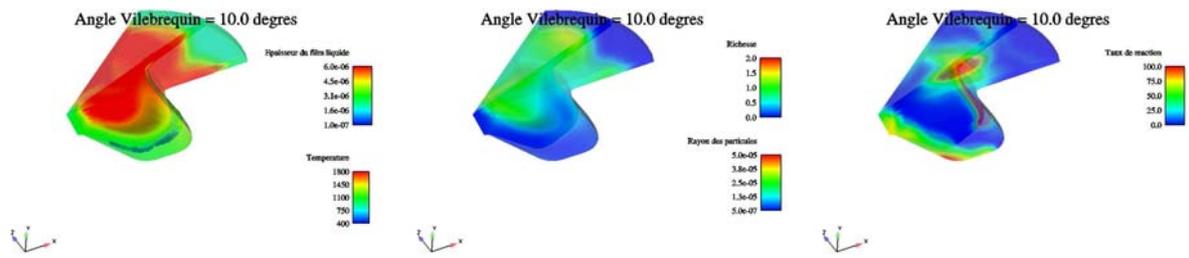
FIG. 9.22 – Champs 3D pour le moteur NADI avec et sans modèle de film liquide et $T_P = 650K$ (cas 7,8 et 10).



(a) Température du gaz (cas 7 : sans film liquide). (b) Rayon des particules du spray et (c) Taux de réaction (cas 7 : sans film liquide).

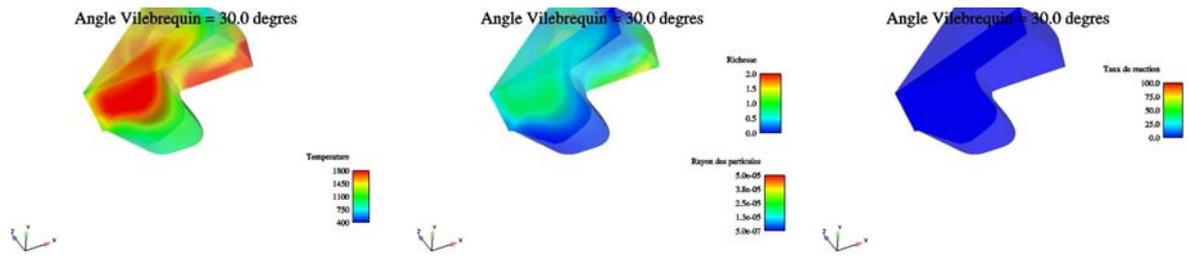


(d) Température du gaz et épaisseur du film liquide (cas 10 : modèle GD). (e) Rayon des particules du spray et (f) Taux de réaction (cas 10 : modèle GD).

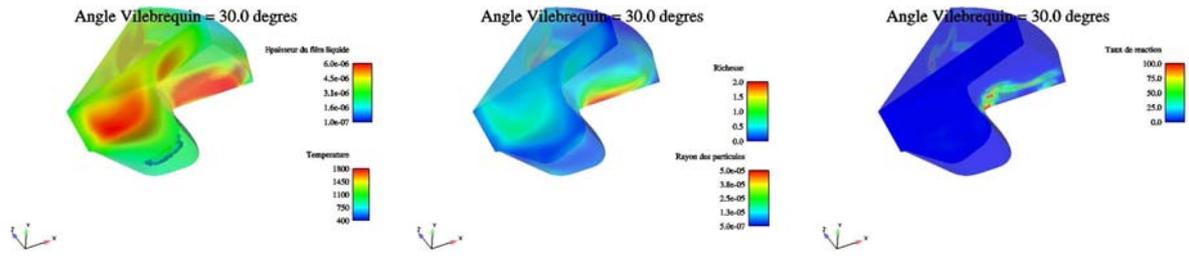


(g) Température du gaz et épaisseur du film liquide (cas 8 : modèle OA). (h) Rayon des particules du spray et (i) Taux de réaction (cas 8 : modèle OA).

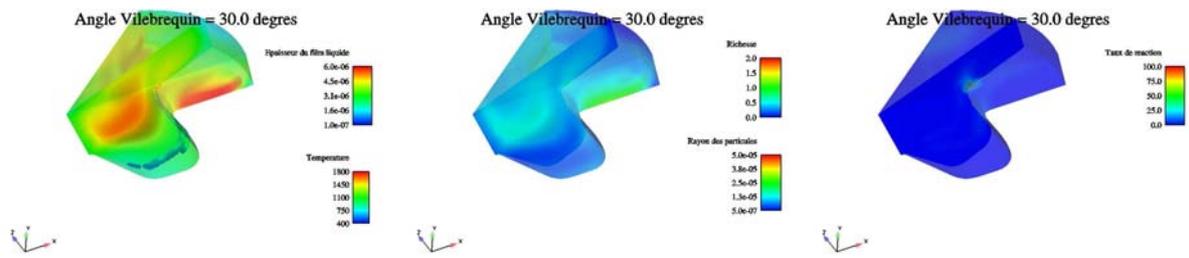
FIG. 9.23 – Champs 3D pour le moteur NADI avec et sans modèle de film liquide et $T_P = 650K$ (cas 7,8 et 10).



(a) Température du gaz (cas 7 : sans film liquide). (b) Rayon des particules du spray et (c) Taux de réaction (cas 7 : sans film liquide).

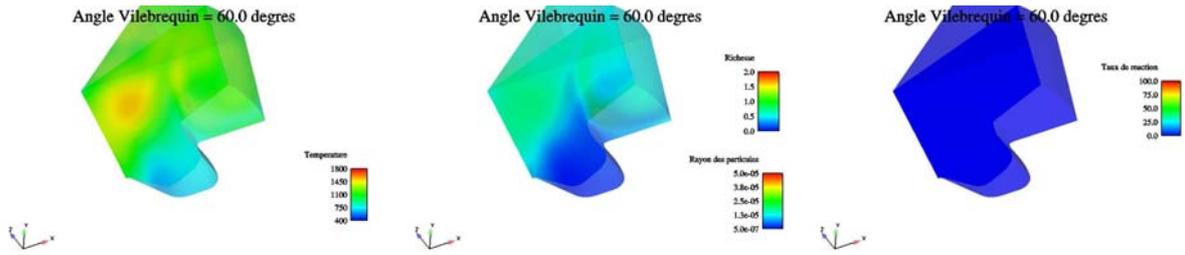


(d) Température du gaz et épaisseur du film liquide (cas 10 : modèle GD). (e) Rayon des particules du spray et (f) Taux de réaction (cas 10 : modèle GD).

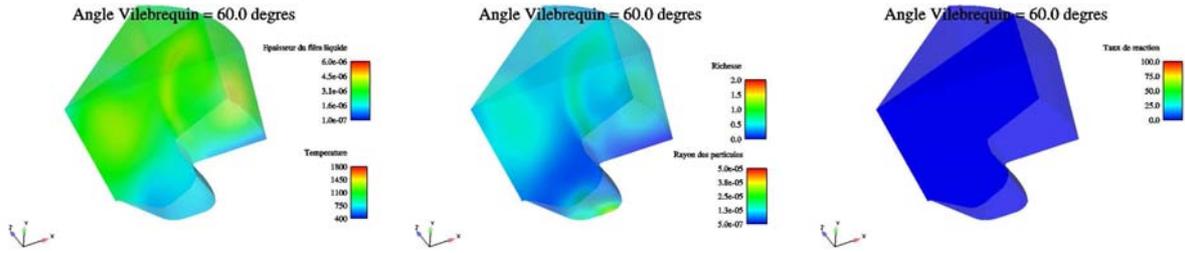


(g) Température du gaz et épaisseur du film liquide (cas 8 : modèle OA). (h) Rayon des particules du spray et (i) Taux de réaction (cas 8 : modèle OA).

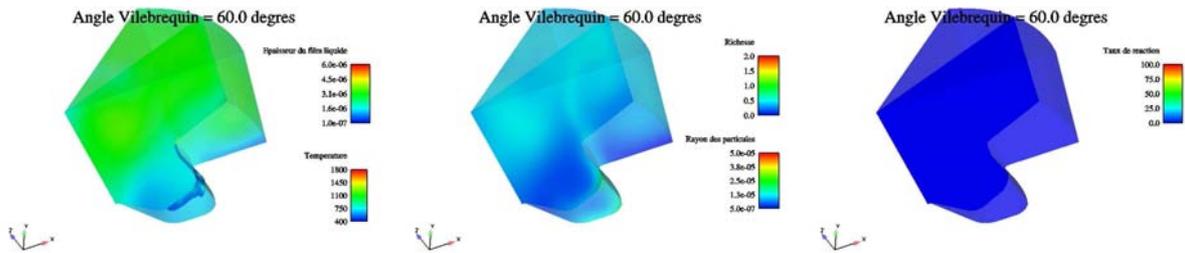
FIG. 9.24 – Champs 3D pour le moteur NADI avec et sans modèle de film liquide et $T_P = 650K$ (cas 7,8 et 10).



(a) Température du gaz (cas 7 : sans film liquide). (b) Rayon des particules du spray et (c) Taux de réaction (cas 7 : sans film liquide).

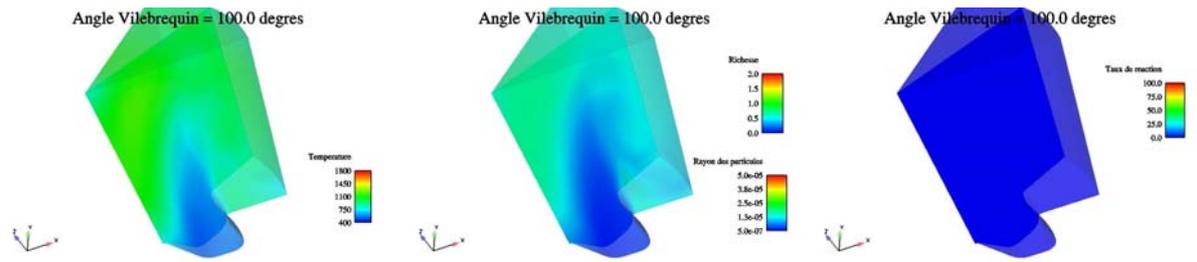


(d) Température du gaz et épaisseur du film liquide (cas 10 : modèle GD). (e) Rayon des particules du spray et (f) Taux de réaction (cas 10 : modèle GD).

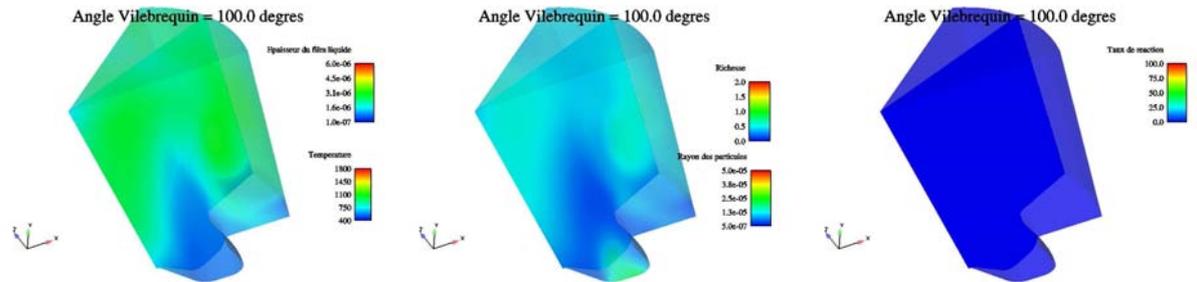


(g) Température du gaz et épaisseur du film liquide (cas 8 : modèle OA). (h) Rayon des particules du spray et (i) Taux de réaction (cas 8 : modèle OA).

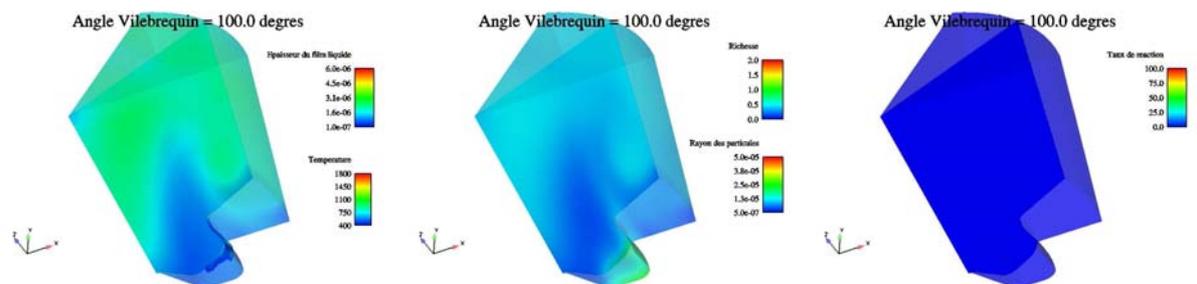
FIG. 9.25 – Champs 3D pour le moteur NADI avec et sans modèle de film liquide et $T_P = 650K$ (cas 7,8 et 10).



(a) Température du gaz (cas 7 : sans film liquide). (b) Rayon des particules du spray et (c) Taux de réaction (cas 7 : sans film richesse du mélange gazeux (cas 7 : liquide). sans film liquide).



(d) Température du gaz et épaisseur du film liquide (cas 10 : modèle GD). (e) Rayon des particules du spray et (f) Taux de réaction (cas 10 : modèle GD). richesse du mélange gazeux (cas 10 : modèle GD).



(g) Température du gaz et épaisseur du film liquide (cas 8 : modèle OA). (h) Rayon des particules du spray et (i) Taux de réaction (cas 8 : modèle OA). richesse du mélange gazeux (cas 8 : modèle OA).

FIG. 9.26 – Champs 3D pour le moteur NADI avec et sans modèle de film liquide et $T_P = 650K$ (cas 7,8 et 10).

B - Analyse des courbes de pression moyenne dans le cylindre en fonction de l'angle vilebrequin

La figure 9.27 montre les courbes de pression obtenues pour tous les cas du moteur NADI étudiés au cours de cette section à l'exception des calculs effectués avec le modèle GD2 puisque les résultats sont quasiment identiques à ceux obtenus avec le modèle GD (couplage du modèle GD2 avec la combustion). C'est un résultat logique puisque le modèle de couplage du film liquide avec la combustion a été conçu pour une flamme de prémélange dans la mesure où il affecte uniquement la vitesse de flamme laminaire. On constate tout d'abord que la pression dans la chambre de combustion est d'autant plus forte que la température de paroi T_P est élevée. C'est la conséquence directe de la diminution des pertes thermiques dans les parois d'une part et de l'amélioration de la préparation du mélange air-carburant d'autre part lorsque T_P augmente. En effet, l'augmentation de

la température de paroi accentue l'évaporation du film liquide et en diminue donc la quantité. Cela constitue donc d'autant plus de carburant à brûler à condition toutefois que l'évaporation ne soit pas trop tardive.

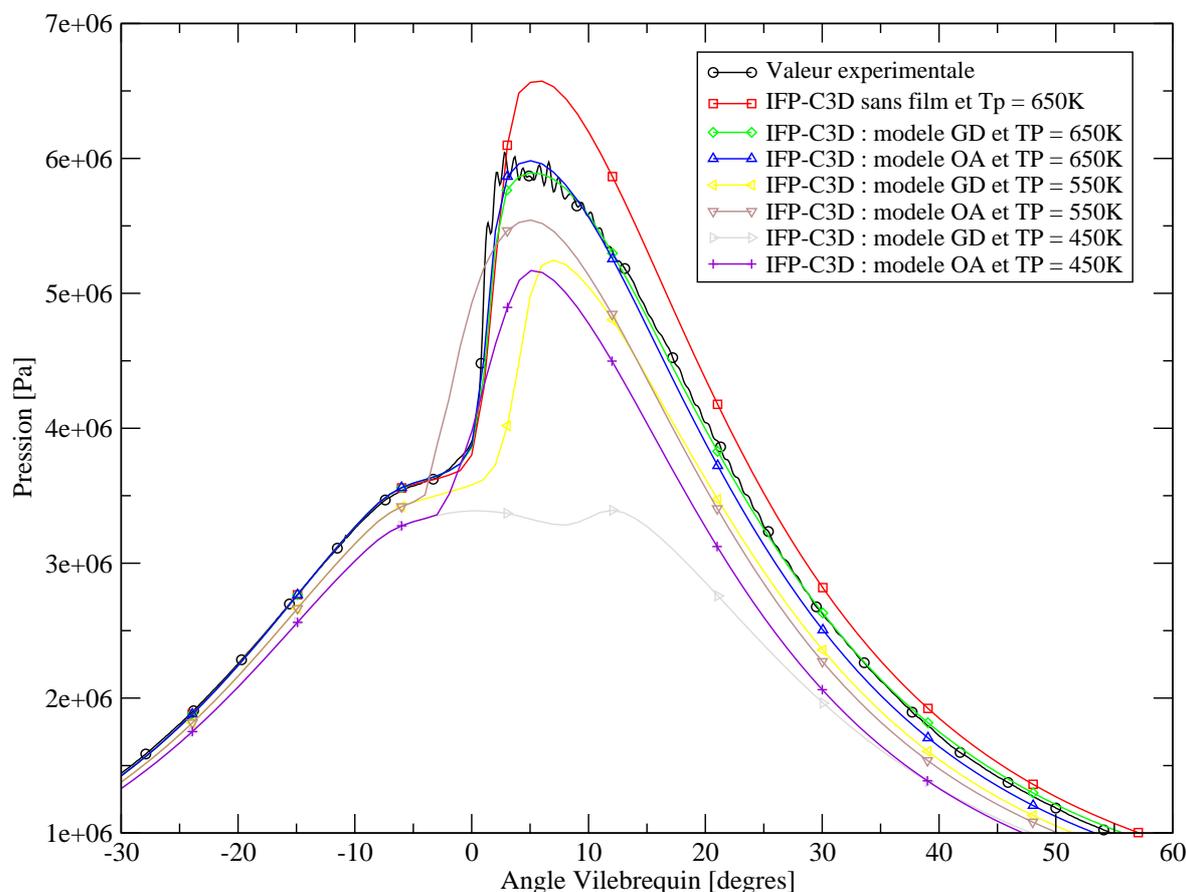
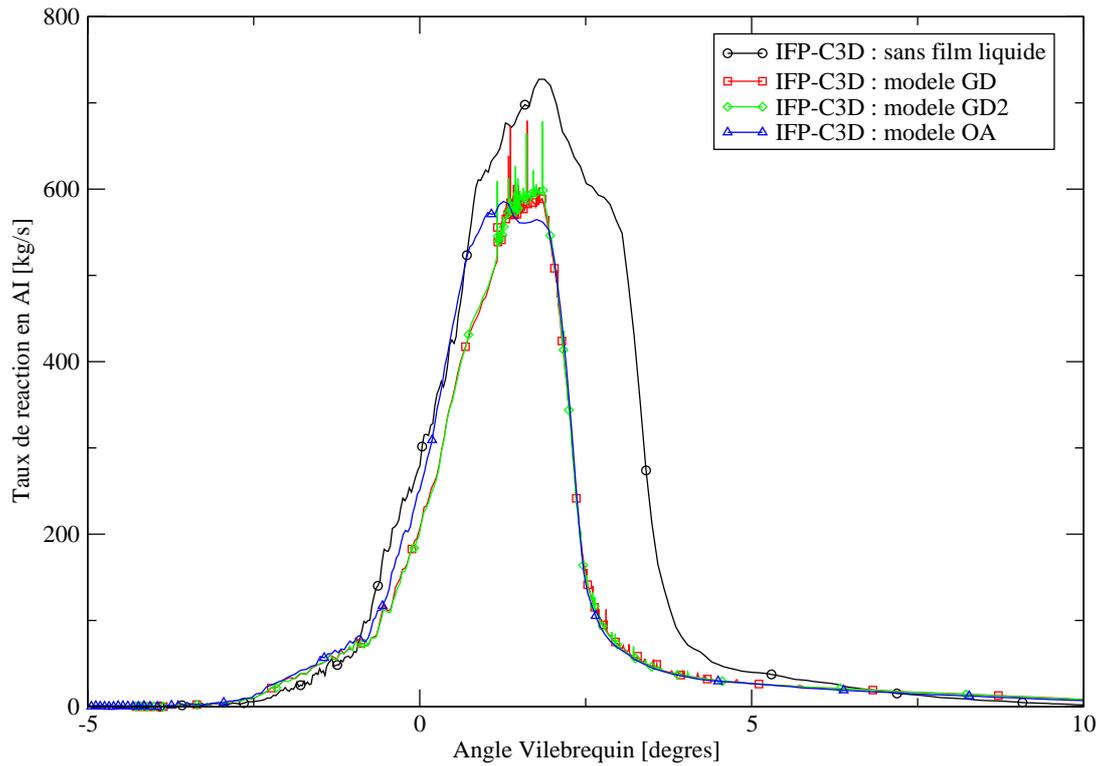


FIG. 9.27 – Pression moyenne dans la chambre de combustion du moteur NADI pour différentes températures de paroi T_P et différents modèles d'évaporation de film liquide.

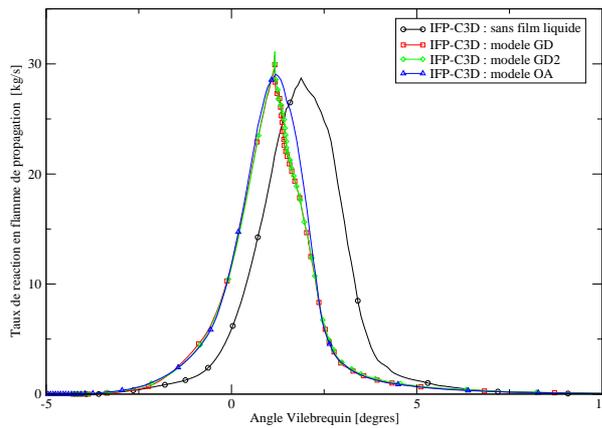
Ensuite, en ce qui concerne la comparaison des courbes de pression obtenues avec les différents modèles étudiés pour chaque température de paroi T_P considérée, on s'intéressera plus particulièrement aux cas 7,8 et 10 à $T_P = 650K$ dans la mesure où cette valeur est proche des données expérimentales disponibles. En fait, on ne dispose pas de mesures concernant la température des parois qui nous permettent d'affirmer que $T_P = 650K$ est la température réelle des parois du moteur. Par contre, on peut affirmer que cette température est sans doute assez réaliste puisqu'elle permet au code de calcul IFP-C3D de retrouver la courbe expérimentale de pression durant la phase de compression. La figure 9.27 montre que l'absence de modèle de film liquide (cas 7) entraîne une forte surestimation de la pression à partir du PMHC alors que les calculs réalisés avec un modèle de film liquide (cas 8 et 10) fournissent une courbe de pression relativement proche de la courbe expérimentale et même presque parfaite en ce qui concerne le modèle GD (cas 10) puisque la détente est correctement reproduite alors que le modèle OA (cas 8) entraîne une sous-estimation de la pression. La surestimation de la pression en l'absence de modèle de film (cas 7) provient d'une évaporation trop rapide du carburant liquide comme le montre la figure 9.28 (d) conduisant à une combustion trop intense comme on le voit sur la figure 9.28 (a). La meilleure représentation de la pression pendant la détente avec le modèle GD (cas 10) qu'avec le modèle OA (cas 8) provient d'une meilleure évaluation des pertes

thermiques dans le film liquide (plus faibles avec le modèle GD comme le montre la figure 9.31 (d)) et d'une évaporation plus intense avec le modèle GD (figure 9.29 (b)). En effet, cette évaporation supplémentaire se retrouve rapidement dans les gaz brûlés (figure 9.28 (e)) pour alimenter une flamme de diffusion qui brûle ainsi de façon plus intense avec le modèle GD qu'avec le modèle OA (figure 9.28 (c)).

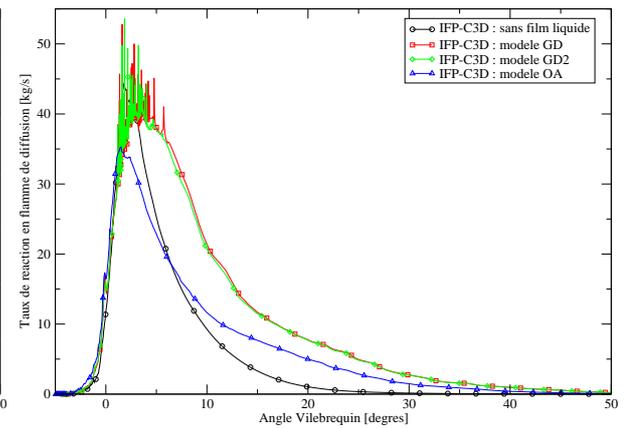
Afin de terminer cette analyse des courbes de pression (figure 9.27), on notera que la pression maximale est plus élevée et que le délai d'auto inflammation est plus court avec le modèle OA (cas 1 et 4) qu'avec le modèle GD (cas 3 et 6) pour une température de paroi T_P de $550K$ et de $450K$ puisque l'évaporation du film liquide avant l'auto inflammation est plus forte avec le modèle OA qu'avec le modèle GD comme le montre les figures 9.29 (a) et (b). Par contre, il est surprenant de constater une diminution du délai d'auto inflammation lorsque l'on passe de $T_P = 650K$ à $T_P = 550K$ avec le modèle OA (cas 7 à 4). En effet, avec le modèle GD (cas 3, 6 et 10), plus la température de paroi T_P diminue plus le délai d'auto inflammation augmente en raison de l'augmentation des pertes thermiques dans les parois et la diminution de l'évaporation qui en résulte. Cette tendance semble donc plus logique que celle observée avec le modèle OA que l'on n'explique pas d'ailleurs. En tout état de cause, pour une température de paroi T_P de $450K$, le comportement du modèle GD (cas 3) conduit à une quasi absence de combustion alors que le modèle OA (cas 1) semble conduire à une combustion relativement proche de celle obtenue avec $T_P = 550K$.



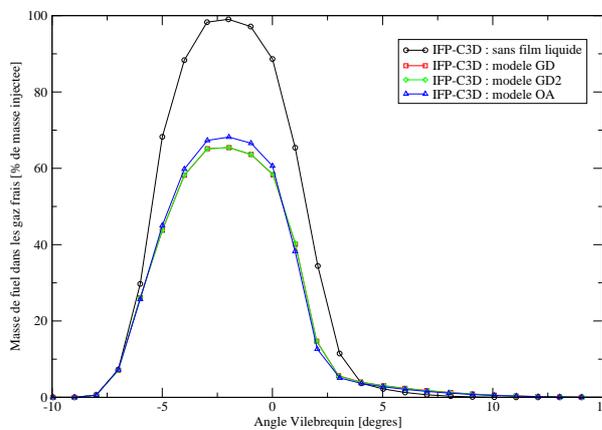
(a) Taux de réaction en auto inflammation.



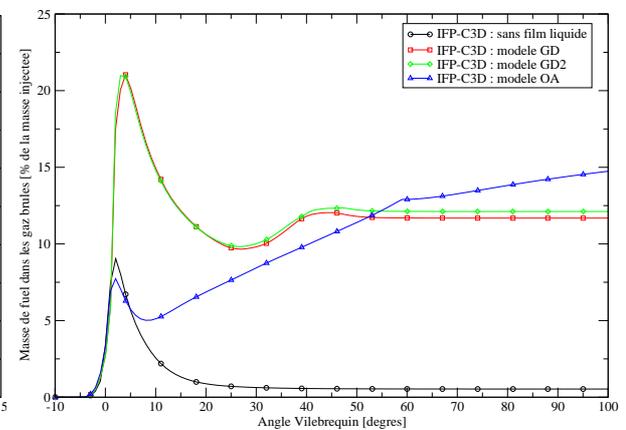
(b) Taux de réaction en flamme de propagation.



(c) Taux de réaction en flamme de diffusion.



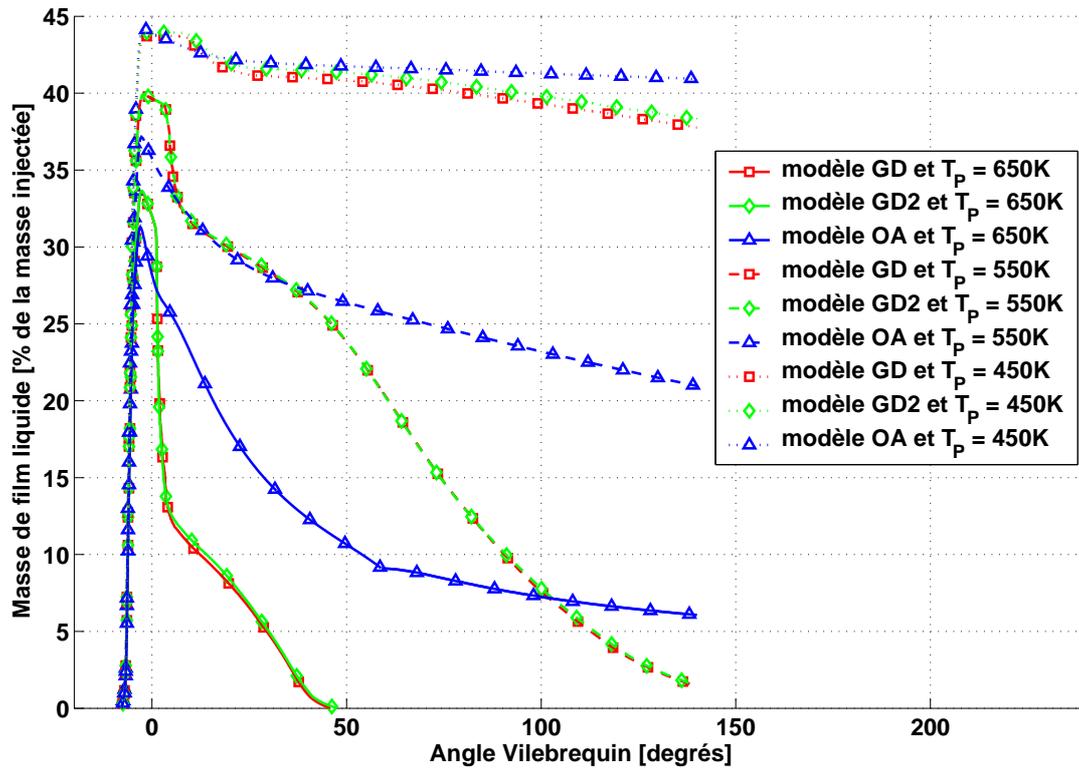
(d) Masse de fuel dans les gaz frais.



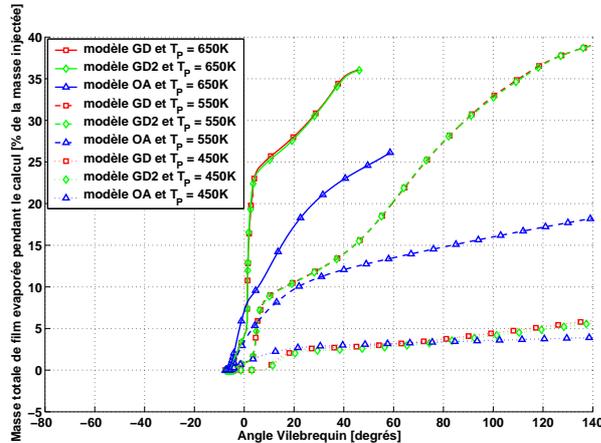
(e) Masse de fuel dans les gaz brûlés.

FIG. 9.28 – Combustion et masse de fuel gazeux dans la chambre de combustion du moteur NADI avec une température de paroi $T_P = 650K$ pour différents modèles d'évaporation de film liquide.

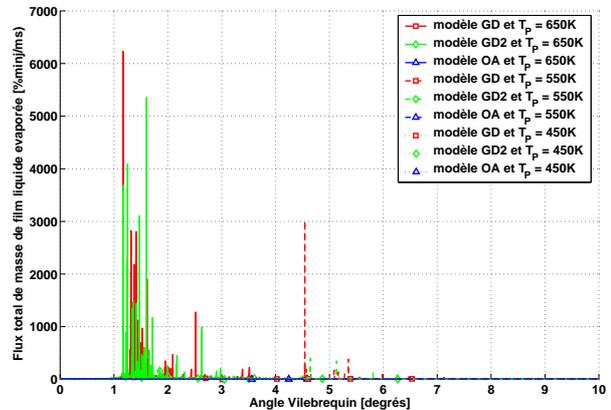
C - Analyse du film liquide



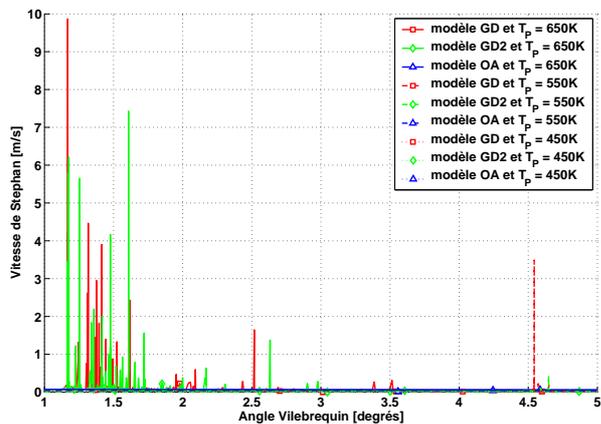
(a) Masse totale du film liquide.



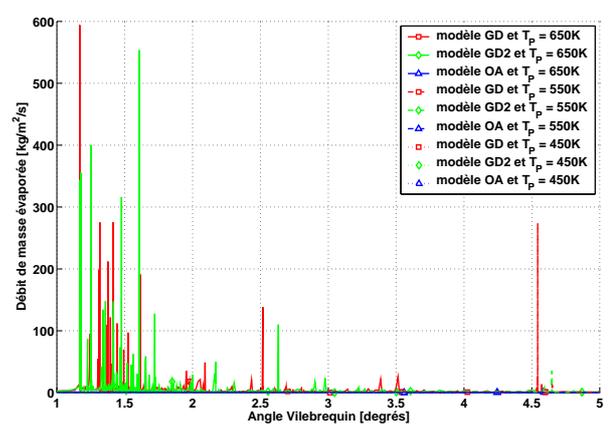
(b) Masse totale de film liquide évaporée.



(c) Flux total de masse de film liquide évaporée.

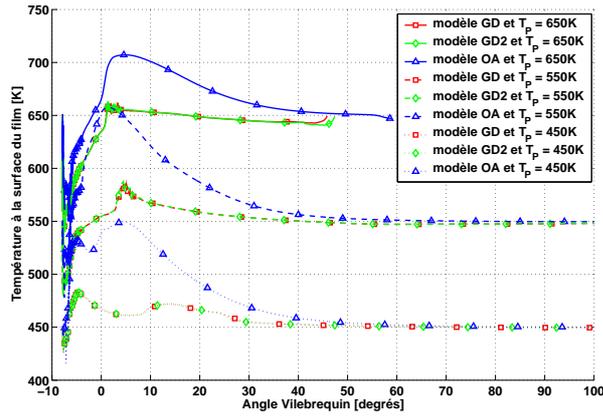


(d) Vitesse de Stephan moyenne.

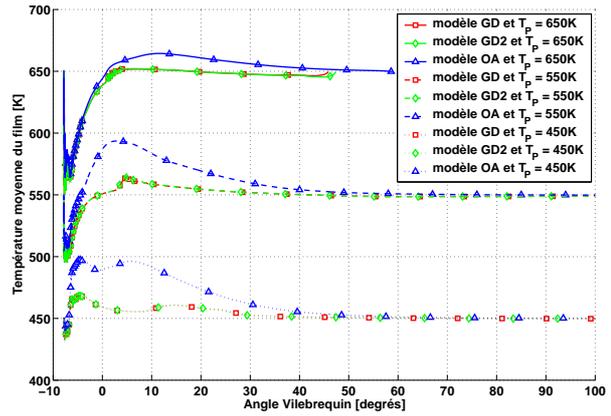


(e) Débit moyen de masse évaporée.

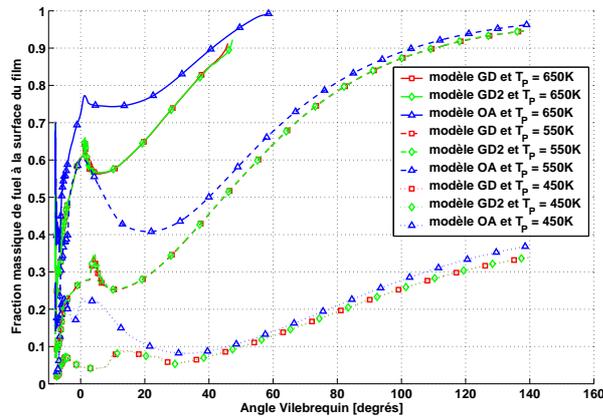
FIG. 9.29 – Comportement du film liquide dans un moteur NADI pour différentes températures de paroi T_p et différents modèles d'évaporation de film liquide.



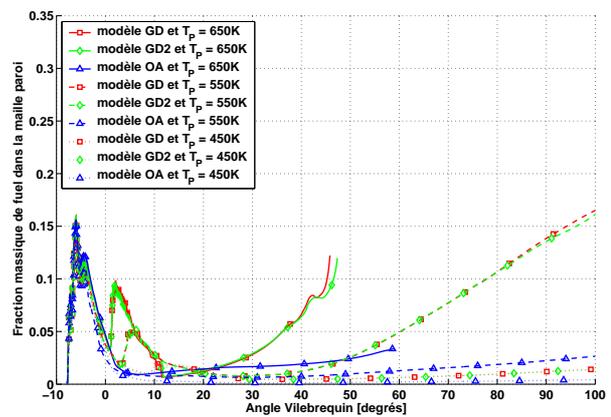
(a) Température moyenne à la surface du film liquide.



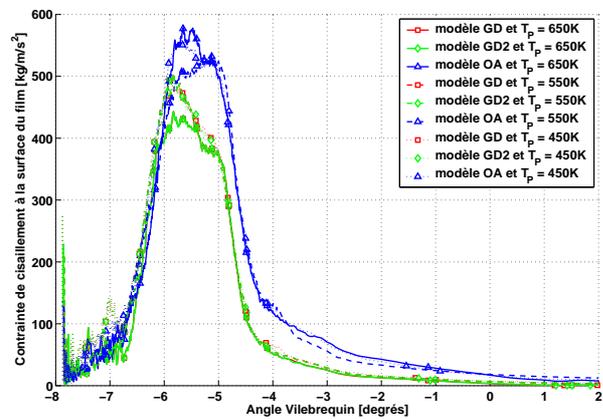
(b) Température moyenne du film liquide.



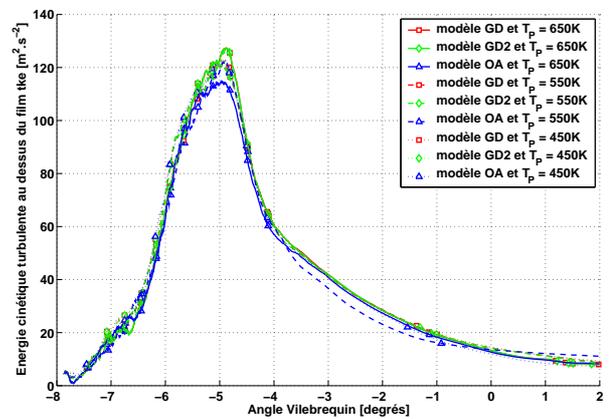
(c) Fraction massique moyenne de fuel à la surface du film liquide.



(d) Fraction massique moyenne de fuel dans les mailles parois contenant du film.



(e) Contrainte de cisaillement moyenne à la surface du film liquide.



(f) Energie cinétique turbulente moyenne dans les mailles parois contenant du film.

FIG. 9.30 – Comportement du film liquide dans un moteur NADI pour différentes températures de paroi T_p et différents modèles d'évaporation de film liquide.

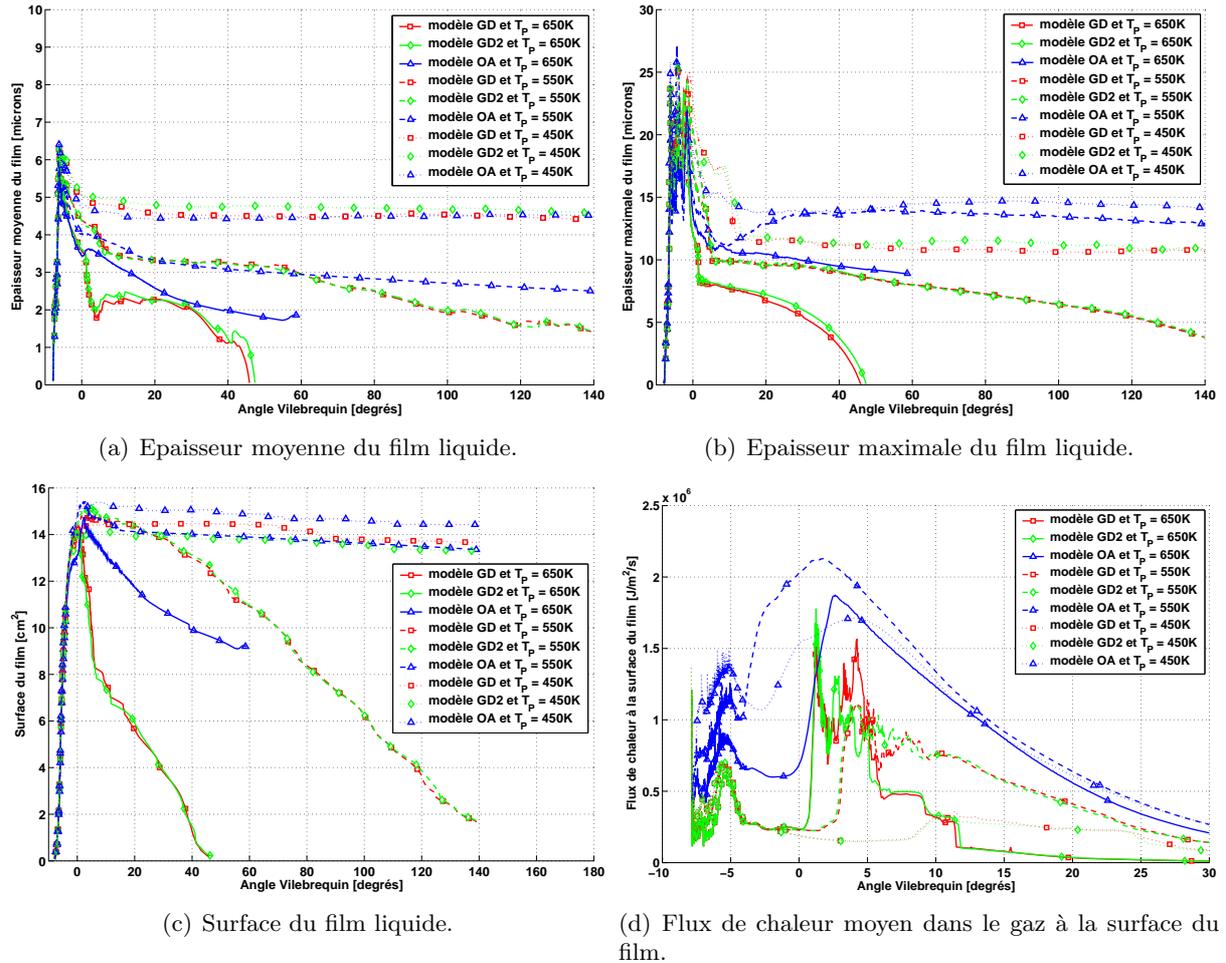


FIG. 9.31 – Comportement du film liquide dans un moteur NADI pour différentes températures de paroi T_P et différents modèles d'évaporation de film liquide.

La figure 9.29 (a) montre que la masse de film liquide formé dans le bol du piston atteint entre 30 et 45 % de la masse injectée suivant les conditions thermiques du moteur et le modèle d'évaporation de film liquide utilisé. Cette proportion est donc très importante surtout si on la compare à celle du moteur essence, mais comme pour ce dernier, la quantité de film formé diminue au fur et mesure que l'on augmente la température du piston. Par ailleurs, comme cela a déjà été mentionné précédemment, on constate que les différences de comportement entre le modèle GD2 (cas 2, 5 et 9) et son homologue GD (cas 3, 6 et 10) sont quasiment inexistantes. Par contre, les figures 9.29 (a), (b) et (c) montrent que l'évaporation du film liquide est beaucoup plus intense avec le modèle GD (cas 3, 6 et 10) qu'avec le modèle OA (cas 1, 4 et 8) et cela plus particulièrement pendant la phase d'interaction de la combustion avec le film liquide comme en atteste les débits de masse évaporée très importants obtenus entre 1° et 5° vilebrequin (figures 9.29 (c) et (e)). Ainsi, pour une température de paroi T_P de $650K$, le film liquide disparaît avant 50° vilebrequin avec les modèles GD (cas 10) alors qu'il existe toujours à la fin du calcul avec le modèle OA (cas 8). Les différences sont tout aussi importantes pour $T_P = 550K$ puisque la quantité de film liquide restante à la fin du calcul est plus faible à cette température de paroi avec le modèle GD (cas 6) qu'en utilisant le modèle OA avec $T_P = 650K$ (cas 8).

On remarque également que le film liquide s'évapore de façon discontinue pendant l'auto inflammation avec les modèles GD et GD2 (cas 2,3,5,6,9 et 10) comme le montrent

les figures 9.29 (c) et (e). Ces résultats proviennent de la prise en compte des phases transitoires de l'évolution de la température et de la fraction massique de fuel dans la couche limite gazeuse située au dessus du film. En effet, cela entraîne une très forte sensibilité (comme en atteste l'augmentation des flux thermiques à la surface du film obtenue avec les modèles GD et GD2 entre 0° et 5° vilebrequin sur la figure 9.31 (d)) aux changements brutaux de température et de composition du mélange engendrés par l'auto inflammation qui n'a pas lieu au même moment dans toutes les mailles paroi dans lesquelles se trouve un film liquide. Les discontinuités observées sont accentuées par le fait que de nombreuses particules de film liquide disparaissent très rapidement à cause de l'intensité très élevée de l'évaporation.

De la même façon que pour le moteur GDI, les figures 9.30 (a) et (b) montrent que la température du film liquide pendant l'interaction avec la combustion augmente beaucoup moins fortement avec les modèles GD et GD2 qu'avec le modèle OA, mais pour des raisons différentes. En effet, les modèles GD et GD2 entraînent une faible augmentation de la température du film liquide à cause du niveau élevé de l'évaporation pendant l'auto inflammation. Finalement, la seule période où l'évaporation du film est plus intense avec le modèle OA qu'avec le modèle GD se situe avant l'auto inflammation comme en atteste la figure 9.29 (b). C'est pourquoi, le maximum de la masse de film liquide déposé sur le piston est obtenu avec les modèles GD et GD2 comme le montre la figure 9.29 (a). Les raisons principales qui expliquent les différences de masse évaporée entre les modèles GD et GD2 et le modèle OA sont les mêmes que celles exposées dans la section précédente :

- Une surestimation de la contrainte de cisaillement et des flux thermiques avec le modèle OA par rapport aux modèles GD et GD2 comme le montrent les figures 9.30 (e) et 9.31 (d) qui entraîne une surévaluation du débit de masse évaporée par le modèle OA avant l'auto inflammation ;
- La prise en compte des transitoires de température et de fraction massique de fuel dans la couche limite au dessus du film liquide par les modèles GD et GD2, ce qui explique en partie l'évaporation nettement plus intense obtenue avec les modèles GD et GD2 pendant l'auto inflammation ;
- La prise en compte de la température et de la composition du mélange dans le calcul du coefficient de diffusion du fuel et de la masse volumique du gaz à la surface du film liquide par les modèles GD et GD2, ce qui a tendance à augmenter le débit évaporé par rapport au modèle OA. C'est d'autant plus vrai que le mélange à la surface du film est riche en fuel comme c'est le cas lorsque la pression baisse et que donc la fraction massique du fuel à l'interface liquide-gaz augmente (figure 9.30 (c)). En effet, alors que la masse volumique à la surface du film devient plus grande puisque le fuel est plus lourd que l'air, cette caractéristique importante n'est pas prise en compte par le modèle OA.

On remarque la proximité des résultats obtenus en terme d'énergie cinétique turbulente moyenne dans les mailles paroi contenant du film liquide quelque soit la température de paroi ou le modèle utilisé comme le montre la figure 9.30 (f). C'est conforme à l'analyse qui a été faite dans la section précédente. On notera également que le film liquide déposé dans le moteur NADI est nettement plus épais que celui déposé dans le moteur GDI puisque l'épaisseur moyenne du film varie entre 2 et 6 microns et que son épaisseur maximale peut atteindre 25 microns dans le moteur NADI comme le montrent les figures 9.31 (a) et (b).

D - Analyse des niveaux de polluants

Pour terminer cette étude sur le moteur NADI, nous avons regroupé les résultats concernant les émissions de polluants obtenues en terme de monoxyde de carbone CO, d'hydrocarbures imbrûlés HC (total et uniquement gazeux) et de suie pour tous les cas calculés et pour le moteur qui a tourné au banc dans le tableau 9.7. Il convient de préciser que les valeurs expérimentales ne doivent pas être prises comme des valeurs absolues de ce que l'on doit retrouver par le calcul mais comme des références afin d'exprimer des tendances. En effet, les mesures expérimentales ont été effectuées à l'échappement alors que les émissions données par le calcul sont celles obtenues à 140° vilebrequin. L'influence de la température de paroi est la même que pour le moteur GDI. On constate en effet une baisse des émissions de CO et une forte augmentation des émissions totales de HC avec la diminution de la température du piston. Les raisons sont également identiques, à savoir une diminution de la vitesse d'évaporation du film lorsque la température de paroi baisse. Maintenant, si on compare les émissions de polluants obtenues par les différents calculs effectués avec $T_p = 650K$ et les données obtenues au banc moteur, on constate que les résultats issus du modèle GD sont ceux qui se rapprochent le plus des valeurs expérimentales quelque soit le polluant bien que les écarts demeurent importants. Seules les émissions de CO sont finalement assez proches. Cependant, il ne faut pas en tirer de conclusions hâtives dans la mesure où les résultats ne sont pas rigoureusement comparables. On conclura donc simplement que le modèle GD améliore très sensiblement les prédictions de polluants par rapport au modèle OA. En effet, on obtient le bon ordre de grandeur pour les suies alors que le modèle OA n'en prévoit pas. Les niveaux de CO et HC prévus sont divisés par deux par rapport au modèle OA, ce qui semble également aller dans le bon sens. Pour terminer, si on compare les résultats obtenus avec les différents modèles de film pour des températures de paroi de $550K$ et $450K$, on constate que les niveaux de HC total sont globalement identiques pour tous les modèles bien que l'évaporation du film liquide soit en moyenne beaucoup plus intense avec les modèles GD et GD2 qu'avec le modèle OA. Cela signifie simplement que l'évaporation supplémentaire engendrée par les modèles GD et GD2 est trop tardive pour brûler et contribue donc à l'augmentation des émissions de HC sous forme gazeuse qui compense la baisse des émissions de HC sous forme liquide comme on le voit sur le tableau 9.7.

Température du piston T_P [K]	650K				
Cas moteur	valeurs expérimentales	calcul sans film	calcul avec modèle GD	calcul avec modèle GD2	calcul avec modèle OA
CO [g/(kW.h)]	7.1	2.9	6.0	6.1	12.6
HC total [ppmc]	?	257	5622	5830	10599
HC gazeux [ppmc]	1659	257	5622	5830	7674
Suie [g/(kW.h)]	0.30	0.00	0.13	0.13	0.00
Température du piston T_P [K]	550K				
Cas moteur	valeurs expérimentales	calcul sans film	calcul avec modèle GD	calcul avec modèle GD2	calcul avec modèle OA
CO [g/(kW.h)]	X	X	5.5	5.6	12.8
HC total [ppmc]	X	X	14570	14676	15542
HC gazeux [ppmc]	X	X	13887	13970	5409
Suie [g/(kW.h)]	X	X	0.03	0.03	0.00
Température du piston T_P [K]	450K				
Cas moteur	valeurs expérimentales	calcul sans film	calcul avec modèle GD	calcul avec modèle GD2	calcul avec modèle OA
CO [g/(kW.h)]	X	X	4.0	4.2	6.6
HC total [ppmc]	X	X	22678	22803	20901
HC gazeux [ppmc]	X	X	4348	4222	1047
Suie [g/(kW.h)]	X	X	0.00	0.00	0.00

TAB. 9.7 – Emissions de polluants pour les différents cas moteur NADI.

9.3.4 Conclusions

Afin de conclure sur l'étude du cas moteur NADI à travers l'influence du nouveau modèle d'évaporation de film liquide et d'interaction de la combustion avec le film, on souligne que les différences de comportement entre les modèles GD et GD2 d'une part et le modèle OA d'autre part sont similaires à celles déjà observées lors de l'étude du moteur GDI. En particulier, les modèles GD et GD2 conduisent à une évaporation largement plus rapide du film liquide que le modèle OA, sauf avant l'auto inflammation. L'influence de la température des parois est également similaire. Le grand changement entre le moteur GDI et le moteur NADI concerne l'interaction entre le film et la combustion. En effet, en raison du caractère très soudain et intense de l'auto inflammation dans un moteur diesel, son interaction avec le film liquide est beaucoup plus forte que l'interaction de la flamme de prémélange avec le film dans le moteur GDI. C'est d'ailleurs pendant l'auto inflammation que l'évaporation du film liquide est la plus rapide dans un moteur NADI à condition que le modèle GD ou GD2 soit utilisé. Cette augmentation de l'évaporation engendrée par l'auto inflammation alimente directement une flamme de diffusion. Cepen-

dant cette flamme de diffusion n'apparaît pas spécifiquement avec le modèle GD mais se voit simplement intensifiée. Il en résulte une courbe de pression en meilleur accord les données expérimentales.

9.4 Conclusions

Cette étude paramétrique d'un moteur essence et d'un moteur diesel a montré que la température de paroi T_P est un paramètre déterminant sur la formation et l'évaporation du film liquide et donc les émissions de polluants. Plus T_P est grande, plus le film liquide s'évapore rapidement. Il est donc nécessaire de connaître avec précision le champ de température sur la surface interne de la chambre de combustion afin d'assurer une précision optimale des résultats des calculs. Cette étude a également mis évidence les différences importantes de comportement entre le modèle d'évaporation utilisé pour le moment dans le code de calcul IFP-C3D (modèle OA) et le modèle développé au cours de cette thèse (modèle GD). D'une façon générale, le modèle GD conduit à une évaporation plus rapide du film liquide que le modèle OA, tout en diminuant les flux thermiques dans les parois du moteur. En ce qui concerne plus spécifiquement l'interaction de la combustion avec le film liquide, l'utilisation du modèle GD a permis de montrer que l'auto inflammation (moteur diesel) entraîne une forte augmentation de l'évaporation du film liquide alors que ce n'est pas le cas de la flamme de prémélange (moteur essence). Par ailleurs, dans les deux cas, le modèle GD prévoit l'existence d'une flamme de diffusion alimentée par l'évaporation du film liquide lors de la détente. C'est une vraie nouveauté par rapport aux résultats fournis par le modèle OA. Malheureusement, faute de validations expérimentales on ne peut pas affirmer que cette flamme de diffusion se développe réellement dans un moteur. Néanmoins, la comparaison des courbes de pression entre les calculs et un moteur ayant tourné au banc semble montrer que le comportement du modèle GD est plus réaliste que le modèle OA puisqu'il améliore la prédiction des résultats.

Conclusion et perspectives

Au cours de ce travail de thèse, nous avons étudié l'interaction flamme-film liquide à l'aide d'analyses numériques et de nombreux développements théoriques. La première étape a consisté à effectuer des simulations numériques directes (DNS) de cette interaction en régime laminaire afin de cerner les mécanismes fondamentaux qui gouvernent ce processus. L'analyse des résultats a permis de mettre en évidence que l'interaction flamme-paroi avec film liquide est gouvernée par la formation du mélange air-carburant contrairement à l'interaction flamme-paroi sèche qui est pilotée par les pertes thermiques. En effet, en régime laminaire la flamme s'éteint à cause des richesses trop élevées qu'elle rencontre et non pas à cause des pertes thermiques. En outre, la cinétique chimique semble avoir peu d'influence sur l'interaction flamme-film liquide. Nous avons également montré que les distances de coïncement sont beaucoup plus grandes que pour l'interaction flamme paroi sèche et que le flux de chaleur maximal dans la paroi est beaucoup plus faible lorsque la température de cette dernière est élevée. Par ailleurs, il a été identifié que les deux paramètres les plus importants de l'interaction sont la température de paroi et le temps d'existence du film liquide avant interaction qui est contrôlé par la combinaison du régime moteur et de l'avance à l'injection. Bien que ces premières simulations ont été effectuées dans des conditions très éloignées des conditions réelles de fonctionnement des moteurs à combustion interne, tous ces résultats ont permis de mettre en évidence la dépendance de l'interaction flamme-film liquide aux paramètres des moteurs mais surtout la nécessité de modéliser correctement la préparation du mélange air-carburant et donc l'évaporation du film liquide.

Dans une seconde partie, nous avons étudié les mécanismes de l'évaporation d'un film liquide. Pour ce faire, nous avons tout d'abord montré qu'il est nécessaire de tenir compte d'une thermochimie complexe dans le calcul de l'évaporation. Par la suite, les modèles de film liquide développés pour effectuer les simulations numériques directes d'interaction flamme-film liquide en régime laminaire ont été validés. Ces modèles ont ainsi pu servir de base pour étudier l'évaporation d'un film liquide en régime turbulent en effectuant des simulations numériques directes tridimensionnelles en canal périodique. Nous avons ainsi mis en évidence le changement de structure de la couche limite turbulente lorsque celle-ci subit l'influence conjuguée de forts gradients de densité et de viscosité et de la vitesse de Stephan engendrée par l'évaporation d'un film liquide. En particulier, il a été montré que :

- tous les flux à l'interface liquide-gaz (quantité de mouvement, masse et énergie) sont fortement diminués par les gradients de densité et le soufflage de la couche limite par l'évaporation.
- le maximum de la contrainte de cisaillement est déplacé de la surface du film liquide vers l'intérieur de la couche limite, et il faut en tenir compte pour la modélisation de la turbulence à proximité d'un film liquide.
- La sous-couche visqueuse s'épaissit avec l'augmentation des gradients de masse volu-

mique et de viscosité et de la vitesse de Stephan. Par ailleurs, nous avons montré que l'évaporation du film subit de fortes fluctuations spatiales en raison de la turbulence. Enfin, de nouvelles lois de paroi qui tiennent compte des phénomènes physiques cités ci-dessus ont été développées pour une gamme étendue de vitesse d'évaporation et de gradients de densité.

Dans une troisième partie, un modèle d'évaporation de film liquide mono composant a été développé pour le formalisme RANS (Reynolds Average Navier Stokes) en intégrant au maximum les contraintes liés aux moteurs automobiles. Les équations du modèle sont basées l'utilisation d'un profil de température du troisième ordre dans le film liquide et de lois de paroi développées avec la DNS. Les phases transitoires de la thermique dans le film liquide sont également prises en compte. Par ailleurs, ce modèle a été implanté dans le code de calcul IFP-C3D en utilisant une méthodologie innovante d'intégration des lois de paroi. Enfin, le modèle a été partiellement validé en montrant un très bon accord avec les résultats de DNS.

Dans une quatrième partie, un modèle d'interaction d'une flamme de prémélange avec un film liquide a été développé en calculant une vitesse de consommation moyenne de flamme qui tient à la fois compte des pertes thermiques éventuelles de la flamme dans le film liquide et du profil de richesse dans la couche limite située au-dessus du film liquide grâce aux données fournies par le modèle de film liquide.

Enfin, dans la dernière partie de la thèse, une étude paramétrique d'un moteur essence et d'un moteur diesel a été effectuée avec le code de calcul IFP-C3D. Elle a confirmé que la température de paroi est un paramètre déterminant sur la formation et l'évaporation du film liquide et donc les émissions de polluants. Plus cette température est grande, plus le film liquide s'évapore rapidement. Cela montre qu'il est nécessaire de connaître avec précision le champ de température sur la surface interne de la chambre de combustion afin d'assurer une précision optimale des résultats des calculs. Cette étude a également mis en évidence les différences de comportement importantes entre le modèle d'évaporation utilisé pour le moment dans le code de calcul IFP-C3D (modèle OA) et le modèle développé au cours de cette thèse (modèle GD). D'une façon générale, le modèle GD conduit à une évaporation plus rapide du film liquide que le modèle OA, tout en diminuant les flux thermiques dans les parois du moteur. En ce qui concerne plus spécifiquement l'interaction de la combustion avec le film liquide, l'utilisation du modèle GD a permis de montrer que l'auto inflammation (moteur diesel) entraîne une forte augmentation de l'évaporation du film liquide alors que ce n'est pas le cas de la flamme de prémélange (moteur essence). Par ailleurs, dans les deux cas, le modèle GD prévoit l'existence d'une flamme de diffusion alimentée par l'évaporation du film liquide lors de la détente. C'est une vraie nouveauté par rapport aux résultats fournis par le modèle OA. Malheureusement, faute de validations expérimentales on ne peut pas affirmer que cette flamme de diffusion se développe réellement dans un moteur. Néanmoins, la comparaison des courbes de pression entre les calculs et un moteur ayant tourné au banc semble montrer que le comportement du modèle GD est plus réaliste que le modèle OA puisqu'il améliore la prédiction des résultats.

L'étude menée dans cette thèse nous a permis de mieux comprendre les mécanismes physiques régissant l'évaporation d'un film liquide et son interaction avec la combustion. Cependant, de nombreuses améliorations du modèle d'évaporation de film liquide sont souhaitables afin d'en accroître la précision et en étendre le domaine de validité. Ainsi, il conviendrait tout d'abord d'adapter la méthodologie utilisée dans ce travail pour établir

une version multi composants du modèle d'évaporation. En effet, les composants les plus lourds s'évaporent plus lentement. Ils restent donc sur les parois des moteurs automobiles et contribuent fortement aux émissions de polluants. Il conviendrait également d'améliorer la prédictibilité de l'évaporation pendant les phases transitoires. En effet, les lois de parois sont construites à partir de l'hypothèse de quasi stationnarité et sont donc en général inadaptée à la représentation correcte des phases transitoires qui constituent pourtant l'essentiel du comportement d'un moteur à piston. La prise en compte des ondulations se formant à la surface du film liquide constitue également une voie intéressante d'investigation. Bien que ce travail s'éloigne quelque peu du sujet traité dans cette thèse, la modélisation de la formation du film liquide par impact du spray sur la paroi constitue un vecteur d'amélioration très important de la prise en compte de l'interaction flamme-film liquide dans la mesure où l'évaporation du film liquide dépend en grande partie de son épaisseur. Il est en effet inutile de posséder un modèle précis d'évaporation de film liquide avec précision si on ne connaît pas la quantité de liquide qui se dépose sur les parois. Enfin, il serait très intéressant de valider les modèles de formation et d'évaporation du film liquide par confrontation avec des mesures expérimentales dédiées.

Bibliographie

1. T. Alshaalan and C.J. Rutland. Turbulence, scalar transport and reaction rates in flame wall interaction. *Proc. of the Combustion Institute*, 27 :793–799, 1998. JX.
2. A. Ammar and C. Habchi. Développement d’un modèle d’évaporation de film de carburants multicompoants dans le code multidimensionnel kiva-mb. Rapport IFP Rapport 56 748, Institut français du pétrole, 2002.
3. A. Amsden. Kiva-3v : A block-structured kiva program for engines with vertical or canted valves. Technical Report LA-13313-MS, Los Alamos National Laboratory report, 1997.
4. A. Amsden. Kiva-3v, release 2, improvements to kiva-3v. Technical Report LA-13608-MS, Los Alamos National Laboratory report, 1999.
5. A.A. Amsden, P.J. O’Rourke, and T.D. Butler. *KIVA-II : A computer program for chemically reactive flows with sprays*. Los Alamos National Laboratory, 1989.
6. C. Angelberger. *Contributions a la modélisation de l’interaction flamme-paroi et des flux parietaux dans les moteurs a allumage commande*. Ph.d, INP, Toulouse, 1997. Ph.D.
7. L. Artal and F. Nicoud. Direct numerical simulation of turbulent multi-species channel flow. In *ERCOFTAC Workshop - DLES6*, Poitiers, France, 2005. NF.
8. L. Benoit and F. Nicoud. Numerical assessment of thermo-acoustic instabilities in gas turbines. *International Journal for Numerical Methods in Fluids*, 47 :849–855, 2005. NF.
9. K.J. Beverley, J.H. Clint, and P.D.I. Fletcher. Evaporation rates of pure liquids measured using a gravimetric technique. *Phys. Chem. Chem. Phys.*, 1 :149–153, 1999.
10. P. Boudier, S. Henriot, T. Poinso, and Baritaud T. A model for turbulent flame ignition and propagation in spark ignition engines. In The Combustion Institute, editor, *Twenty-Fourth Symposium (International) on Combustion*, pages 503–510, 1992. GB.
11. G. Bruneaux. *Etude numerique de l’interaction flamme parois*. Phd, Ecole Centrale Paris, 1996. PhD.
12. G. Bruneaux, K. Akselvoll, T. Poinso, and J. Ferziger. Flame-wall interaction in a turbulent channel flow. *Combustion and Flame*, 107(1/2) :27–44, 1996.
13. S. Candel, D. Veynante, F. Lacas, E. Maistret, N. Darabiha, and T. Poinso. Coherent flame model : applications and recent extensions. In B. Ed. Larrouturou, editor, *Advances in combustion modeling. Series on advances in mathematics for applied sciences*, pages 19–64. World Scientific, Singapore, 1990.
14. S. Candel, D. Veynante, F. Lacas, E. Maistret, and T. Poinso. Flamelet concepts in turbulent combustion modeling. In *9th Conf. (Int.) on Heat Transfer*, Jerusalem, 1990.

15. S.M. Candel and T. Poinso. Flame stretch and the balance equation for the flame surface area. *Combust. Sci. Tech.*, 70 :1–15, 1990.
16. R.S. Cant, S.B. Pope, and K.N.C. Bray. Modelling of flamelet surface to volume ratio in turbulent premixed combustion. In *23rd Symp. (Int.) on Combustion*, pages 809–815, Orleans, 1990. The Combustion Institute, Pittsburgh.
17. S.I. Chernyshenko and M.F. Baig. The mechanism of streak formation in near-wall turbulence. *Journal of Fluid Mechanics*, 544 :99–131, 2005.
18. H. Choi, P. Moin, and J. Kim. Direct numerical simulation of turbulent flow over riblets. *Journal of Fluid Mechanics*, 255 :503–539, 1993.
19. O. Colin and A. Benkenida. The 3-zones extended coherent flame model (ecfm3z) for computing premixed/diffusion combustion. *Oil and Gas Science and Technology-Rev. IFP*, 59(6) :593–609, 2004.
20. O. Colin and M. Rudgyard. Development of high-order taylor-galerkin schemes for unsteady calculations. *Journal of Computational Physics*, 162(2) :338–371, 2000. jx.
21. L.D Dailey and R.H Pletcher. Large eddy simulation of constant heat flux turbulent channel flow with property variations. *AIAA*, 98-0791, 1998.
22. A. Devesa and F. Nicoud. Using dns for deriving anisothermal wall functions for rans and les. In *ERCOFTAC Workshop - DLES6*, Poitiers, France, 2005. NF.
23. H. Foucart. *Modélisation tridimensionnelle des films liquides pariétaux dans les moteurs à combustion interne*. PhD thesis, IFP et Université de Rouen, 1999.
24. H. Foucart, C. Habchi, J.F. Le Coz, and T. Baritaud. Development of a three dimensional model of wall fuel liquid film for internal combustion engines. *SAE paper*, (980133), 1998.
25. C. Habchi. Modélisation de l'interaction spray-film liquide par une approche lagrangienne incluant splashing et évaporation. Rapport IFP Rapport 58 472, Institut français du pétrole, 2005.
26. C. Habchi. Modélisation de l'interaction spray/paroi dans les moteurs à combustion interne. Technical Report Rapport interne 59 166, IFP, 2006.
27. C. Habchi, F-A. Lafossas, Ph. Béard, and D. Broseta. Formulation of one-component fuel lumping model to assess the effects of fuel thermodynamic properties on internal combustion engine mixture preparation and combustion. *Journal of Fuels and Lubricants*, 113(SAE Transactions paper N° 2004-01-1996), 2004.
28. Z. Han and Z. Xu. Wall film dynamics modeling for impinging sprays in engines. *SAE paper*, (2004-01-0099), 2004.
29. Z. Han, Z. Xu, and N. Trigui. Spray/wall interaction models for multidimensional engine simulation. *Int.J.Engine Research*, 1 :127 :146, 2000.
30. P.G Huang and G.N Coleman. Van driest transformation and compressible wall-bounded flows. *AIAA J.*, 32 (10) :2110–2113, 1994.
31. P.G Huang, G.N Coleman, and P. Bradshaw. Compressible turbulent channel flows : Dns results and modeling. *Journal of Fluid Mechanics*, 305 :185–218, 1995.
32. J. Jiménez and P. Moin. The minimal flow unit in near-wall turbulence. *Journal of Fluid Mechanics*, 225 :213–240, 1991.
33. R. Karlsson and J. Heywood. Piston fuel film observations in an optical access gdi engine. *SAE paper*, (2001-01-2022), 2001.

34. J. Kim, P. Moin, and R. Moser. Turbulence statistics in fully developed channel flow at low reynolds number. *Journal of Fluid Mechanics*, 177 :133–166, 1987.
35. K.K. Kuo. *Principles of Combustion*. John Wiley, New York, 1986.
36. B.E Launder and D.B Spalding. The numerical computation of turbulent flows. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 3 :269–289, 1974.
37. J. Li, R. Matthew, R. Stanglmaier, C. Roberts, and R. Anderson. Further experiments on the effects of in cylinder wall wetting on hc emissions from direct injection gasoline. *SAE paper*, (1999-01-3661), 1999.
38. S. Mendez and F. Nicoud. Direct and large eddy simulation of a turbulent flow with effusion. In *ERCOFTAC Workshop - DLES6*, Poitiers, France, 2005. NF.
39. P. Moin and K. Mahesh. Direct numerical simulation : a tool in turbulence research. *Annual Review of Fluid Mechanics*, 30 :539–578, 1998. CTR04.
40. M. Nagaoka, H. Kawazoe, and N. Nomura. Modeling fuel spray impingement on a hot wall for gasoline engines. *Society of Automotive Engineers*, (940525) :1–19.
41. F. Nicoud. Numerical study of a channel flow with variable properties. In Center for Turbulence Research, editor, *Annual Research Briefs*, pages 289–310. Center for Turbulence Research, NASA Ames/Stanford Univ., 1998. NF.
42. F. Nicoud and T. Poinso. Dns of a channel flow with variable properties. In *Int. Symp. On Turbulence and Shear Flow Phenomena.*, Santa Barbara, Sept 12-15., 1999. CONF.
43. F. Nicoud, T. Poinso, and H. Haminh. Direct numerical simulations of a turbulent flow with massive flow injection. In *10th Symposium on Turbulent Shear Flows*, Pennsylvania State Univ., 1995. CONF.REF.
44. F.C. Nicoud. Effects of strong wall injection on the structure of a law-reynolds number turbulent flow. Rapport cerfacs, CERFACS.
45. P. O’Rourke and A. Amsden. A particle numerical model for wall film dynamics in port-injected engines. *Society of Automotive Engineers*, (961961), 1996.
46. P. O’Rourke and A. Amsden. A spray/wall interaction submodel for the kiva-3 wall film model. *Society of Automotive Engineers*, (2000-01-0271), 2000.
47. U. Piomelli, P. Moin, and P. Ferziger. Large eddy simulation of the flow in a transpired channel. *Journal Thermophysics*, 5(1) :124–128, 1991.
48. T. Poinso. PhD thesis, Michelin et Ecole Centrale Paris, 1983.
49. T. Poinso and D. Veynante. *Theoretical and numerical combustion*. R.T. Edwards, 2001. SP.
50. T. Poinso and D. Veynante. *Theoretical and numerical combustion*. R.T. Edwards, 2nd edition., 2005. JX out.
51. P. Popp, M. Baum, M. Hilka, and T. Poinso. A numerical study of laminar flame wall interaction with detailed chemistry : wall temperature effects. In T. J. Poinso, T. Baritaud, and M. Baum, editors, *Rapport du Centre de Recherche sur la Combustion Turbulente*, pages 81–123. Technip, Rueil Malmaison, 1996. REP.
52. Schlichting. *Boundary layer theory*. McGraw-Hill, New York, 1955.
53. T. Schönfeld and M. Rudgyard. Steady and unsteady flows simulations using the hybrid flow solver avbp. *AIAA Journal*, 37(11) :1378–1385, 1999. JX.
54. R. Stanglmaier, J. Li, and R. Mattew. The effect of in cylinder wall wetting location on the hc emissions from si engines. *SAE paper*, (1999-01-0502), 1999.

55. D.R. Stull and H. Prophet. Janaf thermochemical tables, 2nd edition. Technical Report NSRDS-NBS 37, US National Bureau of Standards, 1971.
56. Y. Sumitani and N. Kasagi. Direct numerical simulation of turbulent transport with uniform wall injection and suction. *AIAA Journal*, 33(7) :1220–1228, 1995.
57. A. Trouvé and T. Poinso. The evolution equation for the flame surface density in turbulent premixed combustion. *Journal of Fluid Mechanics*, 278 :1–31, 1994. JX out.
58. B. Walter and B. Gatellier. Development of the high power nadi concept using dual mode diesel combustion to achieve zero nox and particulate emissions. *SAE paper*, (2002-01-1744), 2002.
59. T.Y. Xiong and M.C. Yuen. Evaporation of a liquid droplet on a hot plate. *Journal of Heat Mass Transfer*, 34(7) :1881–1894, 1990.