

Lire
la première partie
de la thèse

Quatrième partie

Modélisation de la combustion diphasique

Modèle de combustion diphasique

Sommaire

8.1	Adaptation of the Thickened Flame model in the presence of droplets	142
8.2	Multi-state Algorithm for Reactive Droplets, <i>MuStARD</i>	151
8.2.1	<i>Context of the modeling approach</i>	151
8.2.2	<i>Overlook of <i>MuStARD</i></i>	152
8.2.3	<i>Density criterion</i>	153
8.2.4	<i>Auto-ignition of an isolated droplet : transition $V \rightarrow E$</i>	155
8.2.5	<i>Single droplet combustion model for "E" mode</i>	160
8.2.6	<i>Extinction of an isolated burning droplet : transition $E \rightarrow V$</i>	169
8.3	Summary of the chapter	171

Comme vu au Chap. 2.4.2, la combustion diphasique introduit divers régimes et structures de flamme, allant du spray pré-évaporé à la goutte isolée au spray pré-évaporé (Fig. 2.2). Du point de vue de la modélisation, plus l'interaction spray/combustion est directe, plus il est difficile de décrire les phénomènes physiques associés à cette interaction. Ainsi, la plupart des modèles actuels permettant de simuler une combustion diphasique considèrent le spray comme totalement ou partiellement pré-évaporé, et ignorent l'effet direct de la présence de goutte sur la structure de flamme.

Dans ce chapitre, une modification du modèle de combustion turbulente TFLES pour le cas des gouttes s'évaporant en présence d'une combustion gazeuse est proposée dans un premier temps. Dans un deuxième temps, un modèle avancé de traitement de la combustion diphasique est proposé. Ce modèle, appelé *MuStARD* pour "Multi-State Algorithm for Reactive Droplets", permet d'introduire en particulier la combustion de goutte isolée. Ce chapitre est une retranscription d'un article en cours de soumission à *Combustion & Flame*, en anglais.

8.1 Adaptation of the Thickened Flame model in the presence of droplets

In a regime of full pre-vaporization (Fig. 2.2), no interaction between the liquid and the reaction zone is found, so that spray motion and evaporation can be treated separately from the flame model. In this particular case, no further modeling is needed. However, in current applications, the spray reaches the reaction zone, in which strong evaporation takes place and may pilot partly the local reaction rate. The coupling between the liquid phase that evaporates and the gaseous chemical reaction is thus strong. The TFLES model used for the turbulent combustion needs then to take into account the liquid phase, in order to recover the non-thickened flame front characteristics. In addition, the close liquid-gas interaction occurring at the sub-grid scale in these areas should be well characterized in terms of additional wrinkling of the flame front, local turbulence modification, pollutant emissions, and introduced if needed, through for example a modification of the efficiency function. This is however out of scope of this study but is a current research path that is explored.

The derivation of the the TFLES model for two-phase flames was first made by Boileau *et al.* [22] using again dimensional analysis. It was found that both evaporation and drag should be corrected to recover the unthickened flame structure. However, it was not clear wether this correction was sufficient to treat droplets impinging the flame front not perpendicularly. Moreover, the drag correction was put aside to avoid strong modification of the droplet trajectories.

To adapt TFLES, another derivation approach is proposed in the following. The thickened flame model can be seen as a modification of time (t) and space (\mathbf{x}) through the thickening factor :

$$\mathbf{x}^{TFLES} \sim \frac{\mathbf{x}}{F} \quad (8.1)$$

$$t^{TFLES} \sim \frac{t}{F} \quad (8.2)$$

As a consequence, and for consistency, the same scale transform must be applied to the liquid phase. Applying the scale transform of Eqs. 8.1 and 8.2 to the lagrangian derivative $\mathcal{D}/\mathcal{D}t = \partial/\partial t + u_{p,i}\partial/\partial x_i$, and to the lagrangian system governing the evolution of a droplet p (Eqs. 4.2, 4.3 and 4.4), leads to modification of the drag force, the evaporation rate and the heat transfer as :

$$\tau_p^{TFLES} = F\tau_p \quad (8.3)$$

$$\Phi_p^{TFLES} = \frac{\Phi_p}{F} \quad (8.4)$$

$$\dot{m}_p^{TFLES} = \frac{\dot{m}_p}{F} \quad (8.5)$$

This means that, in the thickened space, the droplets are meant to evaporate F times slower than in the physical space, and are subjected to a drag force that is F times lower than the real drag force. By combining the TFLES model to the gaseous equations and the thickening of the

liquid phase phenomena, the un-thickened spray flame behavior is expected to be recovered. This combination leads to a new model called Two-Phase TFLES (TP-TFLES).

TP-TFLES is now validated in a two-phase laminar 1D flame. Two configurations are simulated and presented in Tab. 8.1. In the first configuration, the liquid droplets and the gas are injected at the same velocity, so that no relative motion appears before entering the reaction zone. The drag force and its thickening has thus little influence on the result. In the second configuration, droplets are injected twenty times faster than the carrier gas, which is more realistic in the context of gas turbines. In this case, the drag force plays a key role and its thickening has a significant effect. In order to control the liquid velocity at the entrance of the flame, the drag force is disconnected upstream, before entering the pre-heating zone¹. Moreover, in the "relative motion" case, the droplets are larger, to increase the influence of the evaporation time scale.

The inlet conditions are chosen so that no evaporation occurs before entering the reaction zone. Liquid JP10 droplets are injected with a mixture of air and fuel vapor at temperature 272 K. The gaseous inlet velocity is adapted to match the laminar flame speed, in order to obtain a steady flame. In this section, the global liquid equivalence ratio corresponds to :

$$\Phi_l^{\text{global}} = s \frac{\rho_l \alpha_l u_l}{\rho_g Y_{O_2} u_g} \quad (8.6)$$

where s is the stoichiometric mass coefficient, l and g subscripts denote liquid and gaseous variables respectively.

Combining this equivalence ratio with Eq. 2.2, the total equivalence ratio, corresponding to the equivalence ratio of the fully vaporized mixture, can be defined as :

$$\Phi_{\text{tot.}} = \Phi_l^{\text{global}} + \Phi_{\text{gas}} \quad (8.7)$$

This total equivalence ratio can be written as the ratio between two reactant mass flow rates :

$$\Phi_{\text{tot.}} = \frac{\dot{m}_{JP10}}{\dot{m}_{O_2}} = \frac{\rho_l \alpha_l u_l + \rho_g u_g Y_{JP10}}{\rho_g u_g Y_{O_2}} \quad (8.8)$$

For each case, three simulation are compared :

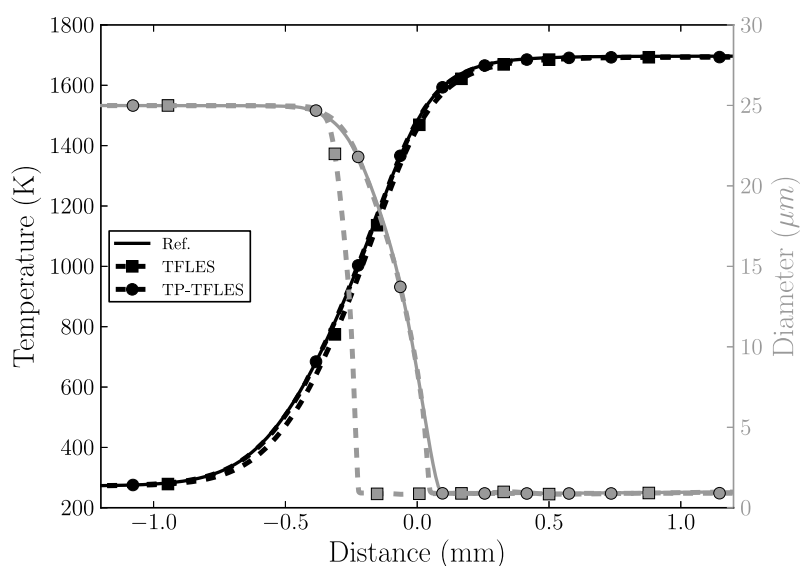
- **Reference**, which corresponds to the reference unthickened two-phase flame,
- **TFLES model**, where only the gaseous set of equations are modified,
- **TP-TFLES**, where both gas and liquid phase are thickened.

Results for the equilibrium case are displayed in Figs. 8.1, 8.3 and 8.2. In this particular case, to compare results with the reference solution, all thickened solutions are rescaled spatially to match the physical domain and are shifted so that the maximum heat release corresponds to $x = 0$. The maximum thickening factor is chosen to be $F = 5$ in the reaction zone, and is triggered by the thickening sensor, so that no thickening is applied outside the flame front (Sect. 3.4.3).

¹. i.e. where the gaseous temperature starts increasing.

Tableau 8.1 : Inlet conditions for the two-phase laminar 1D flame cases.

	Equilibrium	Relative convection
Gaseous temperature	272 K	272 K
Liquid temperature	272 K	272 K
Pressure	$1.177^5 Pa$	$1.177^5 Pa$
Initial diameter	$25 \mu m$	$50 \mu m$
Gas velocity	$0.12 m/s$	$0.05 m/s$
Liquid velocity	$0.12 m/s$	$2 m/s$
Fuel mass fraction	$2.175e^{-3}$	$2.175e^{-3}$
Gaseous equivalence ratio	0.03	0.03
Liquid equivalence ratio	0.57	0.87
Total equivalence ratio	0.6	0.9


Figure 8.1 : Equilibrium case : gaseous temperature (left) and droplet diameter (right).

Temperature profiles are very similar for the three approaches (Fig. 8.1). Thickening has however a strong effect on the diameter, when the evaporation rate is not divided by the thickening factor (Fig. 8.2), and droplets evaporate faster than in the reference solution (Fig. 8.1). The TP-TFLES approach recovers the correct evolution of the diameter. In this particular case, the evaporation rate is strong before entering the flame front, due to the size of droplets that are relatively small (Fig. 8.2). In the three simulations, the reaction rate occurs downstream the main evaporation zone, and is very similar. In Fig. 8.3, it is seen that, as soon as the thickening is triggered in the TFLES approach, the droplet velocity profile relaxes faster towards the gaseous velocity, which increases in the flame front. Once again, TP-TPFLES recovers the reference evolution of the droplet

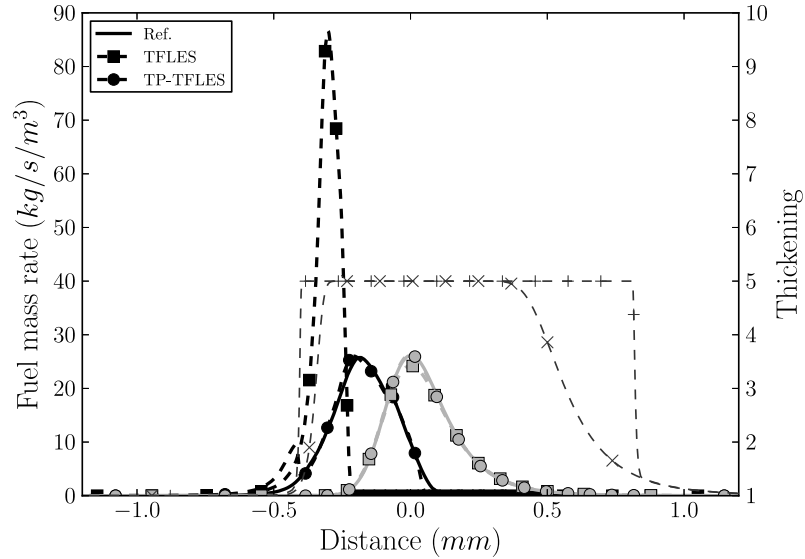


Figure 8.2 : Equilibrium case : Fuel mass production (evaporation, black) and consumption (combustion, grey) rates (left), and thickening function (right).

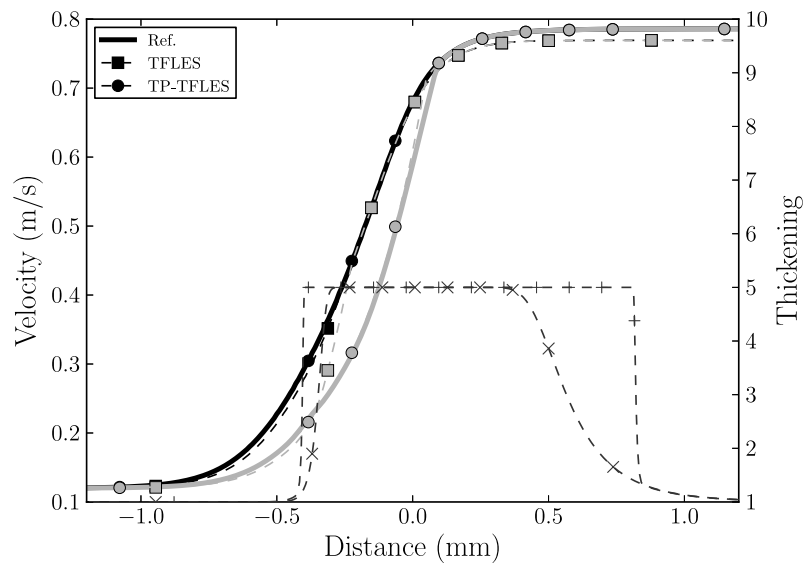


Figure 8.3 : Equilibrium case : gaseous (black) and liquid (grey) velocities (left axis), and thickening function (right axis).

velocity. Reacting species profiles are displayed in Fig. 8.4. Only a slight difference in the TFLES fuel mass fraction profiles can be observed, due to the stronger evaporation rate, not limited by F compared to TP-TFLES. Last, reactant mass flow rates (Eq. 8.8) are displayed in Fig. 8.5, along

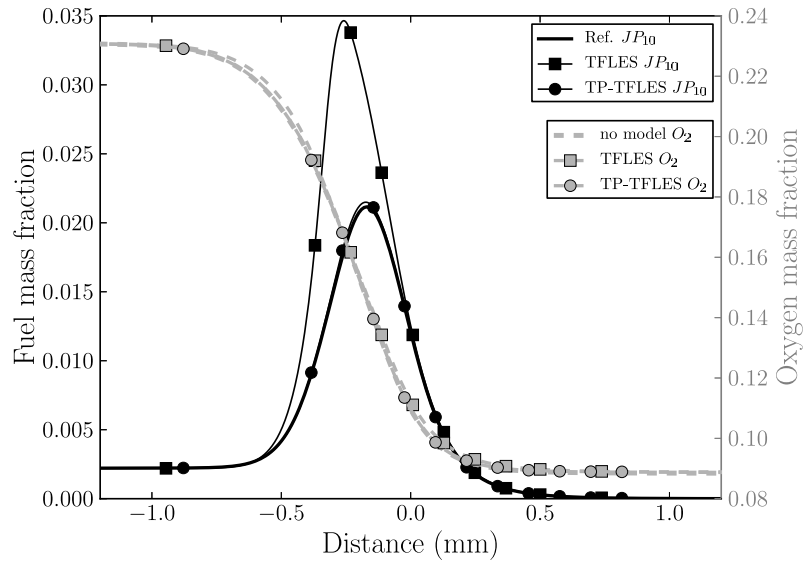


Figure 8.4 : Equilibrium case : Fuel (black) and oxygen (grey) mass fractions.

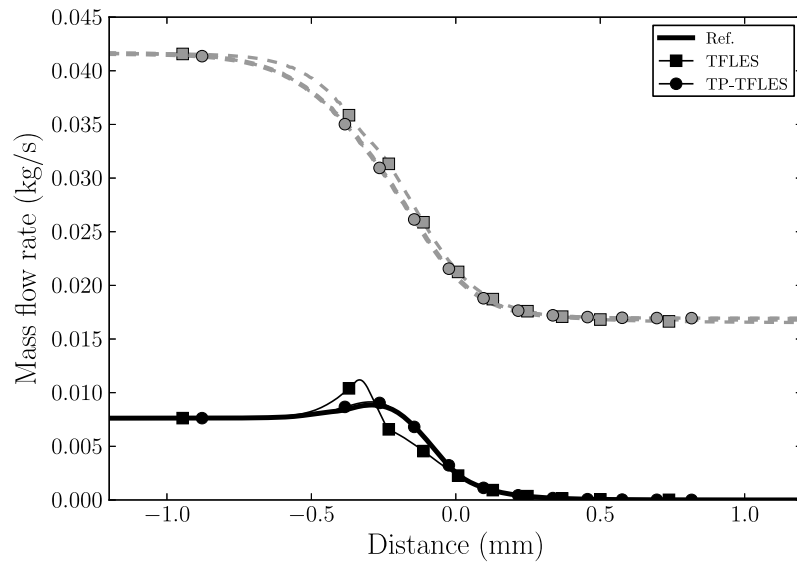


Figure 8.5 : Equilibrium case : reactant mass flow rates (Eq. 8.8, $m_{JP_{10}}$ in black, m_{O_2} in grey).

with the global equivalence ratio (Fig. 8.5), evaluated at each point (Eq. 8.7). Note that the global equivalence ratio, initially at 0.6, increases in front of the reaction zone to nearly 1, due to the relative motion between the carrier gas and the liquid that is evaporating.

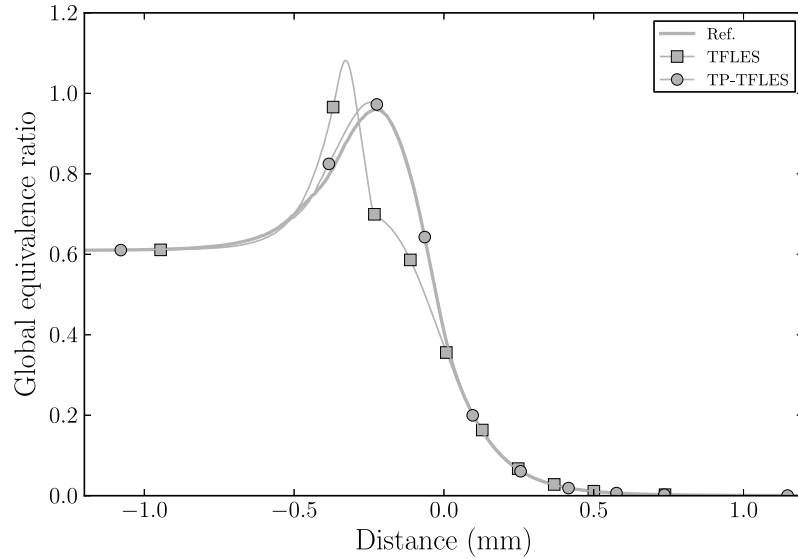


Figure 8.6 : *Equilibrium case : global equivalence ratio (Eq. 8.7).*

In this case, it is seen that the results are globally similar, as observed in previous works [22, 182]. However, results are different for a more realistic case, where a relative motion exists between the gas and the droplets.

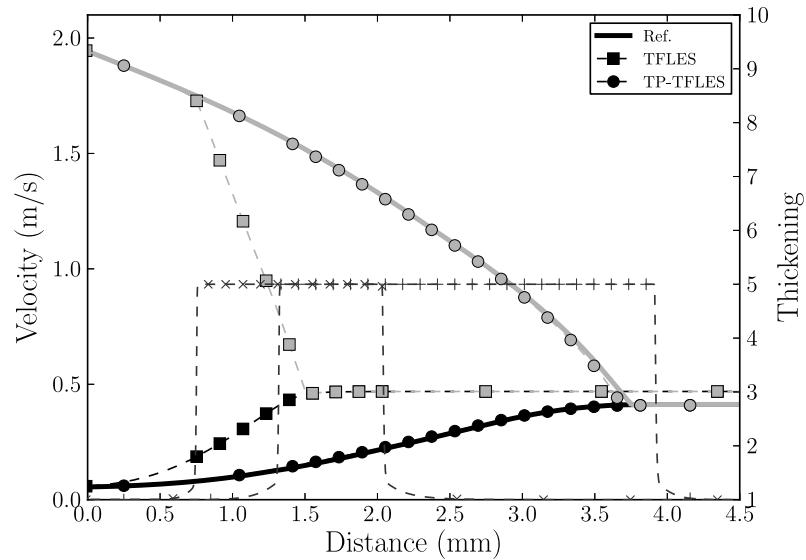


Figure 8.7 : *Relative motion case : gaseous (black) and liquid (grey) velocities (left axis), and thickening function (right axis).*

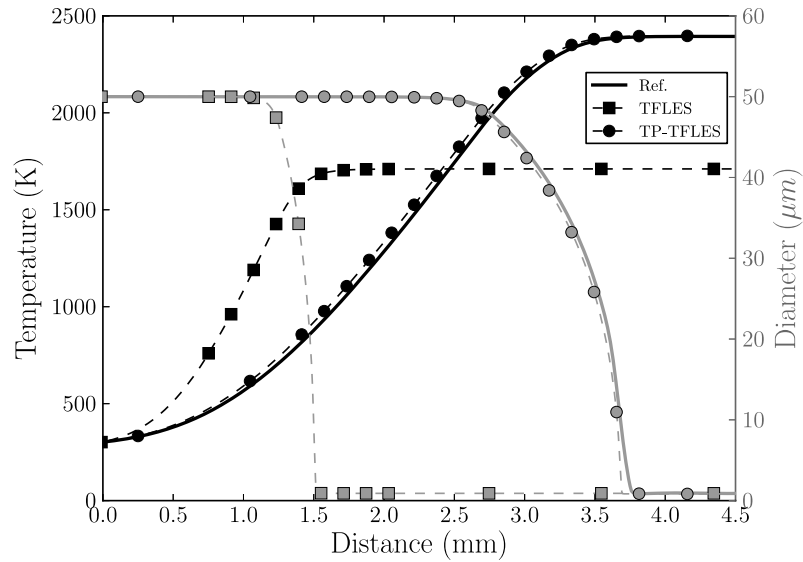


Figure 8.8 : Relative motion case : gaseous temperature (left) and droplet diameter (right).

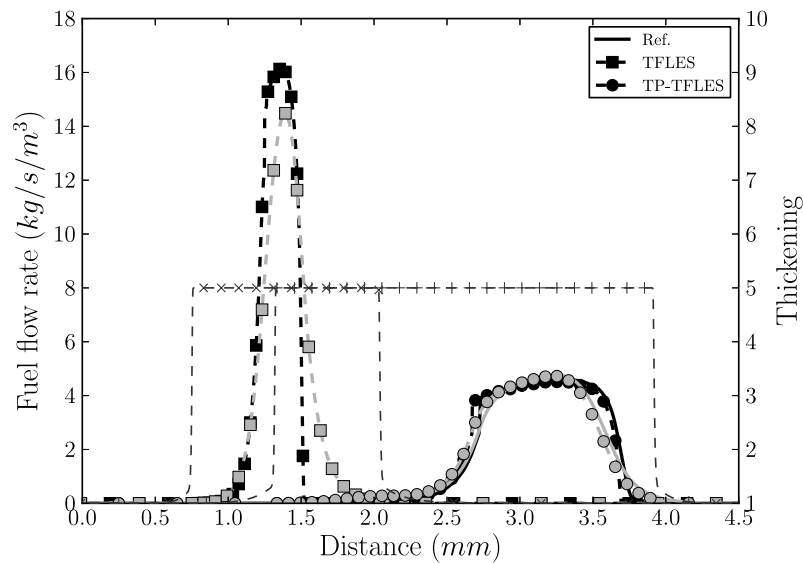


Figure 8.9 : Relative motion case : Fuel mass production (evaporation, black) and consumption (combustion, grey) rates (left), and thickening function (right).

Results for the relative motion case are displayed in Figs. 8.8, 8.7, 8.9, 8.10, 8.11 and 8.12. Here, strong differences can be observed between the TFLES approach and the reference solution. In particular, the TFLES flame is not stationary but moves upstream with a speed of about 2.25 cm/s. Therefore, in this particular case, to compare results with the reference solution, all

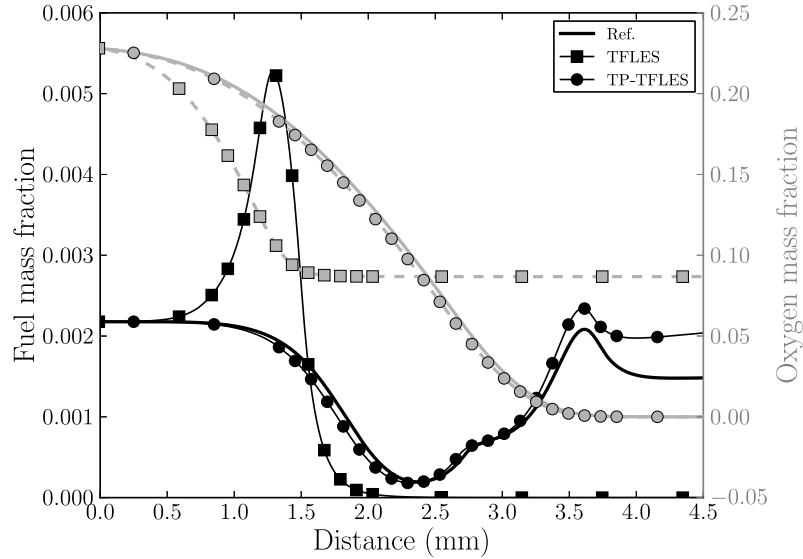


Figure 8.10 : Relative motion case : Fuel (black) and oxygen (grey) mass fractions.

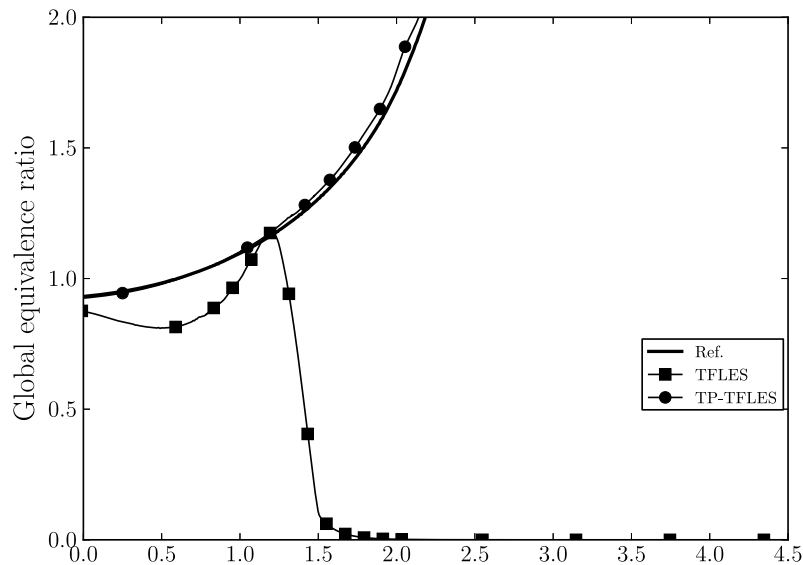


Figure 8.11 : Relative motion case : reactant mass flow rates (Eq. 8.8, $\dot{m}_{P_{10}}$ in black, \dot{m}_{O_2} in grey).

thickened solutions are also rescaled spatially to match the physical domain, and are shifted so that $x = 0$ corresponds to the beginning of the preheating zone (at the point where the drag force is triggered). In Fig. 8.8, it is observed that the final flame temperature is smaller in the TFLES case than in the reference solution, as well as the final oxygen mass fraction (Fig. 8.10), which shows that the two simulated flames (TFLES and reference) are operating at a different equivalence ratio.

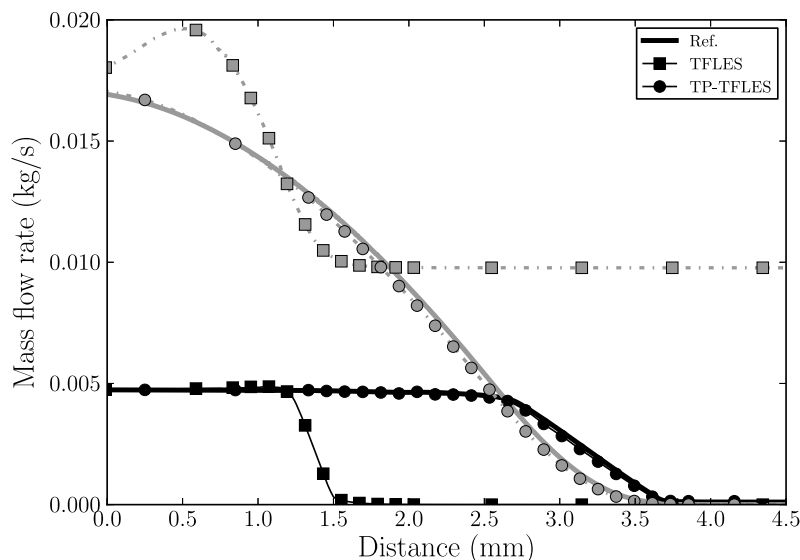


Figure 8.12 : Relative motion case : global equivalence ratio (Eq. 8.7).

In Fig. 8.7, it is observed that the TFLES velocity profiles are very different. In fact, the large relative motion between droplets and gas, at the inlet, generates a strong drag force. In TFLES, the uncorrected drag triggers a rapid relaxation of liquid velocity towards the gaseous velocity, which is very different than the reference solution. When looking at the flame structure (Fig. 8.2), it is seen in both cases that the production rate through evaporation is of the same order than the consumption rate due to combustion : combustion is thus piloted by evaporation. However the TFLES preheating zone is shorter, and evaporation and reaction rates are more intense than in the reference solution, which is due to the non-corrected evaporation rate. The global equivalence ratio (Fig. 8.11) decreases largely in the TFLES reaction, whereas it is maintained in the reference solution. Therefore, the reference flame burns at a higher equivalence ratio than the TFLES flame. The global equivalence ratio that is actually burnt in these flames can be obtained using two methods. First, it can be obtained by looking at the final state in the burnt gas region. Second, it can be obtained by rescaling precisely each mass flow rates in the flame front referential, so as to consider the flame stationary (for the TFLES cases, velocities have to be corrected of 0.03 m/s). These two methods give similar results : the reference flame burns at a global equivalence ratio of 1.05, which leads to an adiabatic flame temperature of 2380 K, and TFLES flame burns at 0.61, which leads to an adiabatic flame temperature of 1720 K. Flame structures are thus very different, if the TP-TFLES correction is not introduced.

Indeed, TP-TFLES recovers accurately the reference behavior : the flame is stationary in the domain, and velocities, temperature and diameter evolutions are all well captured. This more complex case shows the necessity of using the TP-TFLES correction to recover the un-thickened flame behavior when using the TFLES model.

8.2 Multi-state Algorithm for Reactive Droplets, MuStARD

8.2.1 Context of the modeling approach

As shown in Chap. 2, the interaction between the spray, the combustion and the turbulence can be tremendously complex and implies a large variety of scales. In the case of a heterogeneous two-phase combustion (Fig. 2.2 c.), the presence of the spray in the reaction zone can strongly modify the local flame structure, in particular by generating group combustion of droplets and single droplet combustion.

Single droplet combustion is a phenomenon typically occurring at the droplet scale. To capture this flame structure numerically, the mesh refinement of the gaseous phase around the point-source droplet should thus be at least of the order of the droplet size. If the mesh is not fine enough and the classical evaporation model is used in a case where the droplet should burn individually, the lack of spatial resolution generates a gaussian-shape peak of fuel vapor and heat release, centered on the droplet, as sketched in Fig. 8.13. This behavior fails to reproduce the single burning combustion because the evaporation rate is largely underpredicted, as well as the local heat release generated by the single droplet (Fig. 8.13 right). However, refining the mesh around the point-source evaporating droplet has two major drawbacks. First, it is very costly in terms of CPU because current it implies cells one or two orders of magnitude smaller than current industrial meshes. Second, it is in contradiction with the point-source assumption, stating that the size of the droplet should be at least one order of magnitude smaller than the mesh size [168]. As seen in Chapter 6, if this assumption is not verified, important errors may arise.

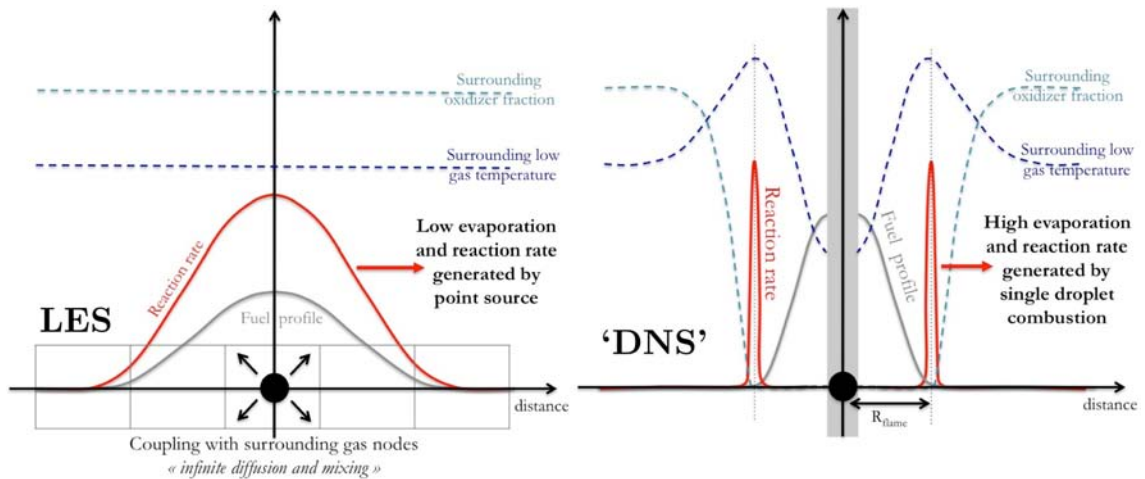


Figure 8.13 : Combustion around an evaporating droplet using the classical evaporation model on a LES mesh (left) compared to the real physical situation of a single droplet combustion.

It is therefore not possible to get a resolved single droplet combustion in the LES - DPS context. Instead, a macroscopic model for a single isolated droplet is used to describe correctly the behaviors

that occur very locally around the droplet and the link with the gaseous phase. This approach was already attempted in several studies, which are briefly presented in the following.

Huang *et al.* [45, 100] designed a multi-state droplet model from an extensive DNS database of isolated single burning droplets. The DNS results highlighted three possible regimes for a reacting isolated droplet in a convecting flow. The first mode corresponds to evaporation alone, for which no combustion occurs around the droplet. The evaporation rate is found to increase with the relative convection intensity. The second mode corresponds to an envelope mode, for which a spherical flame stabilizes around the droplet, corresponding to the single droplet combustion mode. The evaporation rate is found to be more intense than for the non-reacting droplet. The third mode corresponds to a wake-flame mode, in which the relative convection is sufficiently strong to push the flame in the wake of the droplet. The evaporation rate is found to be very similar to the non-reacting evaporation rate because the wake flame does not particularly enhance the mass transfer rate at the surface of the droplet as in the envelope mode.

Huang *et al.* converted the DNS results into four different correlated criteria of mode transition : ignition, extinction, blow-off (transition from envelope to wake flame) and reattachment (transition from wake to envelope flame). They constructed a multi-state droplet algorithm to be used in CFD solvers, which they briefly analyzed *a posteriori* on a very simple jet configuration [100]. This multi-state droplet algorithm was however not applied to a complex geometry, with full retro-action on the gas phase. Moreover, the validity of the criterion is restricted to the DNS cases that served for the correlations, which limits the range of application in an industrial CFD context.

Recently, Wang *et al.* [214] proposed a model for single droplet combustion, taking into account the transition from non-reacting to single burning droplets, and applied it to a simple geometry, with two-way coupling between the gas and the liquid phases. Their results showed that taking into account single droplet combustion changed the simulated flame structure and liquid fuel distribution. However, their transition criterion and associated single droplet combustion model are over-simplified to consider an extension of the approach to the industrial CFD context.

The aim of the following study is to propose an original multi-state droplet combustion algorithm, called *MuStARD* for Multi-State Algorithm for Reactive Droplets, based on existing knowledge of spray and droplet combustion, suitable for industrial applications, in terms of complexity and range of conditions. Particular attention was taken to validate the model throughout its derivation, on a wide range of operating conditions, using available experimental and DNS results.

8.2.2 Overlook of MuStARD

Following previous approaches, spray combustion is introduced in the Lagrangian simulation by giving a particular state to each physical droplets, which can take the following behavior : a classical single evaporation state and two reacting states (envelope flame and wake flame modes).

Single evaporation occurs when the thermodynamical conditions surrounding the droplet are not sufficient to trigger a chemical reaction. In this case, the classical Abramzon-Sirignano evaporation model [1] is applied to capture the temporal evolution of the droplet.

If the thermodynamic conditions surrounding the droplet allow combustion to occur locally around the droplet, the single evaporation model is not sufficient to treat the evolution of the droplet and its coupling with the gaseous phase, and must be modified to take into account this local combustion. In this case, two particular regimes for a single droplet can be obtained : envelope or wake flame. In the present work, only the "envelope flame" regime is considered in a first approach, because in this case the evaporation and combustion rates are strongly modified compared to the classical non-reacting droplet evaporation. The "wake flame" case is not specifically considered because the vaporization rate, in this case, is only slightly different from the classical non-reacting evaporation rate[45]. To treat the "envelope flame" regime, a single droplet combustion model is derived in Sect. 8.2.5.

The *MuStARD* algorithm is schematized in Fig. 8.14. It contains several criteria to determine from the surrounding gaseous conditions and droplet condition, in which state each individual droplet should be treated. Each element of this algorithm is detailed in the following. The density criterion insures that the spray is diluted enough to enable single droplet combustion. The droplet auto-ignition criterion checks if the droplet auto-ignites. The extinction criterion verifies if the droplet can sustain single droplet combustion. At the end of this treatment, if the droplet is in a vaporizing mode 'V', the classical single evaporation model is applied (Sect. 4.2). If in the envelope 'E' mode, the single droplet combustion model, detailed in Sect. 8.2.5, is applied.

8.2.3 Density criterion

Following the analytical approach of Kerstein *et al.* [114] or Umemura *et al.* [207], it is found that a flame can not penetrate and trigger individual burning modes in a droplet mist if it is too dense. In the case of a dense spray, the flame, if present, stands outside the mist and is fed by the fuel vapor emitted by the spray. In these particular areas, the single droplet combustion behavior should not be triggered.

To do so, a density criterion is derived following the percolation theory of Kerstein *et al.* [114]. In the percolation theory, the flame evolves group combustion when the inter-droplet spacing S is insufficient to contain a flame (Fig. 8.15). The criterion can be expressed as : "If the inter droplet spacing S is smaller than the envelope flame diameter d_f , then the spray is too dense to obtain the E mode". The flame diameter d_f is easily evaluated for a single burning droplet using equation 8.22. On the contrary, in the Lagrangian framework, the local inter-droplet spacing is not readily available. Indeed, point-source droplets are isolated and do not see each other. Calculating the inter-droplet spacing for each droplet by looking at closest neighbors would be clearly too costly in the scope of industrial CFD. However, an estimation of the inter-droplet spacing can be obtained

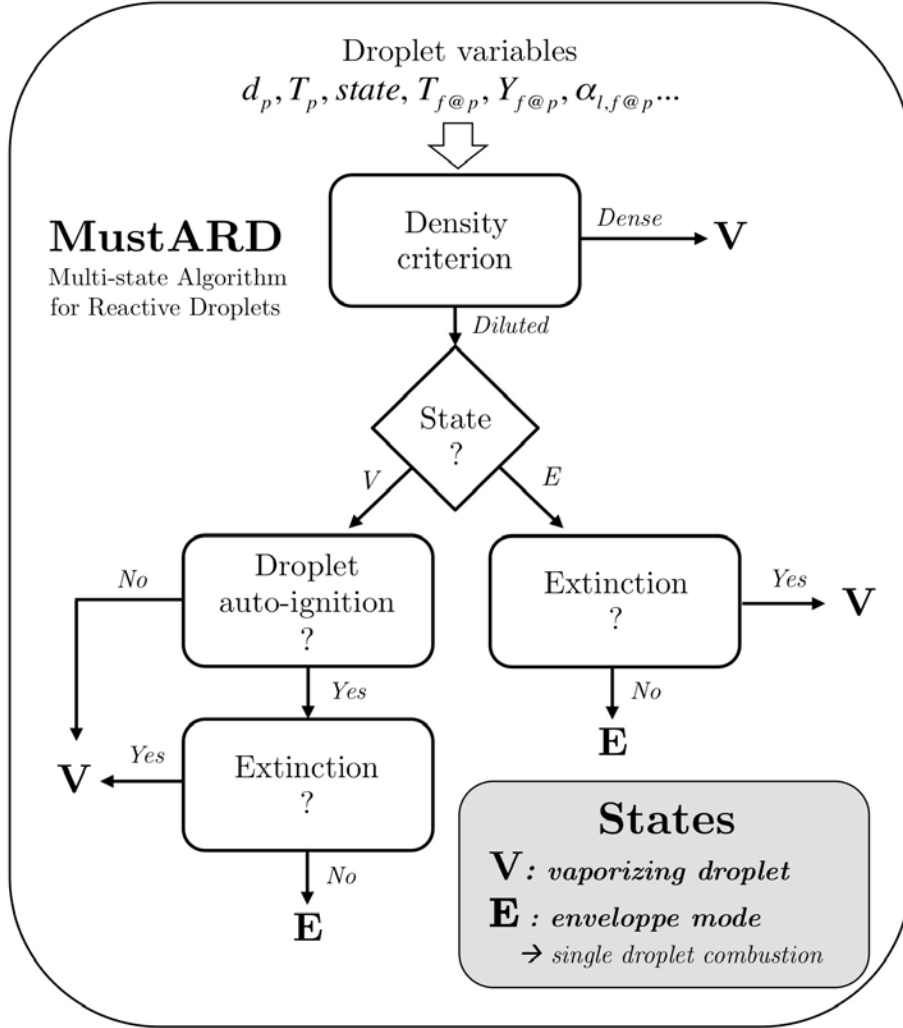


Figure 8.14 : Scheme of the proposed multi-state droplet combustion algorithm, *MuStARD*.

from the local liquid volume fraction α_l (Eq. 1.1) at the droplet location. The local liquid volume fraction is obtained by calculating the Eulerian field of liquid volume fraction (interpolation of droplet volumes on the gaseous nodes) and interpolating it back at the droplet location. This two-way interpolation acts as a first-order filtering operation. The liquid volume fraction at the location of the droplet is then used to obtain the inter droplet-spacing [51] using the following relationship :

$$S \sim \sqrt[3]{\frac{\pi}{6\alpha_l}} d_p \quad (8.9)$$

The density criterion is checked for each droplet, at the first step of the *MuStARD* algorithm (Fig. 8.14).

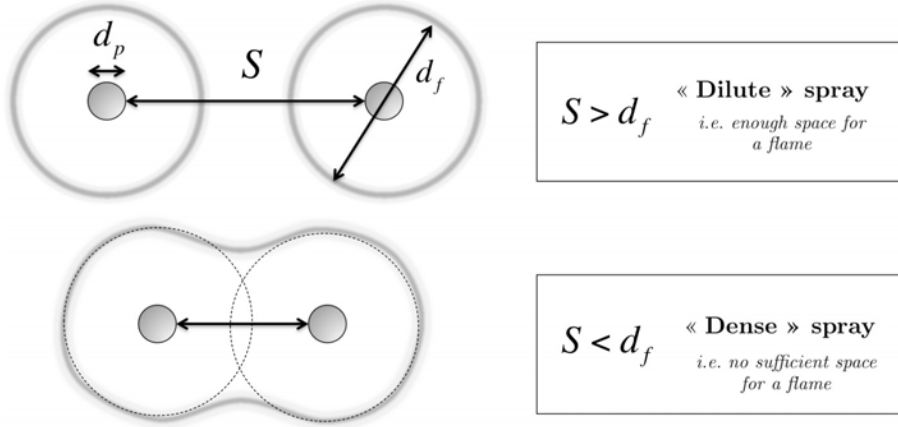


Figure 8.15 : Density criterion.

8.2.4 Auto-ignition of an isolated droplet : transition $V \rightarrow E$

If S is sufficiently large to allow the E mode, a criterion is needed to determine if a flame effectively ignites. The auto-ignition of a single droplet is a phenomenon that is studied extensively in the literature, in particular for safety reasons, fuel characterization, or Diesel engine design. This literature was reviewed by Aggarwal [3]. Recently, Chen *et al.* [39] proposed a simple semi-analytical model giving the auto-ignition delay of a single droplet embedded in a hot oxidizing environment, with good accuracy when compared to experiment. Moreover, their method is particularly suitable for CFD because of its simplicity and low CPU cost. In this work, the model is extended to integrate history effects, in order to be used in unsteady droplet surrounding mixtures. The model is detailed in the following.

Following the unsteady droplet evaporation model proposed by Law *et al.* [124], quasi-steady gaseous temperature and species profiles establishing around an isolated non-burning droplet are evaluated as :

$$C_P(T)T(x) = C_P(T_p)T_p + L_v \left[\exp \left(\frac{\dot{m}_p}{4\pi r_p \lambda / C_P} (x - 1) \right) - 1 \right] \quad (8.10)$$

$$Y_F(x) = 1 + (Y_F^\infty - 1) \exp \left(\frac{\dot{m}_p}{4\pi r_p \rho \mathcal{D}} (x_\infty - x) \right) \quad (8.11)$$

where C_P is the heat capacity, L_v is the latent heat of vaporization, \dot{m}_p is the evaporation rate, r_p is the droplet radius, \mathcal{D} is the mixture diffusion coefficient and λ the thermal diffusion². The coordinate is $x = 1/r$, with r the radial distance from the center of the droplet, and r_∞ is the distance from the droplet center of the propagating fuel diffusion front (initially, $r_\infty = r_p$), which is defined as the position where conditions are equal to infinite conditions, and is unknown.

2. both evaluated using the third law assumption (Sect. 4.2.2.2.5).

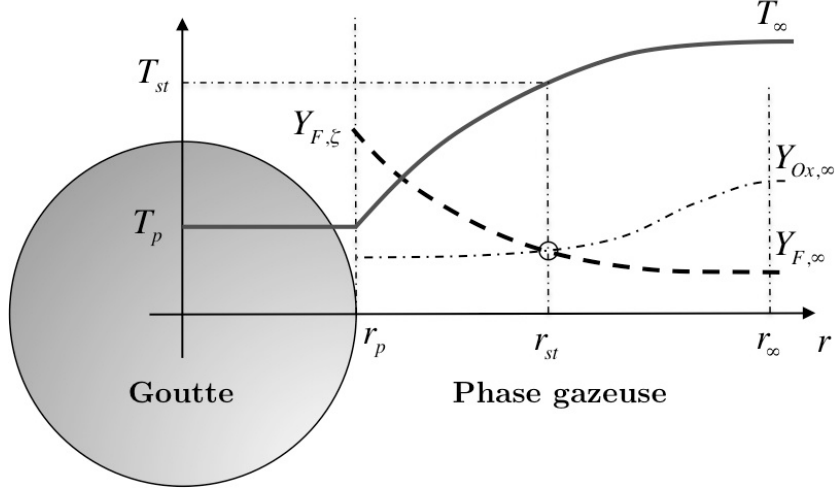


Figure 8.16 : Position of the stoichiometric mixture around the droplet.

By integrating and manipulating these two equations, it is possible to obtain the gaseous temperature at the stoichiometric mixture location (Fig. 8.16) :

$$C_P(T_{st})T_{st} = C_P(T_p)T_p + L_v \left[\left(\frac{C_P(T_\infty)T_\infty - C_P(T_p)T_p}{L_v} + 1 \right) \left(\frac{Y_F^{st} - 1}{Y_F^\infty - 1} \right)^{1/\mathcal{L}e_F} - 1 \right] \quad (8.12)$$

where $Y_F^{st} = [Y_O^\infty/s]/[Y_O^\infty/s + 1 - Y_F^\infty]$ and $\mathcal{L}e_F = \mathcal{S}c_F/\mathcal{P}r = \lambda/(\rho_g C_P \mathcal{D})$. It is seen that the temperature of the stoichiometric point is a function of the temperature of the droplet T_p , and the conditions at infinity, i.e. beyond the fuel front diffusing away from the surface of the droplet. When a cold droplet is placed in a hot oxidizing environment, the temperature of the droplet T_p increases progressively, so that T_{st} increases monotonously with time.

Chen *et al.* [39] evaluate the chemical auto-ignition delay of this stoichiometric mixture, which can be obtained through experimental measurements or detailed chemistry calculation of perfectly premixed mixtures at constant pressure. Then, Eq. 8.12 is evaluated by simulating the evolution of an evaporating droplet (Fig. 8.17). Finally, according to Chen *et al.* [39], the auto-ignition of the droplet τ_{delay} is obtained by taking the minimum of $t + \tau_{chem}(T_{st}(t))$, as illustrated in Fig. 8.17.

In this model, the mixture conditions at infinity are considered steady in terms of composition and temperature, which typically corresponds to a steady droplet in a uniform environment, as in single droplet experiments [68]. However, in a combustion chamber, the droplet surrounding conditions vary a lot, due to mixing and combustion. To integrate unsteady effects into the above auto-ignition model, a Livengood-Wu index is built as [133] :

$$I_{LW}(t) = \int_0^t \frac{1}{\tau_{chem}(T_{st}(t))} dt \quad (8.13)$$

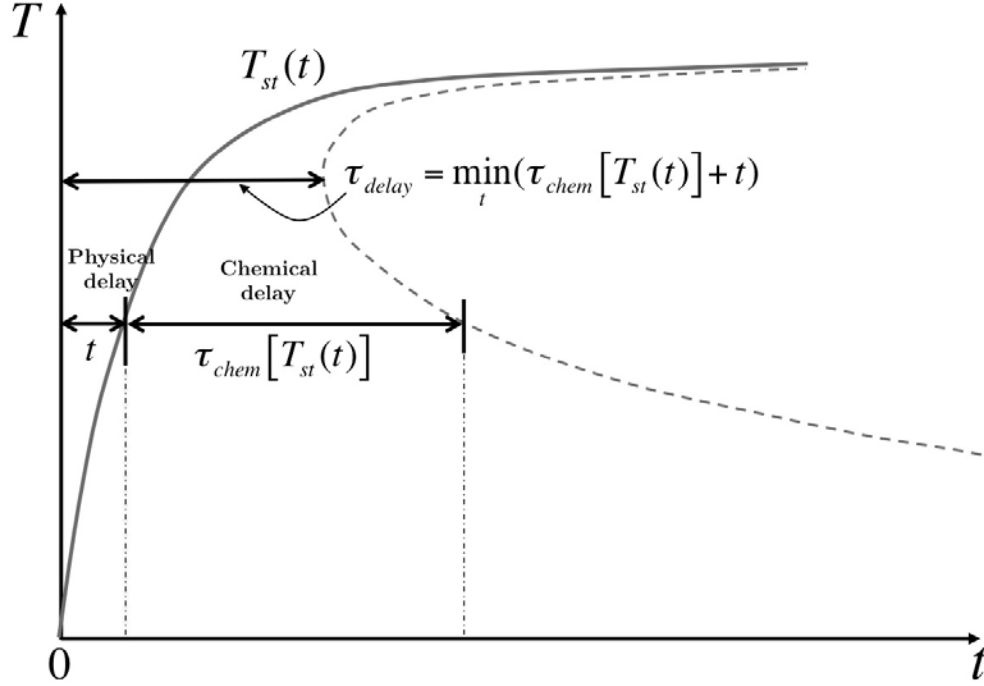


Figure 8.17 : Evolution of the temperature at the stoichiometric point, for a droplet in a steady environment. The auto-ignition delay of the stoichiometric mixture τ_{chem} is computed for each $T_{st}(t)$. the auto-ignition delay of the droplet corresponds to the minimum of $t + \tau_{chem}(T_{st}(t))$.

This indicator is zero for $t = 0$, and monotonously increases with time. The mixture is supposed to auto-ignite when the integral reaches unity. If $\tau_{chem}(T_{st})$ is constant, $I_{LW}(t) = 1$ is reached at $t = \tau_{chem}(T_{st})$. Now, if this temperature varies, τ_{chem} varies, and the integral I_{LW} accumulates successive contributions of auto-ignition delays that are met during the droplet time evolution, leading to a global auto-ignition delay of the droplet when $I_{LW}(t) = 1$ is reached, such as illustrated in Fig. 8.18.

The ignition delay time of the stoichiometric mixture $\tau_{chem}(T_{st})$ is obtained through a detailed chemistry calculation using the pressure-constant reactor model from the CANTERA package [58]. For n-heptane and iso-octane, the detailed scheme proposed by Jerzembeck *et al.* [106] is used to tabulate the ignition delay for temperatures ranging from 500 to 2500 K and pressures ranging from 0.5 to 20 bars. The ignition delay table is implemented into the solver and used with a bilinear interpolation to compute the ignition delay for any values of T and P. Note that for these two fuels, a marked Negative Temperature Coefficient zone (NTC zone) is observed in the range 600 to 900 K.

The droplet auto-ignition model is now validated using available databases. The droplet auto-ignition delay time is shown along with an evaluation of the droplet total lifetime, obtained by a numerical 0D simulation of the droplet evolution which uses the classical evaporation model (Chap. 4.2.2.1) when the droplet is vaporizing, and the single droplet combustion model (Sect. 8.2.5) as

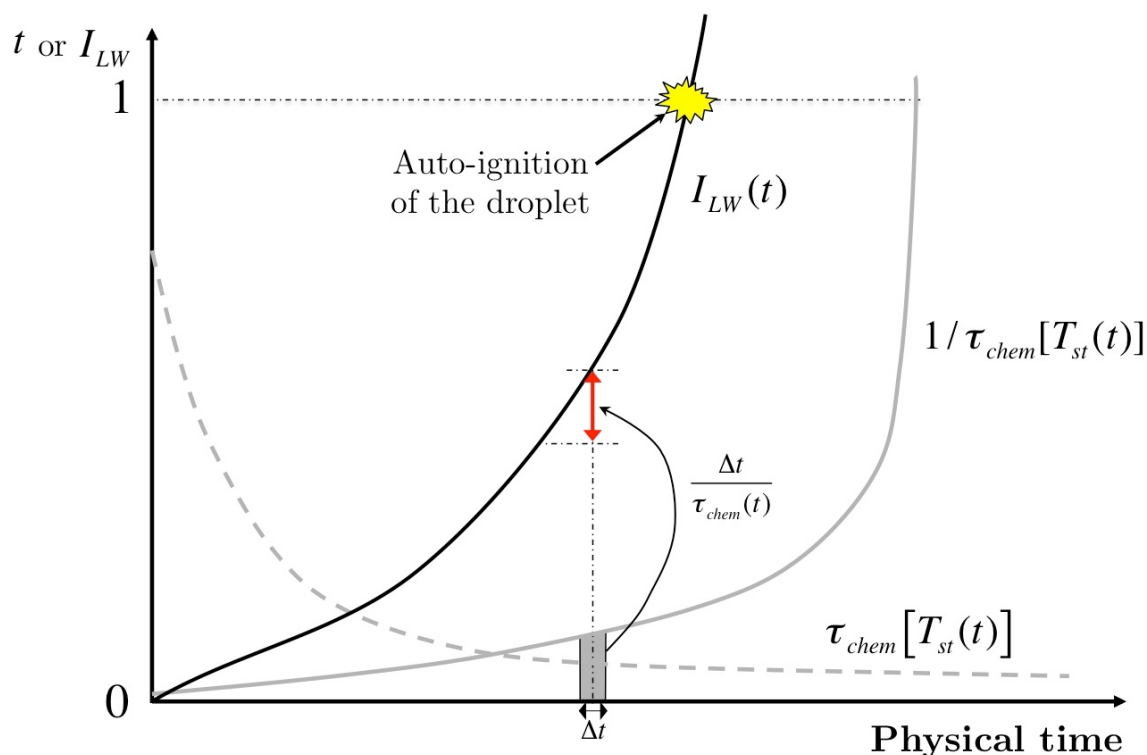


Figure 8.18 : Example of the evolution of the Livengood-Wu index $I_{LW}(t)$ for a droplet experiencing an increasing ramp of ambient temperature. The auto-ignition delay of the stoichiometric mixture is decreasing exponentially as temperature rises linearly. By cumulating the successive auto-ignition delays, the index increases monotonously from 0 to 1, at which the droplet is considered to auto-ignite.

soon as $I_{LW}(t) = 1$ is reached. If the droplet auto-ignition delay is of the order of the droplet lifetime, even a small error in its evaluation will have a strong impact on the predicted droplet state and lifetime. However, if it is less than the droplet lifetime by one or two orders of magnitude, even an error of 100% will have a very small impact on the predicted lifetime of the droplet.

First, a comparison with an auto-ignition experiment from Faeth *et al.* [68] for a 1.3 mm n-heptane droplet at atmospheric pressure is displayed in Fig. 8.19. The agreement is good in the range $[900, 1050]K$, where auto-ignition occurs at 10 to 20 % of the lifetime of the droplet. The maximum error between the model and the experiment is 5 % at the lowest temperature, and it decreases very rapidly with the temperature. Note that under 900 K, the NTC zone is reproduced : the droplet auto-ignition delay decreases with decreasing temperature.

Second, a comparison with results from an axi-symmetric DNS of a single droplet using detailed chemistry, from Stauch *et al.* [197, 198], is displayed for n-heptane and iso-octane in Fig. 8.20. The auto-ignition delay is well reproduced in the range $[1000, 1800]K$ for n-heptane at 7 bars. A large difference is observed for both n-heptane and iso-octane at 8 bars on this log-scale figure : the slope of the experiment is two times smaller than in the simulation. However, when comparing

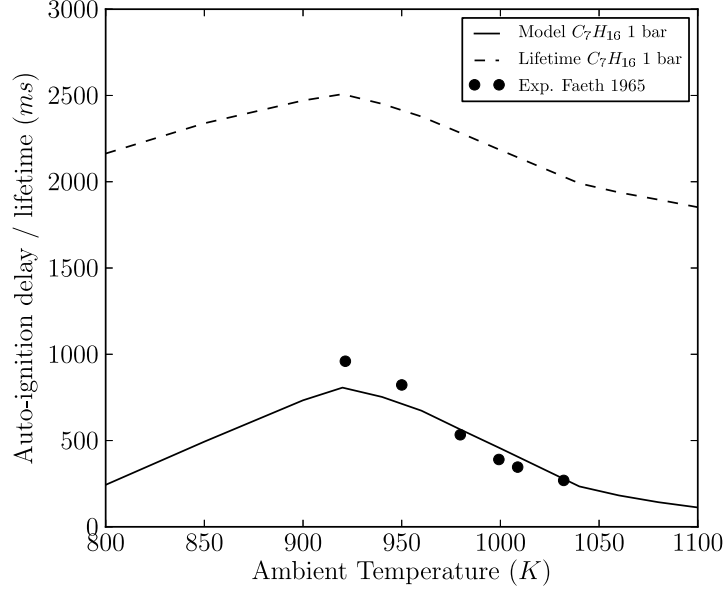


Figure 8.19 : Comparison of the droplet auto-ignition model against experiments from Faeth *et al.* [68] for a 1.3 mm-diameter n-heptane droplet at atmospheric pressure. The lifetime of an evaporating droplet at the same temperature is also displayed for comparison.

this error of maximum 5 ms to the actual total lifetime of about 100 ms, it can be considered acceptable as it will not induce a strong error on the burning droplet.

Below 1000 K, the iso-octane results capture well the large increase of the auto-ignition delay, which becomes non-negligible compared to the lifetime of the droplet. The n-heptane results largely underestimate the auto-ignition delay obtained with the DNS. Note that the stoichiometric temperature T_{st} in this range of ambient temperature lies in the NTC zone in the range [600,900] K, which seems not to be captured by the DNS. To understand this specific behavior of n-heptane droplets, Yang *et al.* [227] specifically studied n-heptane droplets igniting in the NTC zone using DNS and found the main mechanisms explaining why auto-ignition experiments of a n-heptane droplets do not feature any NTC zone. These mechanisms, too long to be detailed here, are intrinsically unsteady and in part due to detailed chemistry effects. However, the droplet auto-ignition model is essentially based on a quasi-steady assumption, which fails to capture the subtleties of the phenomena in the NTC zone. The ignition criterion validity is thus not completely demonstrated for temperature below 1000 K, especially for fuels with a marked NTC behavior. Further improvements of the criterion should be undertaken to ensure an accurate prediction of the autoignition delay, when it becomes not negligible compared to the lifetime of the droplet. Still for droplets subjected to temperatures over 1000 K, which is mostly the case in the target application, the criterion behaves well enough to give a good prediction of the droplet auto-ignition.

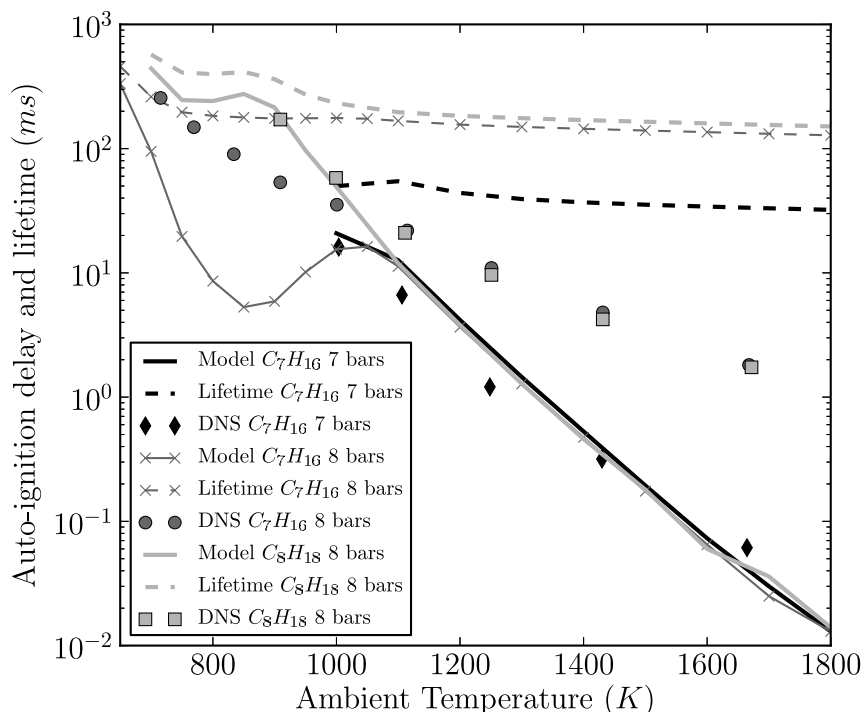


Figure 8.20 : Comparison in log-scale of the droplet auto-ignition model and lifetime against DNS from Stauch et al. [197, 198] for two different fuels.

8.2.5 Single droplet combustion model for "E" mode

Once the droplet has ignited, the E mode is activated for the droplet, and a model for single droplet burning is derived in the following, to treat its evolution.

Following Kuo et al. [121] or Sirignano et al. [188], when a droplet is considered burning in an envelope mode, the evaporation model needs to take into account the combustion occurring in the vicinity of the droplet. The following assumptions are made :

- A spherical and isolated droplet is considered, and effects of interaction between droplets are neglected.
- The thermal conductivity in the liquid phase is infinite which results in a uniform temperature over the droplet volume.
- The phase change occurring at the surface of the droplet is assumed to occur in a thermodynamic equilibrium with the surrounding gas phase.

The gaseous field around the droplet is considered at rest, i.e. the only non-zero velocity component at any given location results from the Stephan flow pointing in the radial direction. The gaseous field is also assumed quasi steady, which means that all equations are independent of time

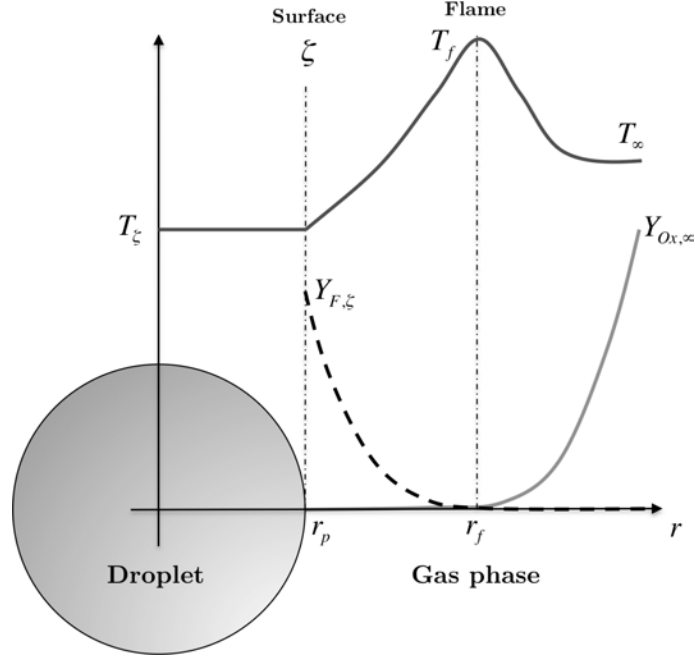


Figure 8.21 : Evolution of the temperature T and the fuel and oxygen mass fractions Y_F and Y_{O_x} along the radial distance from a spherical single burning droplet with constant temperature T_ζ . ζ denotes the droplet surface and f denotes the position of the spherical flame.

and the position of the liquid surface is considered fixed. This last aspect reflects the fact that $\rho_l \gg \rho_g$, resulting in a small velocity of the receding liquid surface compared to the Stephan flow. The problem is formulated in spherical coordinates (see Fig. 8.21) for radii between the droplet surface (index ζ) and the far-field (index ∞). The following set of equations of the gaseous flow field for $r > r_\zeta$ is obtained [121] :

$$\text{Mass conservation :} \quad \rho u r^2 = \text{const.} = (\rho u r^2)_\zeta = \frac{-\dot{m}_p}{4\pi} \quad (8.14)$$

$$\text{Species conservation :} \quad \rho u r^2 \frac{dY_k}{dr} = \frac{d}{dr} \left(r^2 [\rho \mathcal{D}_k] \frac{dY_k}{dr} \right) + \dot{\omega}_k \quad (8.15)$$

$$\text{Energy equation :} \quad \rho u r^2 \frac{dC_P T}{dr} = \frac{d}{dr} \left(\frac{\lambda}{C_P} r^2 \frac{dC_P T}{dr} \right) + \dot{\omega}_T \quad (8.16)$$

The reaction is supposed to be a global one-step reaction so that :

$$\dot{\omega}_F = \frac{\dot{\omega}_T}{Q} = s \dot{\omega}_{O_x} \quad (8.17)$$

where $\dot{\omega}_k$ is the mass consumption of species k , $\dot{\omega}_T$ the heat-release, Q the mass heat of combustion and s the stoichiometric mass ratio.

In order to integrate the previous set of equations, $\rho\mathcal{D}_k$ and λ/C_P are considered constant and evaluated following the 'third rule' approach (Sect. 4.2.2.2.5), applied between the surface and the flame front³. Moreover, Prandtl and Schmidt numbers (Eqs. 4.52 and 4.53) are determined following the procedure proposed by Sierra *et al.* [186] taking into account complex mixture phenomena.

The derivation of the single droplet combustion model is divided into two steps. The first step corresponds to the modeling of the temporal evolution of the droplet mass. The second step corresponds to the modeling of the temporal evolution of the droplet temperature (which is considered uniform).

8.2.5.1 Mass transfer

The model for the mass transfer between a single, isolated burning droplet and the surrounding gas is derived using the equation of species conservation (8.15), associated with two boundary conditions at the droplet surface (ζ) and at the far-field (∞).

As done in Kuo [121], two parameters are defined :

$$b_Y = \frac{Y_F - Y_{Ox}/s}{(Y_{F,\zeta} - 1) - Y_{Ox,\zeta}/s} \quad (8.18)$$

$$b_T = \frac{QY_{Ox}/s + C_P(T)T}{L_v + QY_{Ox,\zeta}/s} \quad (8.19)$$

Note that b_Y is very similar to the Spalding parameter $b = Y_F/(Y_{F,\zeta} - 1)$ appearing in the non-burning evaporating case. The oxidizer mass fraction Y_{Ox} appearing in b_Y and b_T reflects oxidizer consumption by combustion.

Combining Eqs. 8.15 for $k = F$ and $k = Ox$ one obtains the following equation :

$$r^2 \rho u \frac{db_Y}{dr} = \frac{d}{dr} \left(r^2 [\rho\mathcal{D}] \frac{db_Y}{dr} \right) \quad (8.20)$$

Eq. 8.20 is similar to the non-reacting evaporating equation for the Spalding parameter b . This equation, integrated twice with boundary conditions at the surface $r = \zeta$ and at infinity, yields the following result [121] :

$$\dot{m}_p = -4\pi r_\zeta [\rho\mathcal{D}] \ln(1 + B_M^{comb}) \quad \text{with} \quad B_M^{comb} = \frac{Y_{F,\zeta} + Y_{O,\infty}/s}{1 - Y_{F,\zeta}} \quad (8.21)$$

B_M^{comb} is readily obtainable by expressing the mass fraction of fuel at the surface using the Clausius-Clapeyron equilibrium for the phase change [121] (Sect. 4.2.2.1.1).

3. In the classical evaporation model, the boundary conditions at infinity are used.

Assuming infinitely fast chemistry, other useful information may be found. Expressing that $Y_F = Y_{O_x} = 0$ at the flame location, the radius of the spherical flame enveloping the droplet can be obtained from b_Y :

$$r_f = r_\zeta \frac{\ln(1 + B_M^{comb})}{\ln(1 + Y_{O_x}^\infty)} \quad (8.22)$$

Using b_T and r_f , the flame temperature can also be derived :

$$T_f = \frac{1}{C_P(T_f)} [C_P(T_p)T_p - L_v + \frac{C_P(T_\infty T_\infty - C_P(T_p)T_p + L_v + QY_{O_x}^\infty/s}{1 + Y_{O_x}^\infty/s}] \quad (8.23)$$

These two above expressions are useful to calculate the heat transfer between the gas and the droplet (Sect. 8.2.5.2)

8.2.5.2 Heat transfer

The temporal evolution of the droplet enthalpy $m_p h_{s,p}(T_p)$ can be obtained by writing the enthalpy balance at the surface of the droplet (Sect. 4.2.2.1.3). This leads to the following equation :

$$\frac{dT_p}{dt} = \frac{1}{m_p C_{P,l}} (-\Phi_g^c + \dot{m}_p L_v(T_p)) \quad (8.24)$$

where Φ_g^c is the heat flux from the gas to the liquid through the surface of the droplet, and $\dot{m}_p L_v(T_p)$ corresponds to the enthalpy of the evaporated fuel that is leaving the droplet, at temperature T_p .

In this equation, Φ_g^c has to be obtained by integrating the energy equation (Eq. 8.16) in the inner space between the thin flame and the surface of the droplet. In this area, there is no reaction, so that $\dot{\omega}_T = 0$, which highly simplifies the equation. Mass conservation (Eq. 8.14) allows to replace $r^2 \rho u$ on the left hand side by $r_\zeta^2 \rho_\zeta u_\zeta = \dot{m}_p/4\pi$:

$$\dot{m}_p \frac{dC_P T}{dr} = 4\pi \frac{d}{dr} \left(\frac{\lambda}{C_P} r^2 \frac{dC_P T}{dr} \right) \quad (8.25)$$

Integration of this equation yields :

$$\dot{m}_p C_P T = 4\pi r^2 \frac{\lambda}{C_P} \frac{dC_P T}{dr} + c_1 \quad (8.26)$$

where c_1 is a constant determined by the boundary condition at the surface ζ :

$$\dot{m}_p C_P T_\zeta = 4\pi r_\zeta^2 \frac{\lambda}{C_P} \left[\frac{dC_P T}{dr} \right]_\zeta + c_1 \quad (8.27)$$

By definition, the quantity of the right hand side of the previous equation is the conductive heat flux :

$$4\pi r_\zeta^2 \frac{\lambda}{C_P} \left[\frac{dC_P T}{dr} \right]_\zeta = -\Phi_g^c \quad (8.28)$$

which leads, when injected in Eq. 8.26, to :

$$\dot{m}_p \left(C_P(T)T - C_P(T_\zeta)T_\zeta - \frac{\Phi_g^c}{\dot{m}_p} \right) = 4\pi r^2 \frac{\lambda}{C_P} \frac{dC_P T}{dr} \quad (8.29)$$

The separation of the variables r and T and a second integration gives :

$$-\frac{1}{r} = \frac{4\pi\lambda/C_P}{\dot{m}_p} \ln \left(C_P(T)T - C_P(T_\zeta)T_\zeta - \frac{\Phi_g^c}{\dot{m}_p} \right) + c_2 \quad (8.30)$$

Applying now the boundary conditions at the flame front, known from the mass conservation, allows to obtain c_2 . One finally obtains :

$$\frac{1}{r_f} - \frac{1}{r} = \frac{4\pi\lambda}{C_P \dot{m}_p} \ln \left(\frac{C_P(T)T - C_P(T_\zeta)T_\zeta - \frac{\Phi_g^c}{\dot{m}_p}}{C_P(T_f)T_f - C_P(T_\zeta)T_\zeta - \frac{\Phi_g^c}{\dot{m}_p}} \right) \quad (8.31)$$

In this expression, the flame radius and temperature are known by Eqs 8.22 and 8.23 respectively. By introducing them and evaluating the expression at the surface of the droplet, one obtains :

$$\frac{\dot{m}_p}{4\pi\lambda/C_P r_\zeta} - \frac{1}{\mathcal{L}_e} \ln(1 + Y_{O_x}^\infty/s) = \ln \left(1 + \frac{C_P(T_f)T_f - C_P(T_\zeta)T_\zeta}{-\Phi_g^c} \right) \quad (8.32)$$

where \mathcal{L}_e is the Lewis number of the mixture.

Equation 8.32 is a relation between the gaseous temperature as a function of the radial distance and the conductive enthalpy flux at the liquid surface. It does not directly contain the desired information on Φ_g^c . However, it provides an expression for the mass flux \dot{m}_p that is different from Eq. 8.21 :

$$\dot{m}_p = \frac{4\pi\lambda r_\zeta}{C_P} \ln(1 + B_T^{comb}) \quad (8.33)$$

In this case, \dot{m}_p depends on the temperature transfer number B_T^{comb} :

$$B_T^{comb} = 1 - \left(1 + \dot{m}_p \frac{C_P(T_f)T_f - C_P(T_\zeta)T_\zeta}{-\Phi_g^c} \right) (1 + Y_{O_x}^\infty/s)^{1/\mathcal{L}_e} \quad (8.34)$$

By equating Eqs. 8.21 and 8.33, a relation can be obtained between B_M and B_T^{comb} :

$$B_T^{comb} = (1 + B_M^{comb})^{\frac{1}{\mathcal{L}_e}} - 1 \quad (8.35)$$

By rearranging Eq. 8.34 and replacing the mass flux \dot{m}_p using Eq. 8.33, one finally obtains Φ_g^c as a function of the known temperatures T_ζ and T_f as well as of B_T^{comb} , obtained from the value of B_M^{comb} , through Eq. 8.35.

$$\Phi_g^c = 4\pi \frac{\lambda}{C_P} r_\zeta \ln(1 + B_T) \frac{(C_P(T_f)T_f - C_P T_\zeta T_\zeta)}{\frac{1+B_T}{(1+Y_{O_x}^\infty/s)^{1/\mathcal{L}_e}} - 1} \quad (8.36)$$

The expression of Φ_g^c is injected in the equation of evolution of the droplet temperature (Eq. 8.24), which can then be solved numerically.

Note that in this single droplet combustion model, the evaporated fuel is suppose to burn completely, thanks to the fast chemistry hypothesis. Therefore, we have instantaneously $\dot{m}_p = \dot{\omega}_F$ which is an approximation that may be too inaccurate, as shown by Law *et al.* [124]. Indeed, Law *et al.* show that the instantaneous total fuel consumption rate around the recessing droplet can be different than the evaporation rate for a single burning droplet. The condition $\dot{m}_p = \dot{\omega}_F$ is obtained only in strictly steady configuration, such as flames stabilized around a porous sphere, where the surface is not recessing. On the contrary, for a burning droplet, $\dot{m}_p > \dot{\omega}_F$ at the beginning of the droplet burning, because the flame surface is initially insufficient to burn all the incoming fuel, and $\dot{m}_p < \dot{\omega}_F$ later on, when the accumulated fuel is burning. The transient study of [124] also shows that the the quasi-steady approximation is reasonable as soon as the initial transient process is short compared to the complete lifetime of the droplet. Relatively large droplets fall into this category where the initial transient period can be reasonably neglected. As in the current *MuStARD* model, single droplet combustion is limited to the burning of relatively large droplets⁴, and as it would be too expensive to take into account this unsteadiness in the CFD modeling, the hypothesis $\dot{m}_p = \dot{\omega}_F$ is reasonably kept in a first approach.

Usually, droplets have a non-zero velocity relative to the surrounding gas, which can be taken into account by introducing classical correlations like those proposed by Ranz and Marshall [169], which appears as a Sherwood number mutliplying Eq. 4.44 (cf. Sect. 4.2.2.2.1). However, for single burning droplets, the classical correlations do not hold. No pertinent correction was yet found to introduce a modification of the evaporation rate under relative convection, for a burning droplet.

8.2.5.3 Validation against experiments of spark ignited burning droplet

The single droplet combustion model is validated by comparison with experiments of single droplet burning, in which the droplet is ignited by a spark at a location close to the droplet surface. No ignition or extinction criteria are thus necessary in this validation. The single droplet burning model was implemented in a 0D code, solving the evolution of a single burning droplet (Eqs. 8.21 and 8.24). The droplet is assumed ignited. Several different fuels are tested to show the robustness and validity of the model.

First, a fiber-suspended n-decane droplet experiment by Xu *et al.* [226] is considered. Spark-ignited droplets of diameter about 1 mm are burning at ambient pressure and temperature. Results of the comparison are displayed in Fig. 8.22 for droplet diameters. The evolution of the diameter is very well recovered by the model. In particular, the slope of the D^2 -curve is very similar to experimental results, meaning that the quasi-steady state evolution is very well captured. Small differences in the lifetime predictions are observed, which can be related to uncertainties of the

4. thanks to ignition and extinction criteria which describe the fact that small droplets are less subjected to single droplet combustion

spark ignition in the first instants. Indeed, in the experiments, a small delay is necessary to establish a fully developed spherical flame around the droplet. This delay is difficult to evaluate precisely in the experiment. Simulation curves could be shifted by this delay, but this would not change our conclusions.

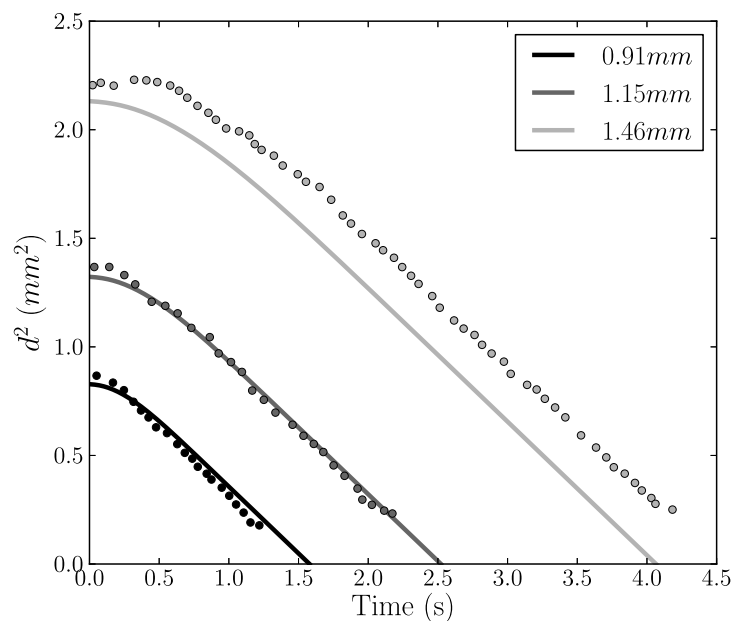


Figure 8.22 : Comparison with experiment : evolution of *n*-decane burning droplets in atmospheric conditions. Experiments from Xu *et al.* [226].

Second, the experiment performed by Hara *et al.* with small *n*-heptane droplets in microgravity is studied. Results are displayed in Fig. 8.23. As done in [8], the simulation results are shifted by 0.8 s/mm^2 to the left, to take into account the initial establishment delay of the flame after spark ignition. The agreement for *n*-heptane is also very good. The change of slope in the experimental data at the end is due to the extinction of the flame in the experiment, which was not introduced in the model at this stage, but will be discussed in Sect. 8.2.6.

Third, recent experiments using complex fuel were performed by Liu *et al.* [132] in microgravity. In addition, the flame radius was estimated visually in the experiment. Two ambient cases with different fuels are computed, for which reaction mechanism and thermodynamic characteristics are readily available. Results for a 0.53 mm iso-octane droplet and a 0.58 mm Jet-A droplet are respectively displayed in Figs. 8.24 and 8.25. Once more, the agreement is particularly good for the evolution of the diameter and the prediction of the droplet lifetime. In particular, the quasi-steady d^2 decrease is well captured. However, when looking at the flame radius evolution, a very large discrepancy can be observed between simulation and experiment in both cases. This error was already mentioned and is further discussed below.

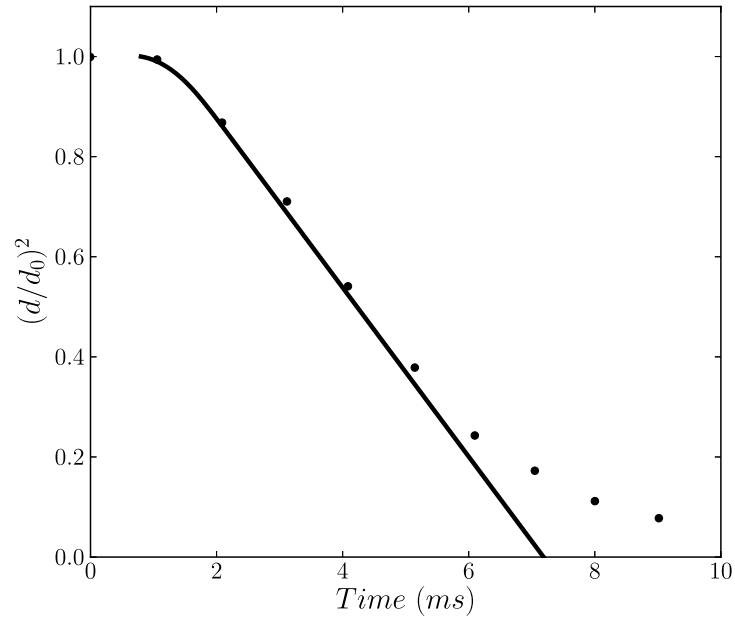


Figure 8.23 : Comparison with experiment : evolution of an n-heptane burning droplet in atmospheric conditions. Experiments from Hara et al. [90].

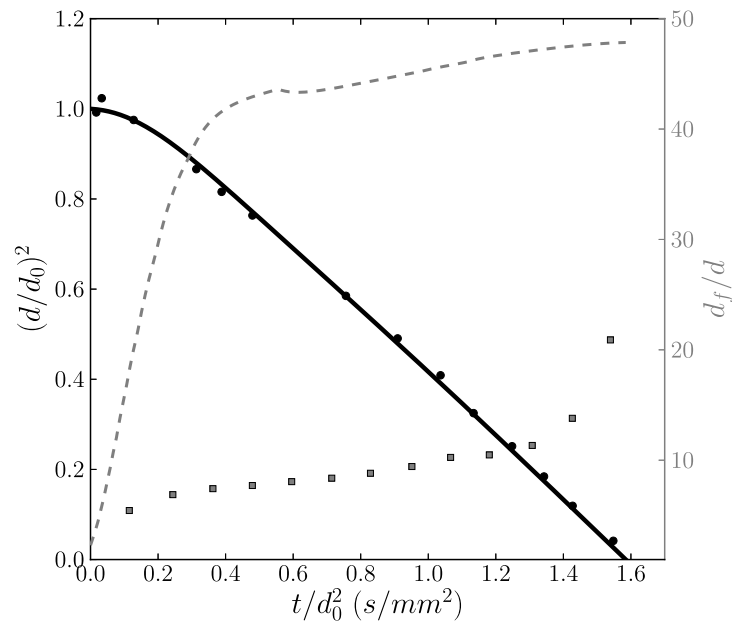


Figure 8.24 : Evolution of an iso-octane burning droplet at atmospheric conditions : droplet and flame diameters. Symbols : Experiments from Liu et al. [132]. Lines : present simulation.

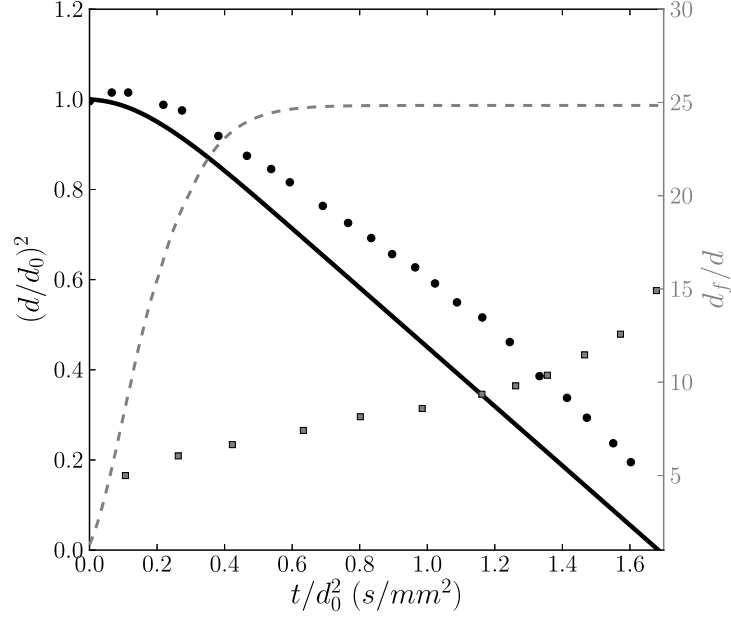


Figure 8.25 : Evolution of a Jet-A burning droplet at atmospheric conditions : droplet and flame diameters. Symbols : Experiments from Liu *et al.* [132]. Lines : present simulation.

Experiments report flame radius ratios d_f/d in the range [5,15], which is around two to five times smaller than the numerical result ($\sim 20 - 30$). This is related to unsteady effects already mentioned in Sect. 8.2.5.2, leading to the difference between fuel evaporation and consumption [124]. Law *et al.* [124] show that, at the time of ignition, the evaporation rate is low and the flame stabilizes very close to the surface of the droplet. The surface of the flame front is thus small and not sufficiently large to burn all the evaporated fuel. Then, while the evaporation rate increases due to the presence of the flame close to the surface, the flame moves away from the surface. During this transient period, gaseous fuel accumulates in the region between the flame front and the droplet surface, moving the stoichiometric line further away from the surface.

Law *et al.* [124] managed to capture this transient behavior by introducing in the set of equations, two different mass flow rates $\dot{m}_1 = \dot{m}_p$ and $\dot{m}_2 = \dot{\omega}_F$, instead of only one, so as not to impose $\dot{m}_p = \dot{\omega}_F$. Because of the additional degree of freedom, the problem needs to be closed, which is done by looking at the overall conservation of the fuel around the droplet. Law *et al.* [124] show that their pseudo-unsteady model is able to recover a flame radius as in the experiment. This transient effect stays visible all along the lifetime of the droplet and controls the flame radius. When considering the quasi-steady assumption as done in our model, the flame is fast enough to adapt instantaneously to a fuel vapor change and reach its steady state position, which corresponds to a perfect balance between the evaporation rate and the consumption rate.

In spite of this over-prediction of the flame radius, the study of [124] with a transient model shows that the prediction of the evaporation rate in the quasi-steady approximation is still reasonable if the initial transient process is short compared to the complete lifetime of the droplet. This explains the good accuracy of the quasi-steady approach for the evaporation of large droplets. As single droplet combustion occurs mostly for large droplets, the quasi-steady approximation is considered sufficient for this study.

8.2.6 Extinction of an isolated burning droplet : transition $\mathbf{E} \rightarrow \mathbf{V}$

In the literature, three main mechanisms of droplet extinction have been observed [123, 34, 224, 53, 163]. First, for large droplets, extinction of the spherical flame is promoted by radiative heat loss [34, 53]. Second, the flame can be blown off when the relative velocity between the droplet and the flow is too important [224, 163]. Last, when droplets become very small, the flame can not be sustained anymore because chemistry can not anymore compete with the fast diffusion of temperature and species [224, 123].

Note a particular extinction behavior of methanol droplets, due to the presence of a large amount of water vapor in the methanol oxidation products, which promotes extinction [151, 7]. This particularity is not present in common aeronautical fuels such as n-alkane or *Jet-A*, and will not be considered here.

In the design of the present droplet extinction criterion, the radiative-loss mechanism is not considered because droplet diameters are small enough to neglect this phenomena [53]. The extinction criterion is constructed by combining the two other extinction mechanisms, either diameter-piloted or convection-piloted.

The diameter-piloted extinction criterion is taken from the droplet asymptotic theory of Law *et al.* [123], which gives the following evaluation of the extinction diameter of a burning droplet [224, 163] :

$$d_{ext}^2 = 2X\mathcal{D}_M \frac{\ln^4(1 + Y_{Ox}^\infty/s)}{\ln^2(1 + B)} \quad (8.37)$$

with

$$X = \frac{W_F}{A \rho_{g,M} \left(\frac{C_{P,M} T_f^2}{T_a} \right)^3} \frac{L_v}{Q} \frac{1 + B}{1 + Y_{Ox}^\infty/s} e^{1+T_a/T_f} \quad (8.38)$$

and

$$B = \frac{QY_{Ox}^\infty/s + C_{P,R}(T_g - T_p)}{L_v} \quad (8.39)$$

where A is the pre-exponential factor, Q the heat of combustion, T_a the activation energy, $C_{P,R}$ the calorific capacity evaluated at the third rule reference state. The conditions denoted $_M$ correspond to an evaluation at a temperature $T_M = \frac{T_f + T_g}{2}$, where T_f is the flame temperature around the droplet (Eq. 8.23), as proposed in [163]. X is a chemical time scale valid near extinction, evaluated using the asymptotic theory of Linan [130, 224].

For convection-piloted extinctions, several approaches were proposed in the literature : Pope and Gogos [163] made use of the same asymptotic theory of Law *et al.* [123] to obtain the relative velocity at which extinction occurs. Bilger [18] makes use of the laminar diffusion flame theory to link the extinction relative velocity to the experimental laminar strain rate of extinction of a counterflow diffusion flame. Wu *et al.* [225] and Huang *et al.* [45] produced a DNS database to obtain extinction velocities and criteria. These methods could all be used to construct the extinction criterion. However, results differ significantly and the lack of experimental results does not allow to distinguish a particular one. Moreover, these approaches are not sufficiently generic, in terms of droplet size, fuel characteristics, ambient pressure and temperature, to be readily used in an industrial CFD framework. A simple threshold approach is therefore preferred here to ensure that a droplet does not stay in an envelope mode when the relative convection is too strong. Above a certain value of relative velocity, extinction occurs and the droplet goes back to the V mode. To evaluate this threshold, two characteristic time scales are compared. A convective time scale based on potential flow theory around a sphere [224], can be obtained as :

$$\tau_{conv} = \frac{d_p}{6\|\mathbf{u}_p - \mathbf{u}_g\|} \quad (8.40)$$

A chemical time-scale is obtained as the inverse of the fuel consumption rate by :

$$\tau_{chem}^{ext} = A^{-1}(\rho_g Y_{O_x}^\infty)^{1-a_{O_x}-a_F} (sW_F)^{a_F-1} (W_{O_x})^{a_{O_x}} e^{\frac{T_a}{T_f}} \quad (8.41)$$

where a_* are the orders of the oxidation reaction. This chemical time scale differs from the chemical time-scale used in the auto-ignition criteria, because, in the extinction case, it is necessary to take into account the oxygen mass fraction in the upstream flow, and not consider the chemical time-scale at stoichiometry.

Extinction occurs if the chemical reaction is not sufficiently fast to sustain the flame while it is entrained away from the droplet by the relative flow motion. The limit corresponds to $\tau_{conv} \sim \tau_{chem}$, corresponding to the following extinction velocity u_{ext} :

$$u_{ext} = \frac{d_p}{6\tau_{chem}} \quad (8.42)$$

Finally, the conditions for which extinction of the burning droplet occurs are :

$$\|\mathbf{u}_p - \mathbf{u}_g\| > u_{ext} \quad (8.43)$$

$$d_p < d_{ext} \quad (8.44)$$

The full validation of such criteria is still difficult as no sufficiently detailed experimental database is yet available. However, a partial validation is made below.

First, the validity of the extinction diameter expression is checked by comparing with the experimental observation of droplet extinction by Hara *et al.* [90]. For an ignited n-heptane droplet of 72

μm , extinction is found visually to occur at a diameter of about $25 \mu m$. Criterion Eq. (8.44) gives $28 \mu m$, which is a reasonable estimation. Second, extinction velocity from Eq. (8.43) is compared to results of simulations of droplet extinction performed by Pope *et al.* [163]. Results are displayed in Fig. 8.26. Although the general trend is correct, the model over predicts the extinction velocity by one order of magnitude. This means that the extinction criterion underpredicts extinction but it still ensures extinction for large relative motion. In a first approach, it is considered a sufficiently good compromise as it leads to the blow off of the envelope flame in highly convective flows.

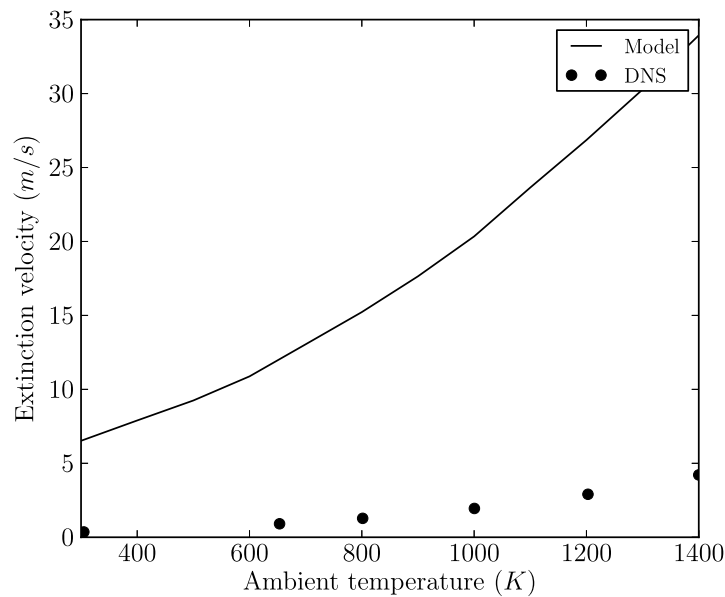


Figure 8.26 : Droplet extinction velocity. Symbols : DNS results from Pope *et al.* [163]. Line : present model.

Typical variations of the extinction diameter and the extinction velocity with the ambient temperature, pressure and oxidizer mass fraction are displayed in Figs 8.27 and 8.28, for a $100 \mu m$ droplet. The extinction diameter decreases with increasing temperature and increasing oxidizer mass fraction. The extinction velocity increases with temperature and oxidizer mass fraction.

8.3 Summary of the chapter

In this chapter, two models are developed. First, the TP-TFLES model is developed and validated : the combustion model TFLES is taken into account in the spray computation, to insure that laminar homogeneous spray flame structures are well recovered in LES. Second, *MuStARD* was developed to enable single droplet combustion in LES. The model consists in a single droplet combustion model, which is activated thanks to different criteria checking if a droplet is burning individually. *MuStARD* is validated step by step with simple experiments, which gives good overall

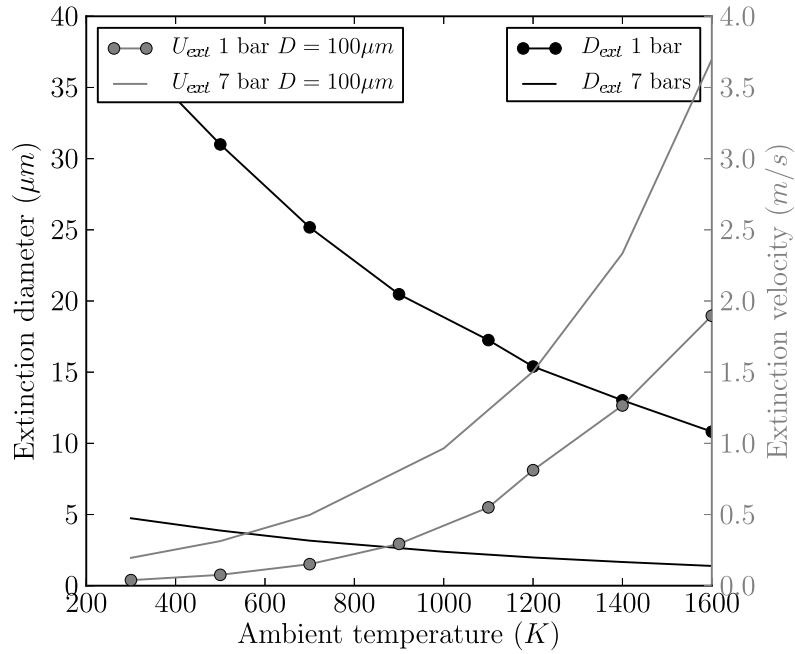


Figure 8.27 : Variation of the extinction criteria with temperature and pressure for a 100 μm n-heptane droplet.

results, and is implemented in AVBP. In the next chapter, *MuStARD* will be applied to more complex configurations.

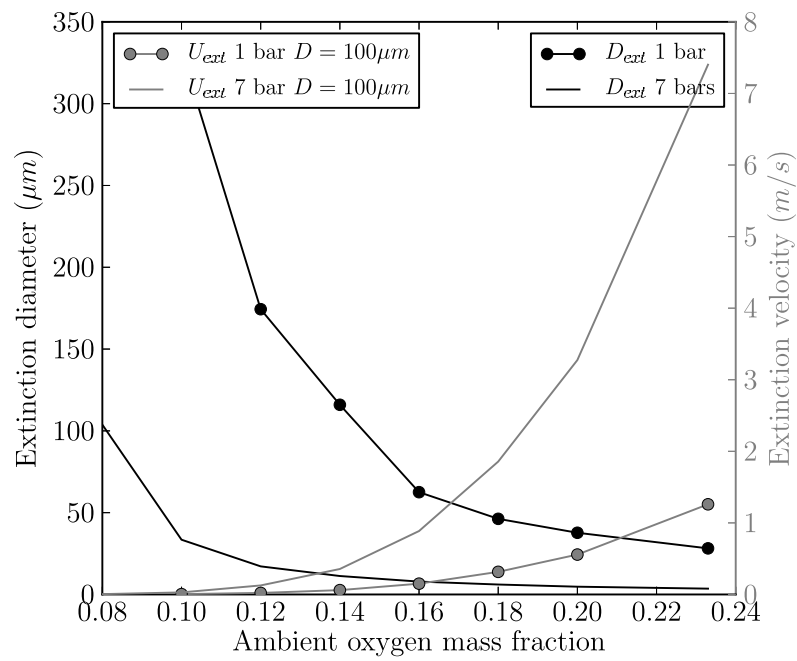


Figure 8.28 : Variation of the extinction criteria with oxygen mass fraction and pressure for a $100\ \mu\text{m}$ *n*-heptane droplet.

Chapitre 9

Application du modèle *MuStARD* à des cas académiques simples

Sommaire

9.1	Goutte isolée statique - configuration 0D	176
9.2	Train de gouttes dans un écoulement chaud - configuration 1D	177
9.3	Flamme laminaire à contre-courant diphasique - Configuration 2D	179
9.3.1	<i>Comparaison avec un cas expérimental</i>	179
9.3.2	<i>Flamme contre-courant diphasique en condition de fonctionnement type moteurs aéronautiques</i>	188
9.4	Conclusions sur ce chapitre	191

Dans ce chapitre, le modèle *MuStARD* est appliqué à des cas relativement simples, dans un ordre de complexité croissante. Les situations étudiées sont choisies pour fournir un élément de validation au modèle *MuStARD*, soit en comparaison d'une expérience adaptée, soit par l'étude d'un cas simplifié permettant d'analyser le comportement particulier du modèle *MuStARD* et son apport par rapport à l'approche classique.

Trois configurations sont étudiées et présentées dans la suite. Tout d'abord, l'évolution d'une goutte isolée statique est comparée à des données expérimentales (configuration "0D"). Ensuite, un train de gouttes isolées injectées sur une ligne, à la même vitesse qu'un écoulement chaud et oxydant est étudié (configuration "1D"). Enfin, une configuration d'écoulement à contre-courant avec spray, s'appuyant sur un cas expérimental, est abordée (configuration "2D"). La dernière étape de validation, à savoir l'application à une configuration 3D pleinement turbulente, fait l'objet de la dernière partie de cette thèse (Chap. 10 à 12). Dans la suite, la dénomination *AS* correspond à une simulation se faisant uniquement avec le modèle d'évaporation standard d'Abramzon-Sirignano (Sect. 4.3). Dans un souci de simplicité, on désignera par "simulation *MuStARD* ", les simulations utilisant le modèle *MuStARD*.

9.1 Goutte isolée statique - configuration 0D

Le modèle *MuStARD* est tout d'abord comparé à une expérience de goutte isolée s'auto-allumant. Les résultats expérimentaux sont tirés du travail de Xu et al. [226], et correspondent aux évolutions de gouttes de *n*-décane, suspendues au bout d'une fibre, et plongées dans une chambre de combustion à 1097 K et pression atmosphérique. Cette expérience est reproduite grâce au modèle 0D présenté en Sect. 8.2.5.3 et qui permet de calculer l'évolution d'une goutte isolée avec *MuStARD*. La comparaison est présentée en Fig. 9.1, pour trois diamètres de gouttes différents, tous de l'ordre du *mm*. Les instants correspondants à l'auto-allumage et à l'extinction de la goutte, détectés respectivement par le critère d'allumage et d'extinction, sont aussi indiqués. On remarque tout d'abord que le modèle *MuStARD* prédit un auto-allumage très rapide et une extinction en diamètre très tardive : la goutte est en mode E la quasi-totalité de sa vie. Dans l'expérience, Xu *et al.* observe bien un auto-allumage précoce et une extinction tardive, sans fournir une mesure des instants d'allumage et d'extinction du fait de la difficulté de les quantifier visuellement.

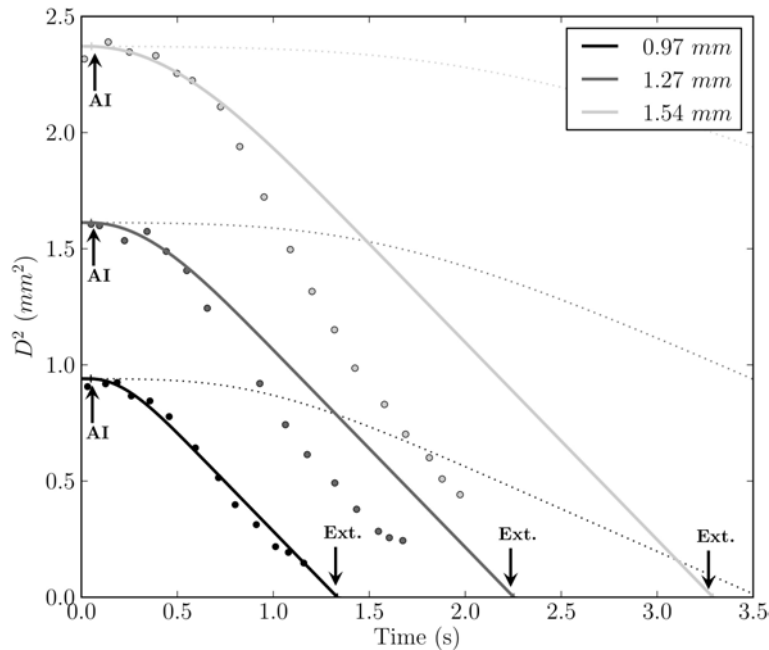


Figure 9.1 : Comparaison entre le modèle *MuStARD* (lignes) et l'expérience (symboles) de [226]. Gouttes de *n*-décane plongées dans un environnement d'air à 1097 K et pression atmosphérique. Les lignes en pointillés correspondent aux résultats de simulation avec modèle d'évaporation seul AS.

En ce qui concerne l'évolution temporelle de la goutte de 0,97 mm, l'accord est tout à fait satisfaisant, notamment en terme de temps de préchauffage, de pente de l'évolution en d^2 et de temps de vie. En revanche, pour les diamètres supérieurs à 1 mm, le modèle *MuStARD* sur-prédit le temps de vie de la goutte, avec un écart qui augmente avec le diamètre initial. Lorsqu'on analyse plus finement les résultats expérimentaux, on constate que l'évolution en d^2 n'est pas de pente

constante et dépend du diamètre initial. Or, la pente de la loi en d^2 issue du modèle de combustion de goutte isolée (Sect. 8.2.5) ne dépend pas de ce diamètre initial (comme le montrent les résultats visibles en Fig. 9.1). Un très grand nombre d'expériences de gouttes évaporantes, mais aussi de gouttes allumées (Fig. 8.22) confirment cette non-dépendance de la pente au diamètre initial de la goutte. L'expérience de Xu fait donc vraisemblablement apparaître un comportement physique supplémentaire. En fait, dans cette plage particulière de température, Xu et al. [226] observent, pour les gouttes de n-décane spécifiquement, un rayonnement important, lié à la formation d'une couche de suie englobant la goutte. L'intensité de ce rayonnement est d'autant plus importante que le diamètre initial de la goutte est grand. Le rayonnement a pour conséquence directe d'augmenter le taux d'évaporation de la goutte. De ce fait, Xu et al. observe une dépendance de la décroissance en D^2 au diamètre initial de la goutte. Le modèle *MuStARD* ne prenant pas en compte la formation possible de suies, ni le rayonnement en résultant, ce phénomène peut expliquer l'écart aux mesures observé en Fig. 9.1.

Cependant, l'influence du rayonnement est essentiellement visible sur les gouttes de diamètre supérieur à 1 mm [226] et dans des conditions environnantes permettant une apparition importante de suies. Or, ces très grosses gouttes sont peu, voire pas présentes dans les applications visées, où sont générées plutôt des gouttes de l'ordre du dixième de mm . Étant donné les résultats satisfaisants obtenus pour la goutte de 0.97 mm , ainsi que les validations précédentes de gouttes allumées (Figs. 8.22, 8.23, 8.24 et 8.25), le modèle *MuStARD* peut être appliqué avec un bon niveau de confiance dans les applications visées. De plus, si l'on compare sur ce cas particulier le modèle *MuStARD* au modèle d'évaporation seul *AS* (lignes pointillés en Fig. 9.1), on observe clairement l'amélioration apportée par *MuStARD*. En prenant en compte l'auto-allumage puis l'évolution de la goutte en combustion isolée, on réduit très fortement l'écart à l'expérience.

9.2 Train de gouttes dans un écoulement chaud - configuration 1D

La deuxième situation étudiée correspond à l'injection d'un train de gouttes dans une géométrie 1D. Des gouttes de n-heptane, de $200\text{ }\mu\text{m}$ de diamètre, initialement à 300K , sont injectées à la même vitesse (0.2 m/s) qu'un écoulement d'air laminaire chaud (1050K) à pression atmosphérique. La richesse globale à l'injection est égale à 0.6 . Dans ces conditions de température et de pression, une simulation 0D montre notamment que les gouttes s'auto-allument avant leur évaporation complète. Dans la mesure où il n'y a pas de mesure de cette configuration, seule la comparaison des deux simulations avec *MuStARD* et *AS* est montrée en Fig. 9.2.

Le modèle *MuStARD* prédit l'auto-allumage des gouttes à environ $0,25\text{ cm}$ du point d'injection, lorsque l'indicateur I_{LW} atteint l'unité (Fig. 9.2 d.). On remarque une rupture de pente pour l'ensemble des valeurs liées à la phase liquide : augmentation rapide de la température des gouttes à partir de l'allumage, augmentation de la régression du diamètre. Le taux de consommation de la

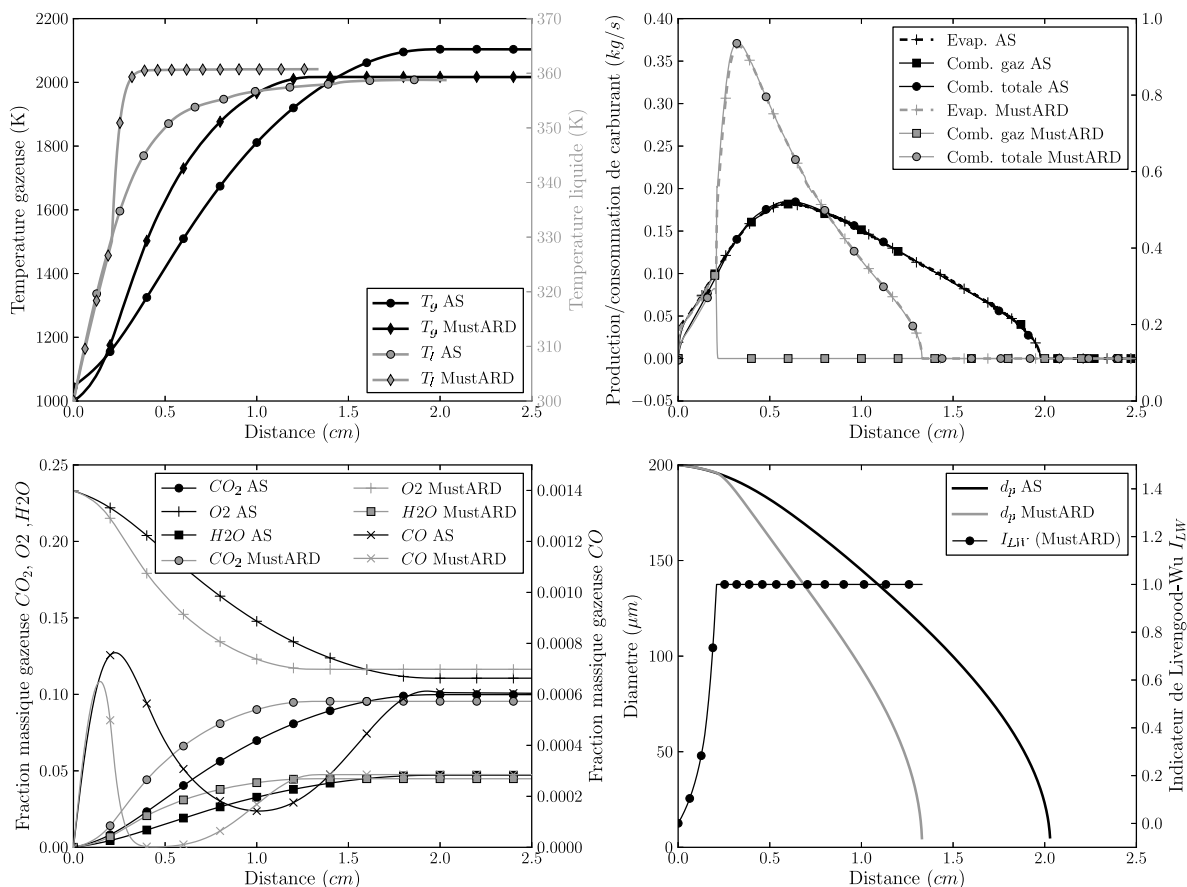


Figure 9.2 : Configuration 1D (train de gouttes dans un écoulement chaud) : Comparaison des profils instantanés des variables gazeuses et liquides, obtenus avec les modèles MuStARD et AS. (a) températures gazeuse et liquide, (b) taux de production (évaporation) et de consommation (combustion) de vapeur de carburant dans la phase gazeuse et totale (i.e. avec la combustion de goutte), (c) fractions massiques d'espèces, (d) diamètre et Indice de Livengood-Wu.

vapeur de carburant se fait exclusivement en combustion de goutte isolée (Fig. 9.2 b.). Les gouttes subsistent jusqu'à 1.4 cm environ.

En ce qui concerne la simulation AS, aucune rupture de pente n'est visible, puisque les gouttes restent dans un mode purement évaporant. En revanche, la température de 1000 K est suffisamment forte pour activer la combustion de la vapeur de fuel. Ainsi, le carburant évaporé est transféré à la phase gazeuse et est intégralement et localement brûlé. Le taux de consommation est donc entièrement piloté par le taux d'évaporation local (Fig. 9.2 b.). Cette réaction entraîne une augmentation significative de la température gazeuse.

Pour les deux simulations, les conditions finales sont identiques puisque la combustion complète du carburant liquide a lieu avant la sortie. La seule différence vient du fait que la combustion se

fait très majoritairement au niveau des gouttes pour le modèle *MuStARD* et entièrement au niveau de la phase gazeuse pour la simulation *AS*. De plus, des différences locales de comportement sont observées : le modèle d'évaporation seul n'ayant pas la possibilité de prendre en compte la présence d'une flamme proche de la goutte, la simulation *AS* prédit un temps de préchauffage plus long et un taux d'évaporation local plus faible qu'avec modèle *MuStARD*. De ce fait, le temps de vie des gouttes est plus long, la pénétration du train de goutte plus grande ($\sim 2\text{ cm}$) et le taux de dégagement de chaleur plus étalé dans la simulation *AS* avec modèle d'évaporation seul.

L'écart entre les modèles reste relativement faible dans ce cas précis, par rapport au cas précédent (Fig. 9.1), car la température gazeuse vue par la goutte est relativement importante et augmente au fur et à mesure que la réaction a lieu. En effet l'évolution d'une goutte en combustion est relativement similaire à l'évolution d'une goutte s'évaporant dans un univers proche de 2000 K.

Cette configuration permet aussi de valider l'implantation du couplage liquide-gaz avec le modèle *MuStARD*, puisque la température de fin de combustion est correcte en sortie de la chambre 1D. En conclusion, on constate donc un effet notable du modèle *MuStARD*, notamment en terme de prédiction du temps de vie de la goutte. L'influence relative du modèle *MuStARD* diminue, lorsque la température environnante augmente.

9.3 Flamme laminaire à contre-courant diphasique - Configuration 2D

9.3.1 Comparaison avec un cas expérimental

9.3.1.1 Présentation de la configuration expérimentale

Une configuration à contre-courant avec injection liquide, présentant une interaction forte entre la flamme et le spray, a été étudiée par Mikami *et al.* [143]. Pour l'un des points de fonctionnement qui correspond à une distribution relativement chargée en gouttes de grandes tailles, les auteurs observent très clairement une combustion de goutte isolée, après la traversée d'une première flamme de diffusion homogène. Ce cas peut donc servir d'élément de validation pour le modèle *MuStARD*.

Le dispositif expérimental est constitué de deux tubes verticaux et coaxiaux, de 23 mm de diamètre, mis face à face, générant un écoulement laminaire à contre-courant avec plan de stagnation (Fig. 9.3). Les sorties des tubes sont distantes de la longueur $L = 10\text{ mm}$. Le spray liquide de n-heptane est injecté à l'entrée du tube inférieur par le biais d'un injecteur pressurisé. Le spray est ensuite entraîné par l'écoulement à travers le tube jusqu'à déboucher dans la zone d'injection. Le temps convectif associé est suffisamment long pour que la vitesse des gouttes du spray s'équilibrent avec celle de la phase gazeuse qui les porte. Le point de fonctionnement étudié correspond à une injection d'oxygène pur à température ambiante dans le tube supérieur, et d'une injection liquide avec de l'azote pur à température ambiante dans le tube inférieur. Après allumage forcé,

une flamme se stabilise entre les deux jets. La richesse globale est de 0,63. L'étirement de la configuration est estimé à 320 s^{-1} en utilisant la valeur théorique du gradient de vitesse au point de stagnation :

$$a = \frac{2}{L} \left(V_+ + V_- \sqrt{\frac{\rho_-}{\rho_+}} \right) \quad (9.1)$$

où V est la vitesse axiale et $+$ et $-$ désignent respectivement les conditions d'entrées dans le tube supérieur et inférieur.

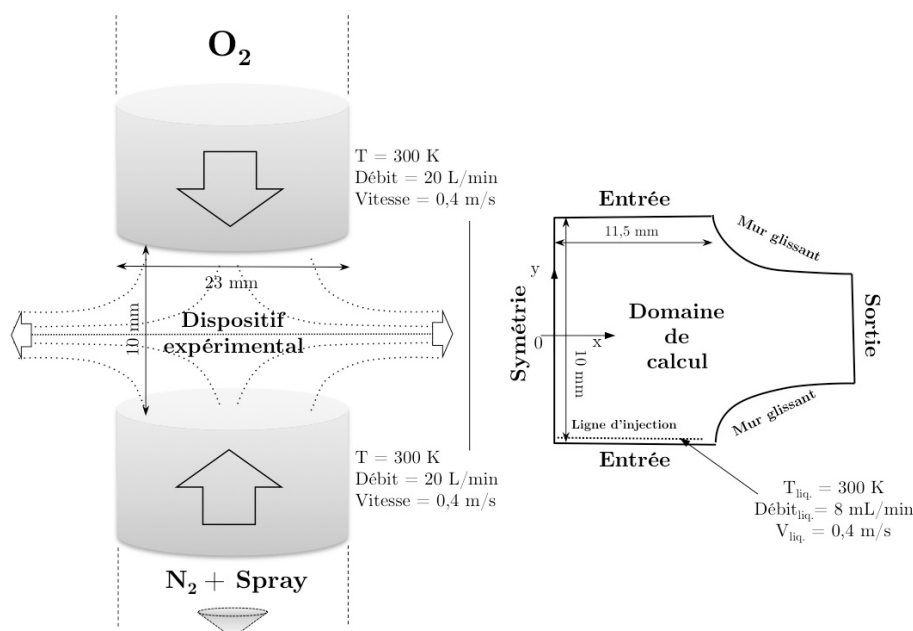


Figure 9.3 : Schéma du dispositif expérimental de Mikami et al. [143] (gauche) et du domaine numérique et des conditions limites associées (droite).

Les auteurs fournissent la distribution en taille des gouttes en sortie du tube inférieur (Fig. 9.4), avant le début de l'évaporation, ainsi qu'une image de la flamme bleue, obtenue avec un temps de pause de 33 ms (Fig. 9.7).

9.3.1.2 Présentation de la configuration numérique

Le domaine de calcul commence à la sortie des tubes. Le domaine est 2D-plan, donc non axi-symétrique comme l'expérience, entraînant une dilatation radiale des gaz plus faible. En revanche, les profils des vitesses en zone proche de l'axe de symétrie dans les cas 2D-plan et axi-symétrique ont des comportements similaires. Les vitesses d'entrées de la simulation sont obtenues en calculant, à partir des débits expérimentaux, les vitesses moyennes en sortie de chaque tube, reportées en Fig. 9.3.

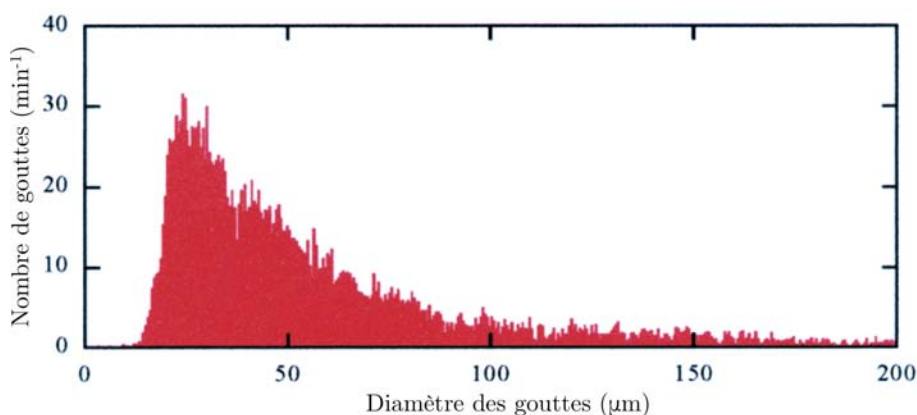


Figure 9.4 : Distribution expérimentale de taille de gouttes en sortie du tube inférieur [143].

Le spray est injecté à la même vitesse que le gaz, sur une ligne de 10 mm perpendiculaire à l'écoulement à la sortie du tube inférieur¹, avec la distribution de taille expérimentale, grâce à la méthode d'injection numérique d'une distribution discrète, détaillée en Chap. 5.2.

9.3.1.3 Modélisation de la chimie n-heptane/air

La résolution numérique des réactions chimiques est l'une des principales difficultés de la simulation d'un écoulement réactif. Le nombre d'espèces et de réactions élémentaires impliquées dans une oxydation est généralement très grand, ce qui induit un coût calcul important, chaque espèce devant être transportée spatialement. De plus, la raideur du système réactif implique de résoudre des échelles de temps et d'espace extrêmement petites, conduisant à de très petits pas de temps et un maillage très raffiné. De telles contraintes obligent à utiliser des descriptions simplifiées de la chimie, capables de ne rendre compte que d'un nombre limité de comportements spécifiques du mélange chimique. Les principales caractéristiques qu'un schéma simplifié doit pouvoir capturer, ont été résumées par Reveillon [170] (Fig. 9.5), auxquelles s'ajoutent une bonne prédiction du délai d'auto-allumage du mélange, et de l'émission de composés polluants (CO , NO_x , suies).

Une approche de simplification d'un schéma cinétique détaillé consiste à le réduire à ses principaux mécanismes, par diverses techniques numériques de réduction, récemment revues dans [134]. Cependant, pour les hydrocarbures lourds, le nombre d'espèces et de réactions dans le mécanisme ainsi réduit reste encore bien trop important pour être accessible à la simulation LES. A notre connaissance, pour la chimie n-heptane/air, le schéma le plus réduit disponible dans la littérature implique 65 espèces/315 réactions [192] et reste inenvisageable pour la LES d'une géométrie complexe.

1. Dans l'idéal, il aurait fallu simuler l'ensemble du tube inférieur, avec notamment le cône d'injection du spray, afin d'obtenir une distribution spatiale des gouttes à la sortie du tube inférieur qui soit la plus conforme à l'expérience.

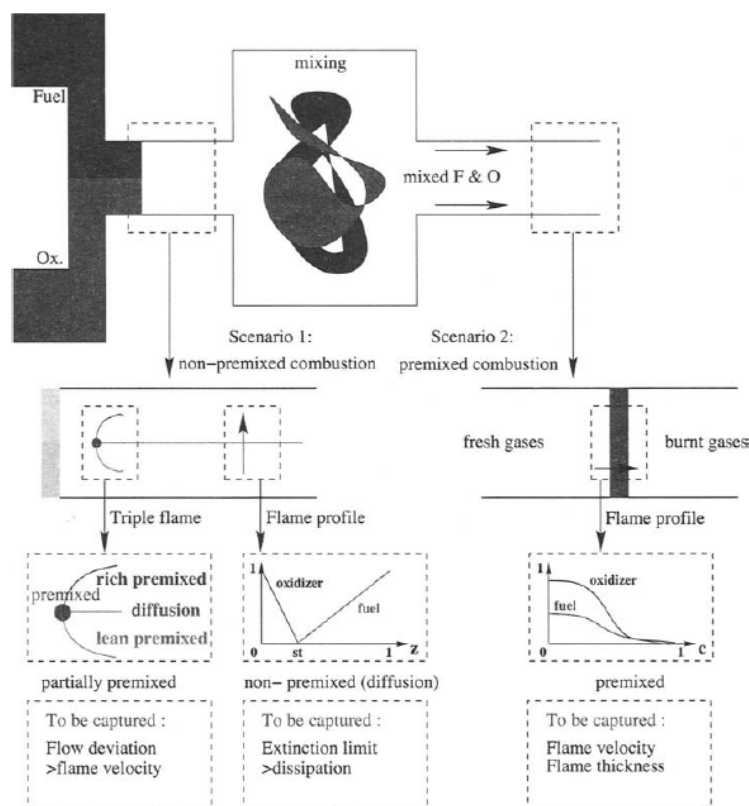
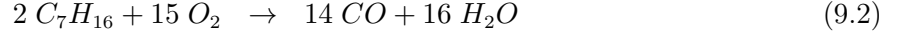


Figure 9.5 : Schéma des différents comportements cinétiques que doit pouvoir décrire un modèle de cinétique chimique (extraits de [170]).

Une autre approche consiste à compléter une réaction globale d'oxydation par quelques espèces et réactions supplémentaires (une ou deux réactions), permettant de reproduire les comportements principaux tels que la température et la vitesse de flamme. Les paramètres des réactions et des espèces sont calibrés par rapport au schéma détaillé. Le schéma à 2-3 réactions, d'un coût CPU très faible, ne permet de reproduire qu'un nombre limité de comportements de la chimie réelle, mais jugés suffisants pour notre étude.

Un schéma réduit à deux étapes pour la chimie n-heptane/air, nommé $2S_C7H16_DP$, est ainsi obtenu en suivant une méthodologie similaire à celle proposée par Franzelli *et al.* [73]. Le mécanisme cinétique inclut notamment l'oxydation du n-heptane en CO . Une réaction d'équilibre CO/CO_2 est introduite pour obtenir une température de gaz brûlés correcte en régime riche. De plus, une modulation du facteur pré-exponentiel de la formule d'Arrhénius en fonction de la richesse est appliquée, pour obtenir une bonne vitesse de flamme laminaire pour les mélanges riches, suivant la méthodologie de [72].

Les deux réactions de $2S_C7H16_DP$ sont :



Le taux de réaction des équations 9.2 et 9.3 s'écrivent selon la loi classique d'Arrhenius :

$$k_{f,1} = A_1 f_1(\Phi) \exp(-T_{a1}/T) [C_7H_{16}]^{n_f} [O_2]^{n_{O_2,1}}, \quad (9.4)$$

$$k_{f,2} = A_2 f_2(\Phi) \exp(-T_{a2}/T) [C_0]^{n_{CO}} [O_2]^{n_{O_2,2}}. \quad (9.5)$$

où A_i sont les facteurs pré-exponentiels, $T_{a,i}$ les températures d'activation, et n_i les ordres de réactions, fournis dans le tableau 9.1. La réaction 2 inverse est obtenu à travers la loi d'action des masses.

Tableau 9.1 : Coefficients chimiques ajustés du schéma réduit $2S_C7H16_DP$.

	Réaction 1	Réaction 2
Facteur pré-exponentiel A_j	1.4×10^{11}	5.0×10^9
Température d'activation $T_{a,j}$	29000 K	21000 K
Ordres de réaction	$n_f = 0.6$ $n_{O_2,1} = 0.9$	$n_{CO} = 1$ $n_{O_2,2} = 0.5$

Les fonctions de correction des facteurs pré-exponentiels, qui permettent d'obtenir une prédiction correcte de la vitesse de flamme laminaire pour les mélanges riches [72], prennent la forme suivante :

$$f_1(\Phi) = \frac{2}{[1 + \tanh(\frac{\Phi_{0,1} - \Phi}{\sigma_{0,1}})] + B_1 [1 + \tanh(\frac{\Phi - \Phi_{1,1}}{\sigma_{1,1}})] + C_1 [1 + \tanh(\frac{\Phi - \Phi_{2,1}}{\sigma_{2,1}})]} \quad (9.6)$$

$$f_2(\Phi) = \frac{1}{2} [1 + \tanh(\frac{\Phi_{0,2} - \Phi}{\sigma_{0,2}})] + \frac{B_2}{2} [1 + \tanh(\frac{\Phi - \Phi_{1,1}}{\sigma_{1,1}})] + \quad (9.7)$$

$$\frac{C_2}{2} [1 + \tanh(\frac{\Phi - \Phi_{2,2}}{\sigma_{2,2}})] \times [1 + \tanh(\frac{\Phi_{3,2} - \Phi}{\sigma_{3,2}})] \quad (9.8)$$

avec les paramètres d'ajustement fournis dans le tableau 9.2 :

Tableau 9.2 : Coefficient des fonctions de correction PEA (Eqs. 9.6 et 9.8) pour $2S_C7H16_DP$.

	$\Phi_{0,j}$	$\sigma_{0,j}$	B_j	$\Phi_{1,j}$	$\sigma_{1,j}$	C_j	$\Phi_{2,j}$	$\sigma_{2,j}$	$\Phi_{3,j}$	$\sigma_{3,j}$
$j = 1$	1.1635	0.0518	1.131	1.243	0.101	$1.2e^4$	1.494	0.0082	-	-
$j = 2$	1.146	0.045	$1.5e^{-4}$	1.2	0.04	0.035	1.215	0.03	1.32	0.09

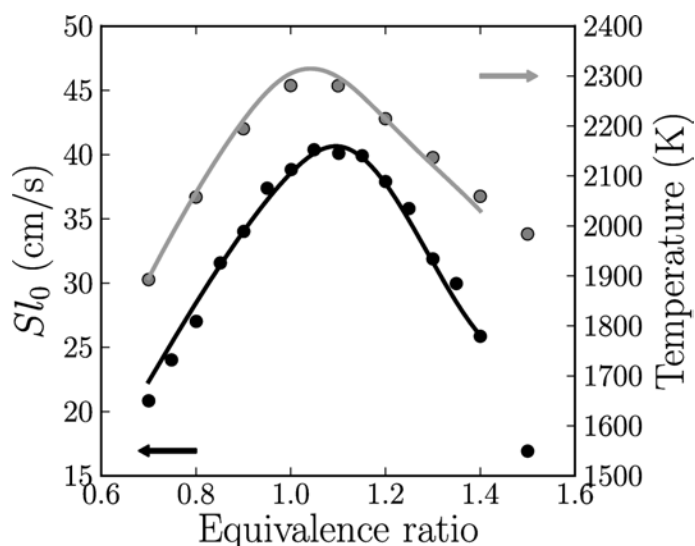


Figure 9.6 : Validation du schéma réduit *2S_C7H16_DP*. Symboles : chimie détaillée [192]. Ligne : *2S_C7H16_DP*. Vitesse laminaire de flamme (noir), et température adiabatique de fin de combustion (gris).

La précision du schéma cinétique réduit est évaluée pour des flammes prémélangées 1D, grâce au logiciel CANTERA [58]. Les résultats sont comparés à un schéma plus détaillé contenant 65 espèces/315 réactions [192], considéré comme la référence. Les résultats présentés Fig. 9.6 montrent que le schéma réduit reproduit convenablement la température adiabatique de fin de combustion, la composition des gaz brûlés et la vitesse de flamme laminaire, pour des richesses allant de 0.7 à 1.4, à pression et température ambiantes.

9.3.1.4 Comparaison avec l'expérience

Des vues instantanées de dégagement de chaleur sont comparés Fig. 9.7 entre les simulations *MuStARD* et *AS*, et l'expérience. Une structure de flamme similaire est visible dans les deux simulations : deux fronts de flammes plans, d'intensité variable englobe une zone de réaction locale autour des gouttes, qui sont représentées par des sphères. Un faible nombre de gouttes, généralement les plus grosses, arrive à traverser la flamme inférieure. Lorsque les gouttes sont colorées en blanc dans le cas *MuStARD* ($I_{LW} = 1$), les gouttes sont en mode E. Ce mode s'active majoritairement après le passage au travers de la flamme inférieure. Les gouttes pénètrent dans le flux à contre courant d'oxygène en ralentissant progressivement et voient leur temps de résidence augmenter dans cette zone. La quasi-totalité des gouttes s'est évaporée avant le front de flamme supérieur. Dans la zone entre les deux fronts de flamme, on observe des intensités de dégagement de chaleur localement différentes autour des gouttes, avec quelques points très marqués en dégagement de chaleur dans la simulation *AS* et un dégagement plus réparti sur l'ensemble des gouttes avec *MuStARD*.

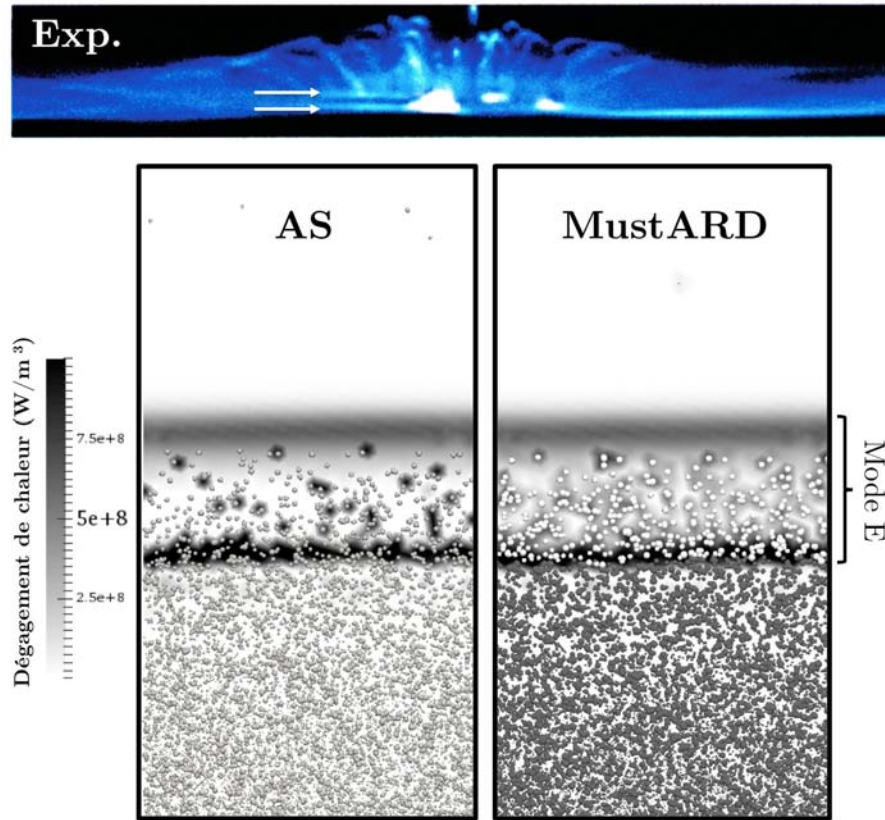


Figure 9.7 : Flamme à contre-courant de Mikami et al.. Haut : photographie dans l'expérience de la flamme avec un temps de pose de 33 ms (extrait de [143]). Bas : champs instantanés de dégagement de chaleur total proche de l'axe de symétrie pour les simulations *MuStARD* et *AS*, dans le cas avec oxygène pur [143]. Les gouttes sont superposées et sont colorées selon leur état V (gris) ou E (blanc) dans la simulation *MuStARD*.

Si l'on compare ces simulations à l'image obtenue dans l'expérience (Fig. 9.7, haut), plusieurs similarités sont observables. Tout d'abord, il y a présence d'une zone de réaction forte en bas dans l'expérience et d'un deuxième front de flamme légèrement au dessus. De plus, on observe sur l'image la trace moyennée de l'émission des flammes localisées autour des gouttes en combustion isolée, régime bien capté par le modèle *MuStARD*. En revanche, au vu du manque de données expérimentales quantitatives, la comparaison ne permet pas de complètement valider le modèle *MuStARD*.

Une analyse de la structure de flamme est proposée dans la suite. Les profils moyens obtenus avec les deux simulations *MuStARD* et *AS* sur l'axe de symétrie sont illustrés Fig. 9.8. Les gouttes, injectées à gauche² en Fig. 9.8, commencent à s'évaporer en l'absence d'oxygène (Fig. 9.8 b. et c.). Une première flamme de diffusion intense se stabilise au point stoichiométrique entre ce carburant pré-évaporé à gauche et l'oxygène pur arrivant par la droite (Figs. 9.9 et 9.8 c.). L'essentiel du

2. L'axe vertical de la configuration est disposé horizontalement, la gauche correspondant au tube inférieur.

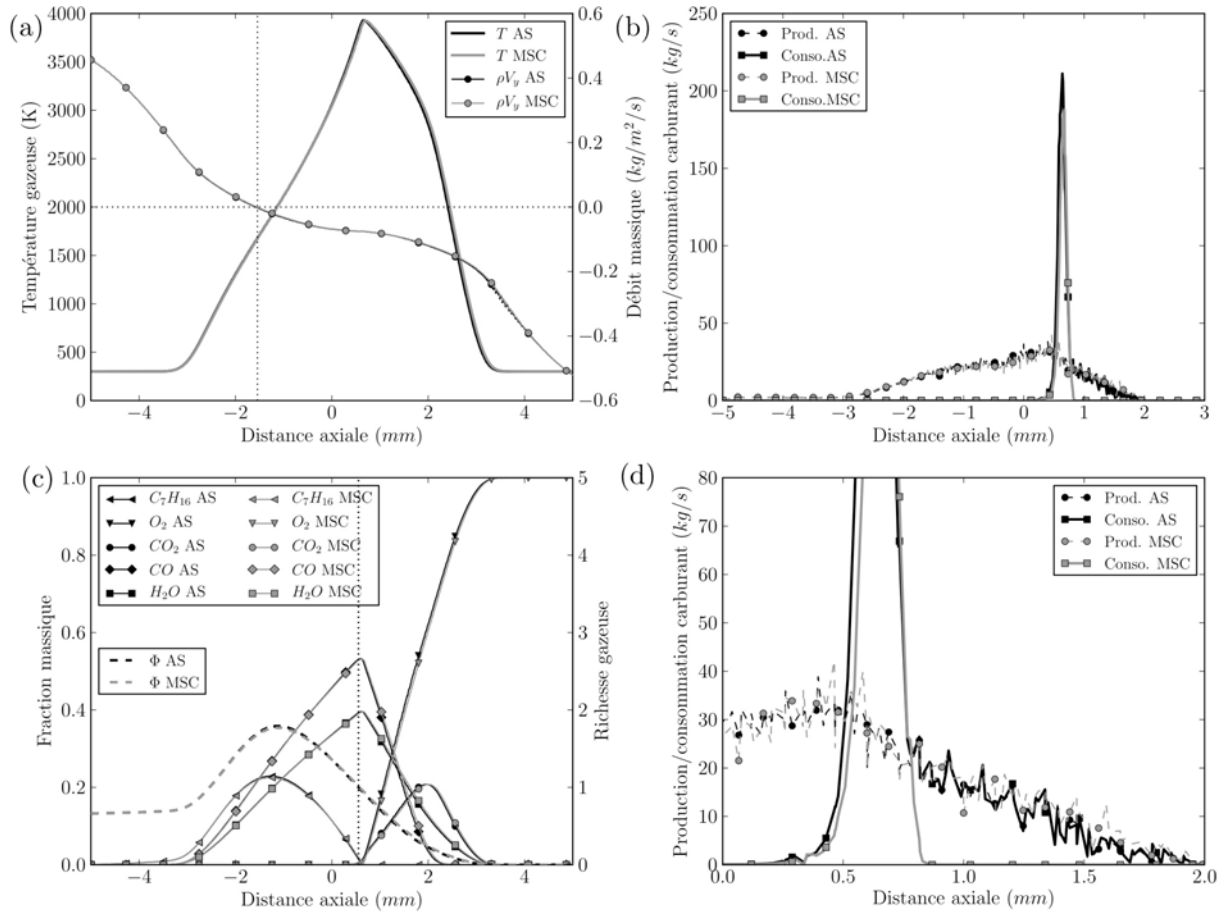


Figure 9.8 : Flamme 2D à contre-courant [143] : moyenne temporelle des profils sur l'axe pour les simulations *MuStARD* et *AS*. (a) Température et vitesse ; (b) Production et consommation de vapeur de carburant ; (c) Fractions massiques d'espèces et richesse ; (d) Agrandissement de (b).

carburant pré-évaporé a été consommé après cette flamme, qui est très similaire dans les deux modèles. Cette première flamme est suivie d'une zone de réaction étalée, également similaire pour les deux modèles, en terme de dégagement de chaleur total, mais montrant une différence notable de comportement. Dans la simulation *AS*, le taux de réaction consomme instantanément le carburant évaporé et mélangé à l'oxygène (Fig. 9.8 d.). Ainsi, l'évaporation pilote une combustion prémélangée. Du fait de la température très élevée dans cette flamme d'oxygène pur (Fig. 9.8 a.), la réaction est très rapide et il n'y a pas d'accumulation dans cette zone (Fig. 9.8 c.). Dans le modèle *MuStARD*, les gouttes s'auto-allument lorsqu'elles traversent la première flamme de diffusion, puis fournissent directement un taux de dégagement de chaleur ((Fig. 9.9). Le taux de consommation de carburant est lui aussi égal au taux d'évaporation par construction du modèle de combustion de goutte isolée (Sect. 8.2.5.2). En Fig. 9.9, on remarque que le taux de dégagement de chaleur de la phase gazeuse, dans le modèle *MuStARD*, est négatif, mais que la somme de ce dégagement avec celui issu des gouttes en mode E est similaire au dégagement de chaleur total du modèle *AS*.

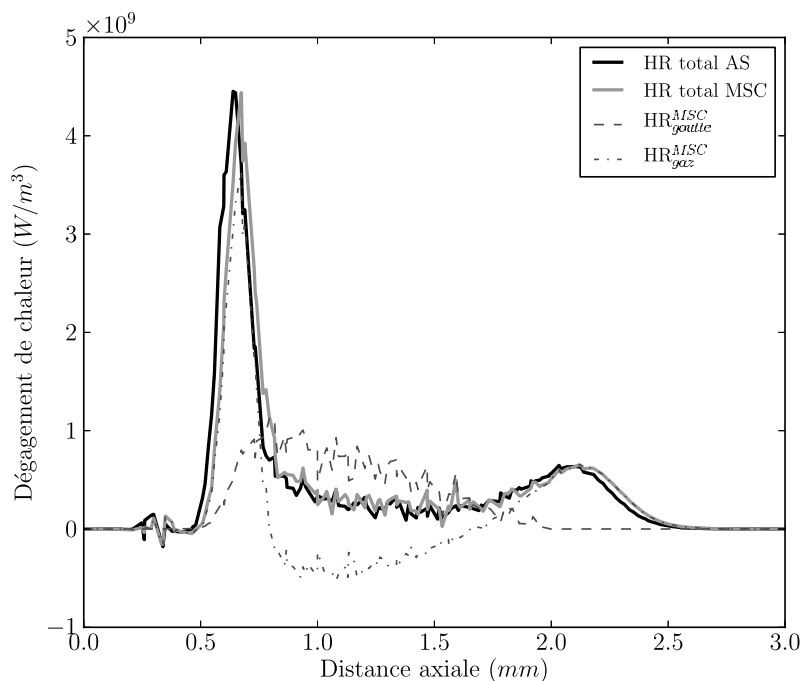


Figure 9.9 : Flamme 2D à contre-courant de Mikami et al. [143] : profils de dégagement de chaleur sur l'axe pour les modèles *MuStARD* et *AS*.

Ce phénomène propre à *MuStARD* s'explique par le fait que le modèle *MuStARD* fait l'hypothèse d'une réaction globale à une étape, ne prenant pas en compte l'équilibre $CO - CO_2$, comme cela est fait avec la chimie réduite *2S_C7H16_DP*. La combustion de goutte isolée produit, dans cette zone, une quantité importante de CO_2 , qui se dissocie ensuite en CO grâce à la réaction 2 (Eq. 9.3). Cette réaction est endothermique dans ce sens, ce qui explique la présence d'un dégagement de chaleur négatif. Après cette zone intermédiaire, on observe un deuxième front de flamme (Fig. 9.9), purement gazeux et moins intense en terme de dégagement de chaleur, qui correspond à une zone d'oxydation du CO gazeux, produit dans le premier front de flamme et dans la zone intermédiaire. En Fig. 9.8 a., on voit également que le point de stagnation est situé à $-1,6$ mm, c'est à dire plus proche du tube inférieur, et que la flamme principale se stabilise sur la ligne stoechiométrique, qui est coté oxygène, puisque la richesse globale est pauvre.

Enfin, le dégagement de chaleur est intégré le long de l'axe. La puissance obtenue dans la simulation *AS* est $27,8$ kW. Dans la simulation *MuStARD*, la puissance est identique ($27,6$ kW), mais se répartit entre les contributions de la combustion de gouttes isolées ($13,6$ kW) et combustion gazeuse ($14,0$ kW). La combustion de gouttes isolées contribue donc pour moitié au taux de dégagement de chaleur total le long de l'axe.

Hormis la différence dans la formation du dégagement de chaleur, les deux modèles fournissent des solutions tout à fait identiques, en terme de position de flamme, de puissance totale obtenue

par combustion, et de profils de température, vitesse et espèce. L'écart très faible observé sur les résultats des deux modèles, dans ce cas particulier, s'explique notamment par le fait que les modèles d'évaporation et de combustion isolée sont très proches pour une température ambiante supérieure à 3500 K , comme c'est le cas ici. En effet, une goutte s'évaporant dans un environnement extrêmement chaud, a une évolution relativement similaire à une goutte en combustion dans le même environnement. Le cas expérimental utilisé ici s'avère donc peu discriminant. C'est pourquoi un cas plus réaliste en termes de conditions de fonctionnement d'une chambre de combustion, est proposé dans la suite.

9.3.2 Flamme contre-courant diphasique en condition de fonctionnement type moteurs aéronautiques

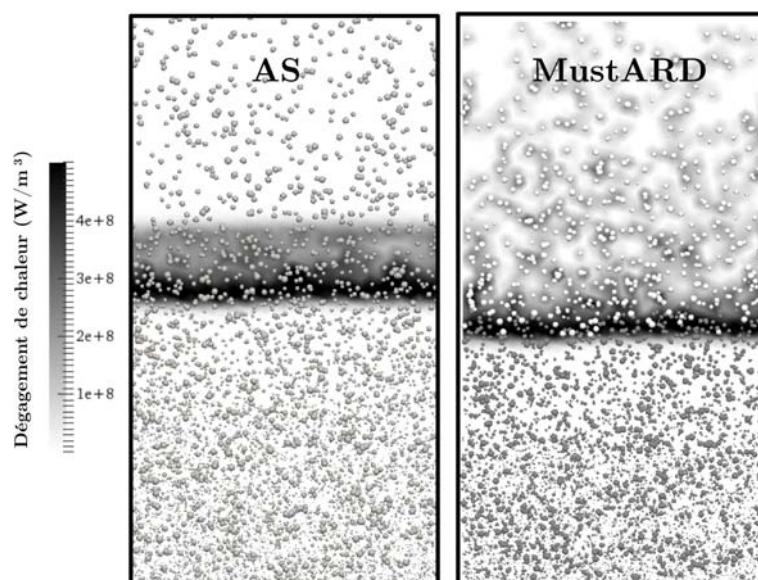


Figure 9.10 : Flamme 2D à contre-courant AIR : champs instantanés de dégagement de chaleur totale proche de l'axe de symétrie pour les simulations *MuStARD* et *AS*, dans le cas avec injection d'air. Les gouttes sont superposées et sont colorées selon leur état *V* (gris) ou *E* (blanc) dans la simulation *MuStARD*.

Afin d'analyser le comportement du modèle *MuStARD* dans un régime plus proche des régimes obtenus dans une chambre de combustion industrielle, notamment en termes de température, l'expérience précédente est reprise et modifiée de la façon suivante : l'injection d'oxygène est remplacée par une injection d'air à température ambiante, et le débit de carburant liquide est adapté pour conserver une richesse globale équivalente au cas précédent proche de la stœchiométrie. De plus, géométrie et taux d'étirement sont conservés. On désignera cette flamme par flamme *AIR*.

Ces nouvelles conditions permettent d'obtenir des différences de comportement plus marquées entre les deux modèles. Premièrement, sur les champs instantanés de dégagement de chaleur (Fig. 9.10), un seul front de flamme apparaît, mais ne se stabilise pas à la même position entre simu-

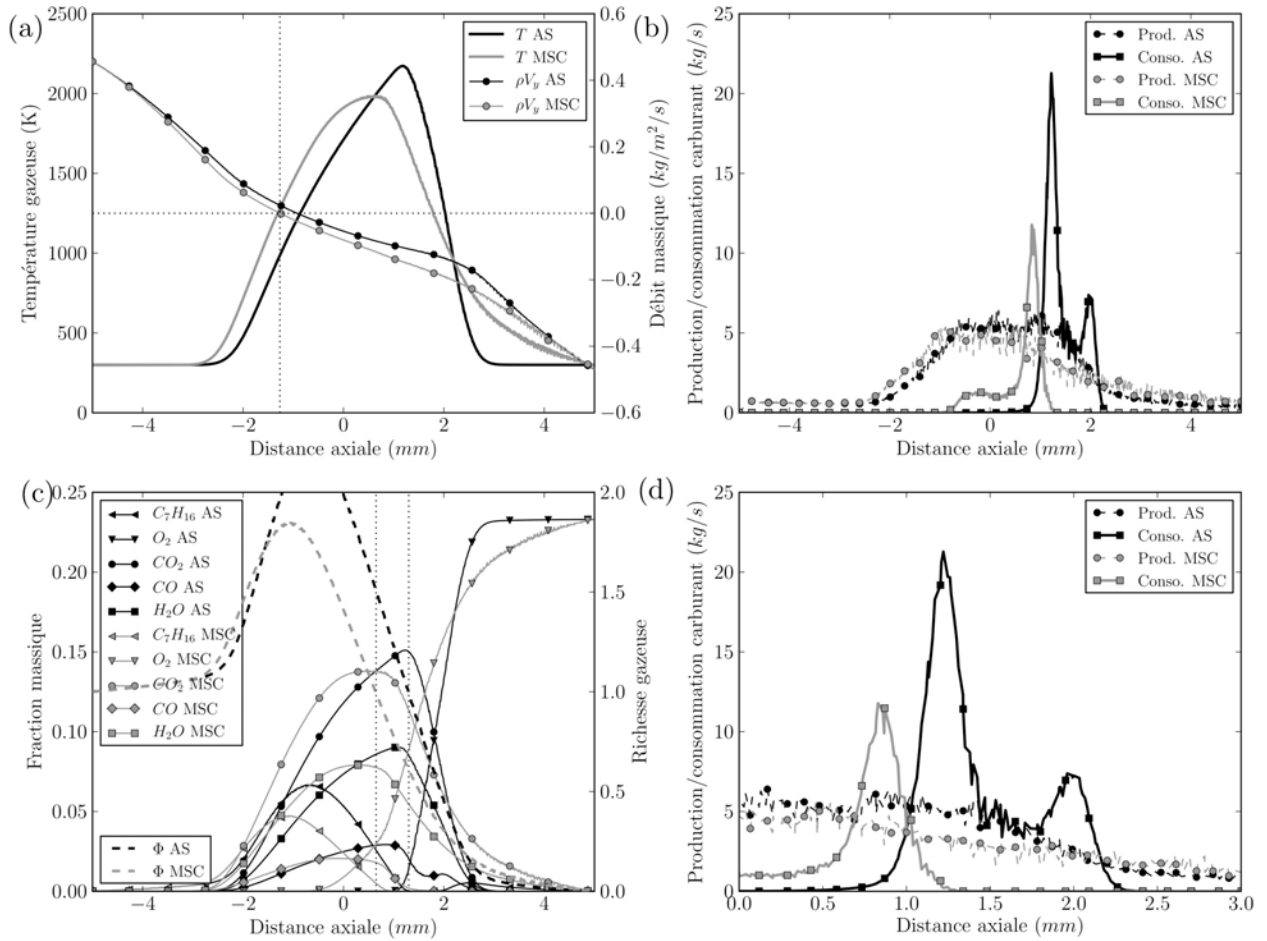


Figure 9.11 : Flamme 2D à contre-courant AIR : moyenne temporelle des profils sur l'axe pour les simulations *MuStARD* et *AS*. (a) Température et vitesse ; (b) Production et consommation de vapeur de carburant ; (c) Fractions massiques d'espèces et richesse ; (d) Agrandissement de (b).

lution *MuStARD* et *AS*. De plus, au dessus de cette flamme, le dégagement de chaleur disparaît rapidement dans la simulation *AS*, tandis qu'il se maintient autour des gouttes en mode E, dans le modèle *MuStARD*. Dans les deux cas, les gouttes de grandes tailles arrivent à remonter l'écoulement et atteignent le tube supérieur, qui injecte de l'air. La comparaison des profils obtenus sur l'axe de symétrie permettent d'analyser en détail le comportement des deux modèles (Fig. 9.11). Dans le cas *AS*, un premier front de flamme de diffusion très marqué se stabilise à gauche (Figs. 9.11 et 9.12) en consommant le carburant pré-évaporé dans la zone de préchauffage, suivie d'une courte zone où le taux de consommation est piloté par le taux d'évaporation, puis d'une zone d'oxydation du *CO*. A droite de cette zone de réaction, la température décroît très vite, du fait de l'arrivée d'air frais, ce qui ralentit très fortement le taux d'évaporation et le taux de consommation associé, qui devient quasiment nul. Dans le cas *MuStARD*, on observe également une première flamme de diffusion, dans laquelle les gouttes s'auto-allument. La réaction au niveau des gouttes

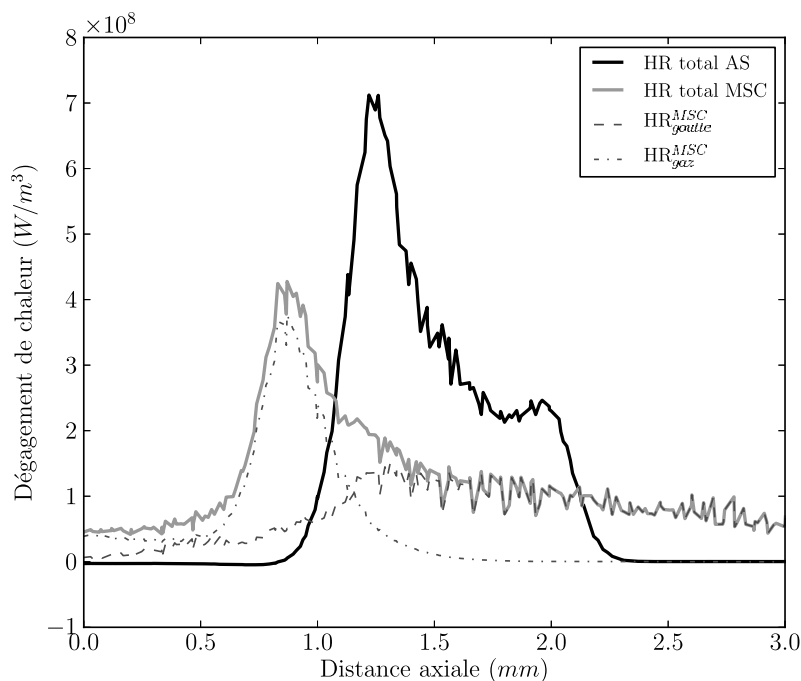


Figure 9.12 : Flamme 2D à contre-courant AIR : profils de dégagement de chaleur sur l'axe pour les modèles *MuStARD* et *AS*.

prend ensuite progressivement le relais après la première flamme (Fig. 9.12), et maintient un taux de dégagement de chaleur et d'évaporation significatif, même dans l'écoulement d'air froid, puisque la réaction reste activée au niveau de la goutte, grâce au modèle *MuStARD*. Le critère d'extinction ne s'active pas puisque ce sont essentiellement les gouttes de grand diamètre qui arrivent à survivre jusqu'à cette zone post-flamme. La position du point stœchiométrique, et donc de la flamme, est également différente entre les deux modèles, ainsi que la position du plan de stagnation.

La structure de flamme est analysé dans l'espace "Richesse - Température gazeuse" en Fig. 9.13. La position du nuage de points est typique d'une structure de flamme de diffusion diphasique (repliement dans la partie riche, du fait de la transformation progressive du carburant liquide en vapeur). On observe un léger décalage entre les deux simulation, lié principalement à l'émission moins importante de *CO* dans le modèle *MuStARD* (Fig. 9.11 c.).

En terme de puissance intégrée le long de l'axe, le modèle *AS* prédit une puissance de 8,4 kW tandis ce que le modèle *MuStARD* prédit une puissance de 10,7 kW, réparti équitablement entre combustion gazeuse (5,4 kW) et combustion de goutte isolée (5,3 kW). Le modèle *MuStARD* génère donc une consommation plus importante du carburant liquide injecté, puisque le modèle maintient la combustion autour des gouttes isolées dans la zone de dilution. Cette différence de premier ordre montre l'un des apports principaux de l'utilisation du modèle *MuStARD*, permettant notamment de maintenir une réaction dans une zone de post-flamme fortement diluée par un écoulement froid.

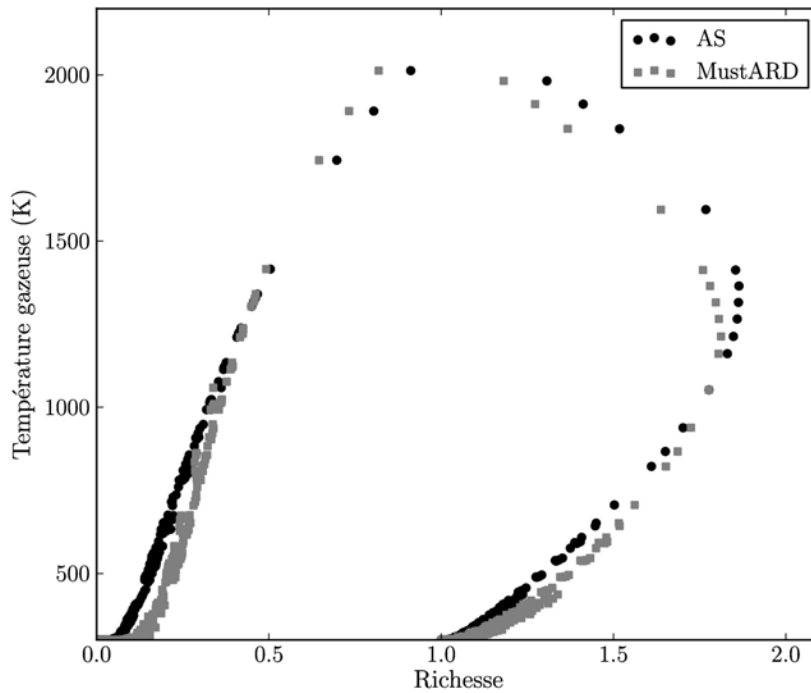


Figure 9.13 : Flamme AIR : structure de flamme dans un diagramme Richesse - Température gazeuse.

9.4 Conclusions sur ce chapitre

Le modèle *MuStARD* a été étudié et validé dans trois situations de complexité croissante, et comparé à l'expérience et à une simulation avec modèle d'évaporation seul, classiquement utilisé (Abramzon-Sirignano). Le modèle *MuStARD* introduit généralement un temps de vie des gouttes plus court et un dégagement de chaleur total plus important. Malheureusement, peu de données expérimentales quantitatives pour la validation de ces cas sont aujourd'hui disponibles.

Il est maintenant possible de passer à l'application du modèle *MuStARD* dans une configuration complexe, intégrant notamment un écoulement turbulent, afin d'observer les modifications de comportement de la flamme associées à la prise en compte du régime de combustion de goutte isolée. Cette étude fait l'objet de la partie suivante (Chaps. 10 à 12).

Cinquième partie

Application à la combustion turbulente d'un spray

Contexte de l'étude

Une validation expérimentale sur une configuration complexe est proposée dans cette partie. Le choix de l'expérience est principalement dicté par l'application industrielle visée, avec une injection directe similaire à un dispositif industriel usuel, une stabilisation de la flamme par écoulement tournant (sans flamme pilote), une flamme confinée dans une chambre, si possible sous pression, et qui présente une forte interaction spray/combustion. De plus, afin d'effectuer une simulation la plus proche du réel, les conditions aux limites de la configuration doivent être particulièrement bien décrites. Enfin, pour valider les résultats de simulation, notamment en termes de structure du spray et de la flamme, des mesures qualitatives et quantitatives doivent être disponibles. Pour ces raisons, le choix de la configuration s'est porté sur un dispositif expérimental conçu par l'Université de Cambridge [32].

Dans le chapitre 10, le dispositif expérimental et la configuration numérique de la simulation sont détaillées. Dans le chapitre 11, une comparaison entre mesures et simulations est présentée, pour le modèle d'évaporation d'Abramzon-Sirignano. Cette simulation sera dénommé *AS*, comme dans les précédents chapitres. Enfin, dans le dernier chapitre, le modèle *MuStARD*, développé au cours de la thèse, est appliqué et comparé à la simulation *AS*.

Chapitre 10

Configuration de calcul et mise en oeuvre numérique

Sommaire

10.1 Présentation de la configuration	197
10.2 Mise en oeuvre de la simulation	199
10.2.1 <i>Maillage et conditions aux limites</i>	199
10.2.2 <i>Comportement de la chimie réduite 2S_C7H16_DP pour la combustion laminaire non-prémélangée</i>	201
10.2.3 <i>Modélisation de la combustion turbulente non-prémélangée</i>	202

10.1 Présentation de la configuration

La géométrie du brûleur diphasique de Cambridge [32] consiste en une veine cylindrique verticale de 350 mm de long débouchant sur une chambre de combustion rectangulaire dont les parois sont en quartz de qualité optique, et ouverte sur l'atmosphère (Fig. 10.1). Six ailettes placées dans la veine, inclinées de 60° par rapport à l'axe de la veine, impriment à l'écoulement froid entrant, un fort mouvement de rotation. A l'intérieur du conduit interne de la veine est placé un injecteur pressurisé, générant un spray en forme de cône creux de 80° d'ouverture, injecté directement dans la chambre, au centre de l'injection d'air. Le carburant liquide est du n-heptane (C_7H_{16}), choisi notamment pour sa volatilité importante par rapport au kérosène, ce qui permet à la flamme de se stabiliser sans avoir besoin de préchauffer l'air entrant. Le point de fonctionnement choisi parmi les différents points de fonctionnement mesurés dans [204], noté SWH1, correspond à un débit d'air entrant de 500 L/s à température ambiante et pression atmosphérique. La vitesse moyenne d'entrée du flux d'air est d'environ 14,8 m/s. Le débit de carburant liquide associé est 0.12 g/s,

et correspond à une richesse globale de la chambre de 0.17, permettant d'obtenir une flamme compacte autour du spray (Fig. 10.2).



Figure 10.1 : Image du brûleur de Cambridge [32].



Figure 10.2 : Image de la flamme obtenue pour le point de fonctionnement SWH1 [204] (extrait de [32]).

Grâce aux parois transparentes de la chambre, des mesures optiques non intrusives sont possibles. Les vitesses axiales et tangentielles de la phase gazeuse sont mesurées à l'aide d'une méthode

LDA (cf. Sect 2.4), à différentes hauteurs dans la chambre, pour les cas réactifs et non-réactifs. Les résultats LDA étant perturbés par la présence des gouttes, la mesure de vitesse gazeuse n'est valide qu'en dehors de la région du spray. La position du spray est évaluée qualitativement via une mesure par diffusion de Mie des gouttes. La position du front de flamme est évaluée par une mesure LIF planaire du radical OH (OH-PLIF). La vitesse des gouttes est aussi mesurée [31] à différentes hauteurs. Enfin, des mesures d'émission de certaines espèces (NO_x , CO , hydrocarbure résiduel) sont effectuées en différents points, le long d'une ligne à la sortie de la chambre de combustion.

10.2 Mise en oeuvre de la simulation

10.2.1 Maillage et conditions aux limites

La géométrie simulée inclut notamment le tube et les ailettes, afin de laisser la turbulence se développer naturellement dans le conduit d'entrée (Fig. 10.3). Ce choix, nécessitant de calculer l'écoulement à l'intérieur du conduit, permet d'éviter d'imposer une valeur d'intensité turbulente a priori non connue à l'entrée de la chambre. Une grande demi-sphère est ajoutée à la sortie de la chambre afin de mimer le comportement de l'atmosphère environnante et limiter l'influence des conditions aux limites de sortie (non montré sur la figure).

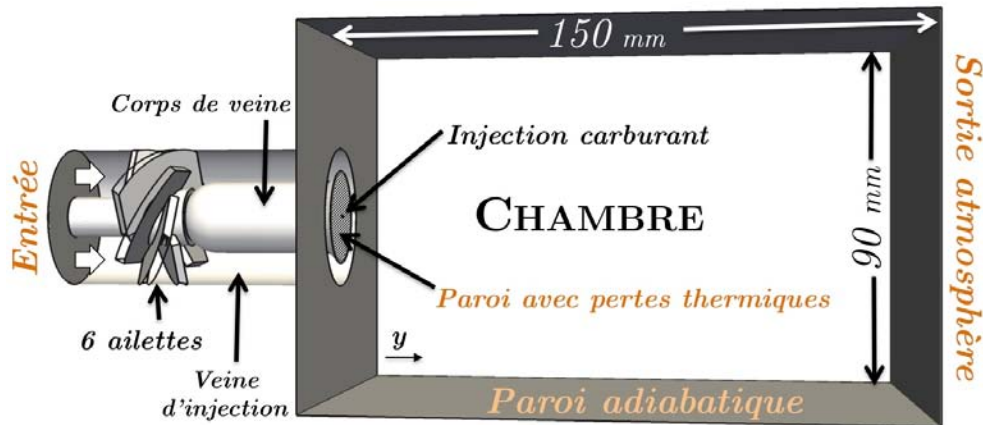


Figure 10.3 : Géométrie et conditions aux limites de la simulation. La chambre débouche sur une demi-sphère de grande taille (non montrée).

Un maillage est construit à partir de cette géométrie, contenant 19 millions de cellules, illustré en Fig. 10.4. La résolution du maillage LES est évaluée *a posteriori* par le rapport entre échelle turbulente de Kolmogorov et la taille locale de la cellule de maillage, qui doit être de l'ordre de 10^{-1} pour une LES convenable. L'échelle turbulente dans la zone de la flamme est estimée par échelle de Kolmogorov de l'ordre de $[10^{-4}, 10^{-2}]$ mm grâce aux formules suivantes :

$$\eta_k = \left(\frac{\nu^3}{\epsilon} \right)^{1/4} \quad (10.1)$$

avec le taux de dissipation de l'énergie cinétique turbulente ϵ estimé *a posteriori* par

$$\epsilon = 2\nu S_{ij}S_{ij} \quad (10.2)$$

où ν est la viscosité cinématique du fluide et le tenseur de déformation du fluide $S = \frac{1}{2}[\nabla\vec{u} + \nabla\vec{u}^T - \text{tr}(\nabla\vec{u})/3 * I]$.

Dans le cas présent, afin de permettre à la turbulence de se développer correctement et d'être transportée avec un minimum de dissipation numérique le long du conduit, la taille des cellules dans cette zone est maintenue très petite ($\eta_k/\Delta x \sim 0.5$ soit $\Delta x \sim 0.2\text{mm}$). En aval, le maillage est progressivement dé-raffiné, $\eta_k/\Delta x$ variant de 0.5 à 0.1 (Fig. 10.4). Les plus petites structures turbulentes ne sont donc pas résolues, mais sont modélisées par le modèle de sous-maille décrit en Sect. 3.4 (WALE [155]). Des conditions aux limites caractéristiques sont utilisées pour décrire l'entrée et la sortie [161].

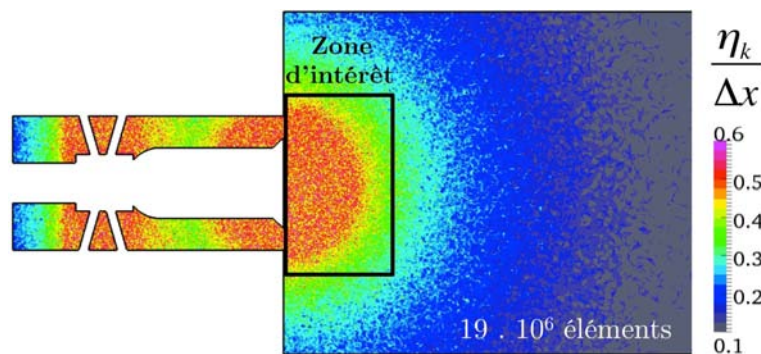


Figure 10.4 : Coupe médiane du maillage, coloré par le rapport $\eta_k/\Delta x$.

Les parois sont des murs adiabatiques non glissants, hormis la surface immergée dans le jet d'air (Fig. 10.3), pour laquelle des pertes thermiques sont imposées, conformément à ce qui est observé sur l'expérience. En effet, cette surface très proche d'une zone très chaude génère un flux thermique important. D'après l'expérience, le flux thermique est estimé par $(T_{g,paroi} - T_{solide}) \times R_h$ où $T_{g,paroi}$ est la température du gaz à la paroi, $T_{solide} = 400\text{ K}$ est la température estimée du solide et $R = 6.7\text{ m}^2/\text{K}/\text{W}$ est la résistance thermique. Ces paramètres introduisent cependant une incertitude dans la simulation, dont l'impact sera analysé en Sect. 11.3.1.

L'injection liquide se fait à travers un modèle d'injecteur appelé FIMUR [104], qui permet d'introduire un spray atomisé, sous la forme d'une cône creux issu d'un injecteur pressurisé. L'angle du cône est obtenu en analysant les images de diffusion de Mie du spray expérimental (cône de 80°). Le spray suit une distribution de taille de type Rosin-Rammler (Eq. 10.3), qui s'étend de $1\ \mu\text{m}$ à $100\ \mu\text{m}$, avec un paramètre d'étalement q de 2.5 et un diamètre moyen de Sauter (SMD) de $d_p^{SMD} = 40\ \mu\text{m}$, évalués d'après les caractéristiques de l'injecteur fournit par le fabricant (Fig. 10.5) :

$$RR(d_p) = q \frac{d_p^{q-1}}{X^q} \exp\left[-\left(\frac{d_p}{X}\right)^q\right] \quad (10.3)$$

avec

$$X = \frac{\Gamma(1 + 2/q)}{\Gamma(1 + 3/q)} d_p^{SMD} \quad (10.4)$$

où Γ est la fonction gamma usuelle.

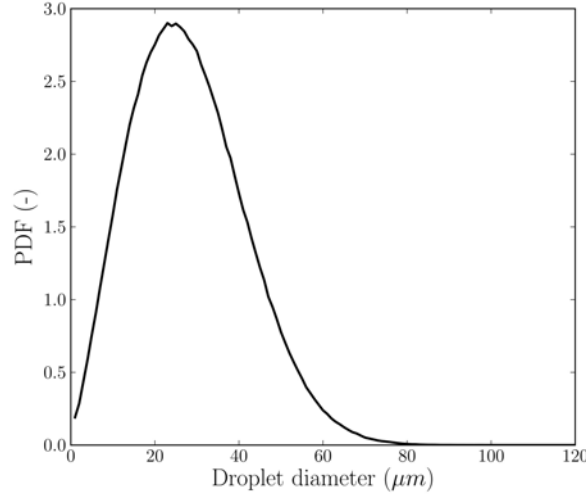


Figure 10.5 : Distribution de taille du spray à l'injection, suivant une fonction Rosin-Rammler ($SMD = 40 \mu m$ et $q = 2.5$).

10.2.2 Comportement de la chimie réduite 2S_C7H16_DP pour la combustion laminaire non-prémélangée

Afin de vérifier la validité du schéma réduit présenté en Sect. 9.3.1.3, le comportement du schéma est préalablement analysé pour des flammes laminares non-prémélangées étirées dans un écoulement contre-courant, obtenu grâce au logiciel CANTERA [58], et comparées au schéma détaillé [192] pour différents niveaux d'étirement. Les conditions d'injection de la configuration à contre-courant, détaillées dans le tableau 10.1, ont été choisies pour être représentatives des conditions moyennes vues par la flamme dans le brûleur étudié. En effet, comme on le verra dans la suite, le spray liquide est injecté dans une zone pauvre en oxygène mais chargé en produits de réaction chaud. Afin d'obtenir une situation analogue dans un écoulement contre-courant purement gazeux, les conditions coté carburant sont pris *a posteriori* sur les champs gazeux, en un point arbitraire situé dans la zone chaude, au coeur du spray.

Les résultats pour la chimie réduite et la chimie détaillée sont comparés en Fig. 10.6, en termes de taux de dégagement de chaleur intégré au travers du front de flamme. Pour les flammes non-prémélangées, le dégagement de chaleur intégré est la principale information, puisque ces flammes n'ont pas de caractéristiques globales comme en prémélange (épaisseur, vitesse...). L'ordre de grandeur du dégagement de chaleur et l'allure de la courbe en fonction de l'étirement sont raisonna-

Tableau 10.1 : Données d'entrée pour les flammes laminaire contre-courant. Température et fractions massiques des espèces.

	Côté heptane	Côté a
T	1200 K	300 K
N-heptane	27%	0%
O_2	0%	23%
N_2	52%	77 %
Gaz brûlés	21%	0%

blement bien prédits par la chimie réduite dans la plage d'étirement considéré, avec un écart augmentant avec le taux d'étirement. Les résultats présents sont considérés suffisamment précis pour notre étude, en l'absence d'une modélisation plus rigoureuse.

10.2.3 Modélisation de la combustion turbulente non-prémélangée

Dans la configuration étudiée ici, la flamme est principalement de type non-prémélangé, comme on le verra dans la suite (Fig. 11.12). La combustion turbulente non-prémélangée fait apparaître des comportements différents par rapport à une combustion turbulente prémélangée, et nécessite de ce fait un traitement particulier.

10.2.3.1 Comportements particuliers de la combustion turbulente non-prémélangée

La théorie des flammes de diffusion¹ laminaires étirées [162] permet d'obtenir ses principales caractéristiques. Cette théorie montre notamment que, loin de l'étirement d'extinction, la structure de ces flammes est pilotée par le taux de dissipation scalaire χ défini comme :

$$\chi = 2\mathcal{D}_{mix}(\nabla Z)^2 \quad (10.5)$$

où \mathcal{D}_{mix} est le coefficient de diffusion du mélange et Z la fraction de mélange au sens de Bilger [18] :

$$Z = \frac{\beta - \beta_{Ox}}{\beta_F - \beta_{Ox}} \quad (10.6)$$

$$\beta = \sum_{i=1}^{N_s} \left(\frac{\alpha_{C,i}}{m} + \frac{\alpha_{H,i}}{n} + \frac{\alpha_{O,i}}{m + n/4} \right) \frac{Y_i}{W_i} \quad (10.7)$$

où N_s est le nombre d'espèces, $\alpha_{l,i}$ le nombre d'atomes l de l'espèce i , pour le carburant $C_m H_n$. β_{Ox} et β_F désignent respectivement la valeur de β à l'entrée d'air (air pur) et à l'entrée carburant (carburant pur). Z est un scalaire passif, solution d'une équation sans terme source. Le taux de

1. ou "non-prémélangée"

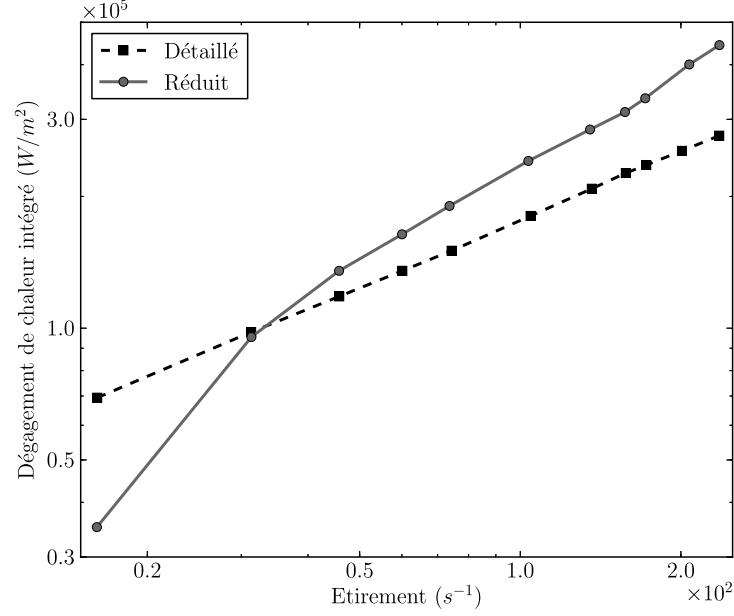


Figure 10.6 : Comparaison du dégagement de chaleur intégré au travers du front de flamme sur l'axe, en fonction du taux d'étirement imposé, pour la chimie réduite et détaillée dans la configuration de flamme de diffusion étirée à contre-courant.

consommation de carburant dans le cas d'une flamme étirée à contre courant est proportionnel à la racine du taux de dissipation scalaire évalué à la stoechiométrie χ_{st} :

$$\Omega_F = -\rho \frac{Y_F^0}{1 - Z_{st}} \sqrt{\mathcal{D}_{mix} \chi_{st}} \quad (10.8)$$

où Y_F^0 est la fraction massique de carburant imposée coté injection de carburant. Toujours dans ce même cas, le taux de dissipation scalaire évalué au point stoechiométrique χ_{st} est directement proportionnel à l'étirement imposé par l'écoulement contre courant :

$$a = \pi \chi_{st} \exp[2(\operatorname{erf}^{-1}(1 - 2Z_{st}))^2] \quad (10.9)$$

Ainsi, dans le cadre simplifié de cette théorie, on montre que la puissance d'une flamme de diffusion est directement piloté par l'étirement qui lui est imposé.

De plus, la flamme de diffusion n'a pas d'épaisseur caractéristique intrinsèque contrairement à une flamme de prémélange. L'épaisseur de la flamme de diffusion est contrôlée par l'écoulement. Dans le cadre de la théorie laminaire, on obtient une estimation de l'épaisseur de la flamme étirée $l_{\mathcal{D}}$, à partir de χ_{st} :

$$l_{\mathcal{D}} \approx \sqrt{\frac{\mathcal{D}_{mix}}{\chi_{st}}} \quad (10.10)$$

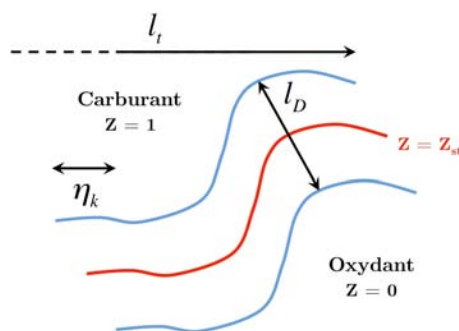


Figure 10.7 : Echelles caractéristiques d'une flamme turbulente non prémélangée.

Enfin, on définit un nombre de Damkhöler \mathcal{D}_a spécifique à la flamme de diffusion, qui correspond au rapport entre temps caractéristiques de l'écoulement τ_{fl} , pris égal à $1/\chi_{st}$) et de la chimie τ_c :

$$\mathcal{D}_a^{fl} = \frac{1}{\chi_{st}\tau_c} \quad (10.11)$$

La flamme existe tant que le temps caractéristique de l'écoulement est plus grand que celui de la chimie ($\mathcal{D}_a \gg 1$). Plus τ_{fl} se rapproche de τ_c , moins la chimie a le temps de consommer les réactifs et l'on se rapproche de l'extinction. La théorie asymptotique de Liñan [130] permet notamment d'obtenir une évaluation du Damkhöler d'extinction \mathcal{D}_a^{ext} .

10.2.3.1.1 Flamme de diffusion et turbulence

Lorsque l'écoulement est turbulent, le front de flamme de diffusion est soumis à des variations intenses de l'étirement, qui modifient fortement sa structure. La figure 10.7 schématise les différentes échelles caractéristiques d'une flamme non prémélangée turbulente, où l_t correspond à l'échelle intégrale de la turbulence et η_k l'échelle de Kolmogorov. Dans le cas d'une turbulence homogène isotrope, l'étirement maximal et le plus petit temps caractéristique du fluide correspondent à l'échelle de Kolmogorov :

$$a(\eta_k) = \frac{1}{\tau(\eta_k)} \quad (10.12)$$

Le temps caractéristique associé à l'échelle intégrale l_t peut être évalué par :

$$\tau_t = \frac{l_t}{u'} \quad (10.13)$$

où u' est la fluctuation de vitesse turbulente. Ces deux temps caractéristiques du fluide permettent d'évaluer deux valeurs du nombre de Damkhöler :

$$\mathcal{D}_{ak} = \frac{\tau(\eta_k)}{\tau_c} = \sqrt{\frac{\epsilon}{\nu}} \frac{1}{\tau_c} \quad (10.14)$$

$$\mathcal{D}_{at} = \frac{\tau(l_t)}{\tau_c} = \frac{l_t}{u'\tau_c} \quad (10.15)$$

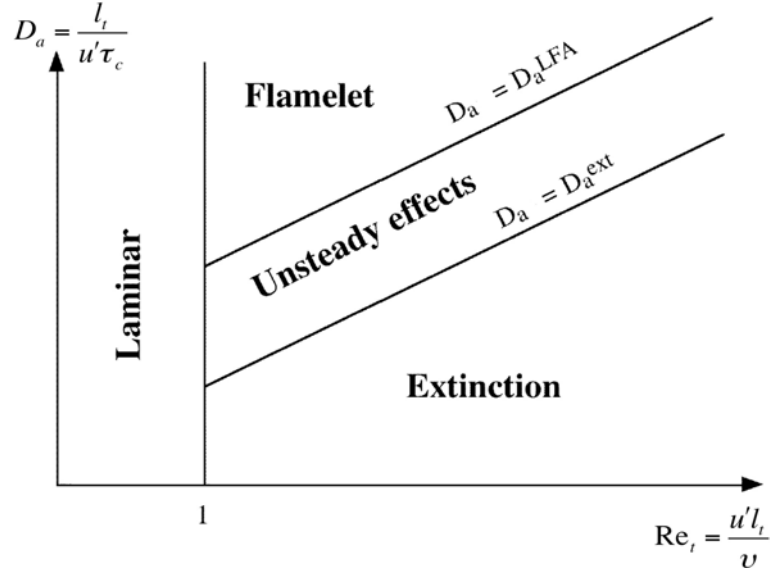


Figure 10.8 : Diagramme de combustion non-prémélangée turbulente en fonction du nombre de Damköhler et du nombre de Reynolds turbulent en échelle log-log (adapté de [162]).

Noter que ces deux nombres sont liés par la relation $\mathcal{D}_{a_t} \approx \sqrt{\mathcal{R}_{e_t}} \mathcal{D}_{a_k}$ où $R_{e_t} = u'l_t/\nu$.

De la même manière que pour les flammes prémélangées, plusieurs études ont cherché à construire des diagrammes de régime de combustion en fonction du nombre de Damköhler et du nombre de Reynolds turbulent \mathcal{R}_{e_t} [52, 202]. En simplifiant, ces études mettent en évidence quatre régimes de combustion non-prémélangée, schématisé dans le diagramme de la Fig. 10.8 :

- Pour les cas où $\mathcal{R}_{e_t} < 1$, on se place dans un cas laminaire.
- Lorsque le temps chimique est très petit (grand $\mathcal{D}_{a_t}^{fl}$), la flamme peut supporter des étirements à l'échelle de Kolmogorov en gardant une structure proche d'une flamme laminaire (régime de "flamelettes"). On introduit le nombre de Damköhler \mathcal{D}_a^{LFA} qui exprime la limite de l'hypothèse de flammelette. Dans ce régime, on doit avoir $\mathcal{D}_{a_t}^{fl} > \mathcal{D}_a^{LFA}$. De plus, l'épaisseur de diffusion minimale de la flamme est alors proche de l'échelle de Kolmogorov : $l_{d,min} \approx \eta_k$.
- Lorsque τ_c augmente, les petites structures de la turbulence entraînent des effets instationnaires à l'intérieur de la zone de réaction.
- Lorsque τ_c augmente encore, la flamme peut s'éteindre ($\mathcal{D}_{a_k}^{fl} \approx \mathcal{D}_a^{ext}$).

Les petites structures turbulentes, non résolues en LES, ont donc une influence variable sur la flamme de diffusion étirée, ne nécessitant pas nécessairement de modèle de combustion turbulente pour être bien captée en LES. Dans le cadre de cette simulation LES bien résolue, la nécessité d'un modèle de combustion est évaluée, en s'appuyant sur les résultats d'un modèle de combustion turbulente non-prémélangée développé par Rocchi [175]. Il s'agit d'une extension de la formulation de flamme épaissie prémélangée aux cas non prémélangés, en prenant en compte les propriétés particulières des flammes non-prémélangées.

Le modèle proposé par Rocchi [175] vise à obtenir sur un maillage LES, le bon taux de dégagement de chaleur d'une flamme de diffusion, même si la flamme simulée est sous résolue par rapport à la flamme réelle. Un taux d'épaississement F est défini pour épaissir le front de flamme sous-résolue, et prend la forme suivante :

$$F = \left(\frac{\Delta x}{\eta_k} \right)^{2/3} = \sqrt{\frac{\Delta x u'_{\Delta x}}{\nu}} \quad (10.16)$$

où Δx est la taille locale de cellule du maillage et $u'_{\Delta x}$ une estimation de la fluctuation de vitesse de sous-maille. Selon Rocchi, il suffit de multiplier par F^2 le coefficient de diffusion dans les équations d'espèces et de température pour que le dégagement de chaleur résolue soit multiplié par un facteur F , et obtenir ainsi le bon taux de dégagement de chaleur. Une fonction d'efficacité similaire à celle définie pour les flammes prémélangées [49] est ensuite utilisée pour modéliser le plissement de sous-maille du front de flamme. De même, le coefficient de diffusion est multiplié par E^2 pour obtenir un dégagement de chaleur résolue multiplié par E . La fonction d'efficacité développée par Charlette et Meneveau [36] sera utilisée dans la suite (Eqs. 3.49 et 3.50).

Le taux d'épaississement F qui devrait être appliqué dans notre cas, est évalué de la manière suivante. Dans la zone de la flamme, la taille de maille est de l'ordre de $2 \cdot 10^{-4} \text{ m}$ et la viscosité cinématique ν est estimée à $10^{-4} \text{ m}^2/\text{s}$. La valeur $u'_{\Delta x}$ est estimée par application de l'opérateur OP2 de Colin *et al.* [49] sur un champ instantané de la simulation sans combustion, et prend des valeurs compris entre 1 et 5 m/s. La vitesse de flamme à richesse 1 est $S_l^0 \approx 0,45 \text{ m/s}$. Avec ces valeurs, la plage de variation de F est $[1,4 ; 3,2]$ et celle de E est $[1,4 ; 2,6]$. D'après ces estimations, la simulation LES sans modèle sous-prédit dans le pire des cas le taux de consommation d'un facteur $3,2 \times 2,6 = 8,2$, et dans le meilleur des cas, d'un facteur $1,4 \times 1,4 = 1,96$. Ainsi, dans le pire de cas, l'approche sans modèle devrait donc sous-prédire assez largement le taux de réaction, et la stabilisation de la flamme devrait être différente de l'expérience. Dans le meilleur des cas, l'approche sans modèle est raisonnable. Au vu de l'ensemble de ces éléments, l'approche sans modèle de combustion turbulente est conservée dans le cas présent.

Chapitre 11

LES diphasique réactive du bruleur de Cambridge avec approche standard

Sommaire

11.1 Cas non réactif	207
11.2 Cas réactif	210
11.3 Analyse de la structure de flamme avec le modèle d'évaporation seul	217
11.3.1 <i>Flammes purement gazeuses : branches I et II</i>	218
11.3.2 <i>Combustion du spray : branches III et IV</i>	222

Dans ce chapitre, on effectue une validation expérimentale de la simulation LES du bruleur de Cambridge avec le modèle d'évaporation seul, (Abramzon-Sirignano [2]), ainsi qu'une étude détaillée de l'écoulement et de la structure de flamme.

11.1 Cas non réactif

L'aptitude de la LES à reproduire les caractéristiques principales de l'expérience est tout d'abord vérifiée pour le cas non-réactif purement gazeux, dont les mesures expérimentales de vitesse sont disponibles. L'accord entre le calcul et l'expérience pour les vitesses moyennes et RMS à différentes hauteurs (Fig. 11.3) dans la chambre de combustion, est particulièrement bon (Figs. 11.1 et 11.2). Notamment, les niveaux de fluctuation de vitesses sont bien reproduits, grâce à la simulation de la veine et des ailettes, permettant à la turbulence de se développer convenablement.

L'écoulement présente une large et longue zone de recirculation centrale (Inner Recirculation Zone IRZ) et des zones de recirculation périphériques, situées dans les coins (Corner Recirculation Zones CRZ) (Fig. 11.3). Le jet d'air giratoire impacte les parois puis est canalisé par les parois

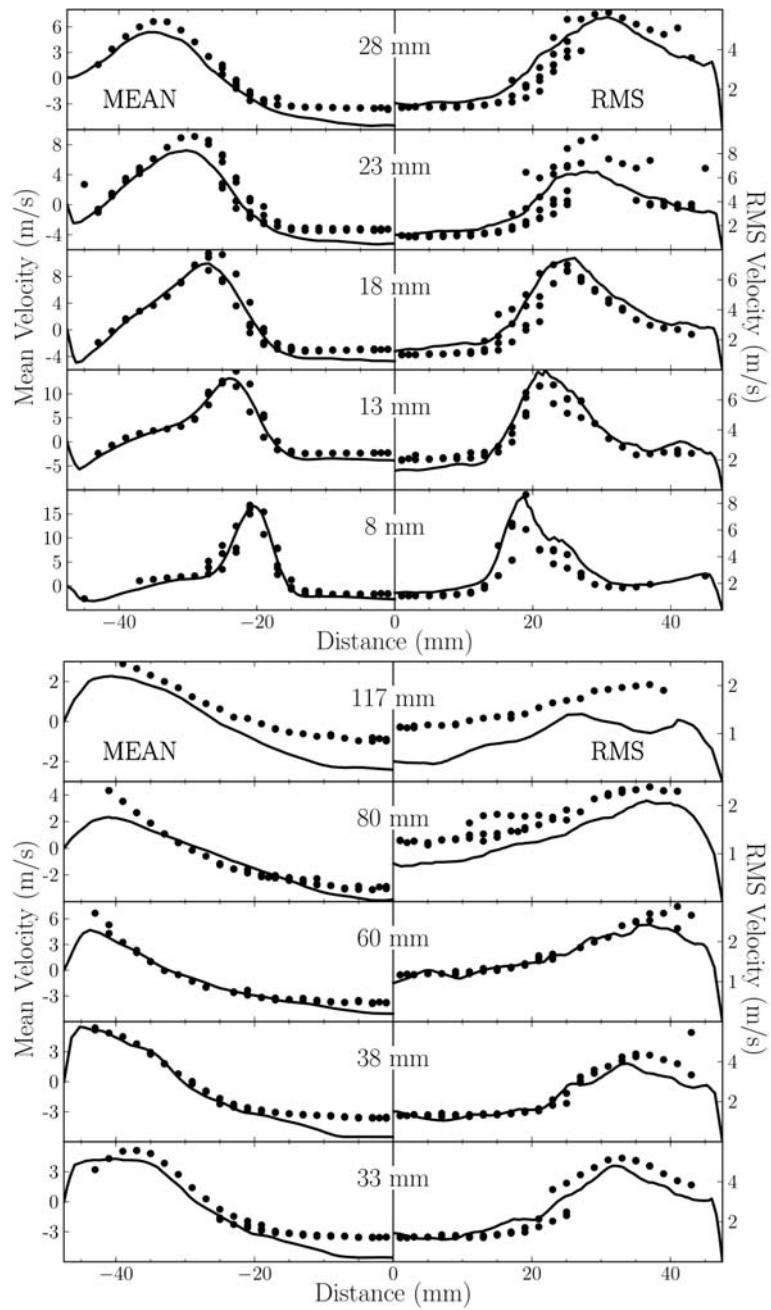


Figure 11.1 : Cas non réactif purement gazeux : LES (lignes) versus expérience (symboles) [204]. Profils axiaux de vitesse gazeuse moyenne et fluctuante à différentes hauteurs dans la chambre (Fig. 11.3).

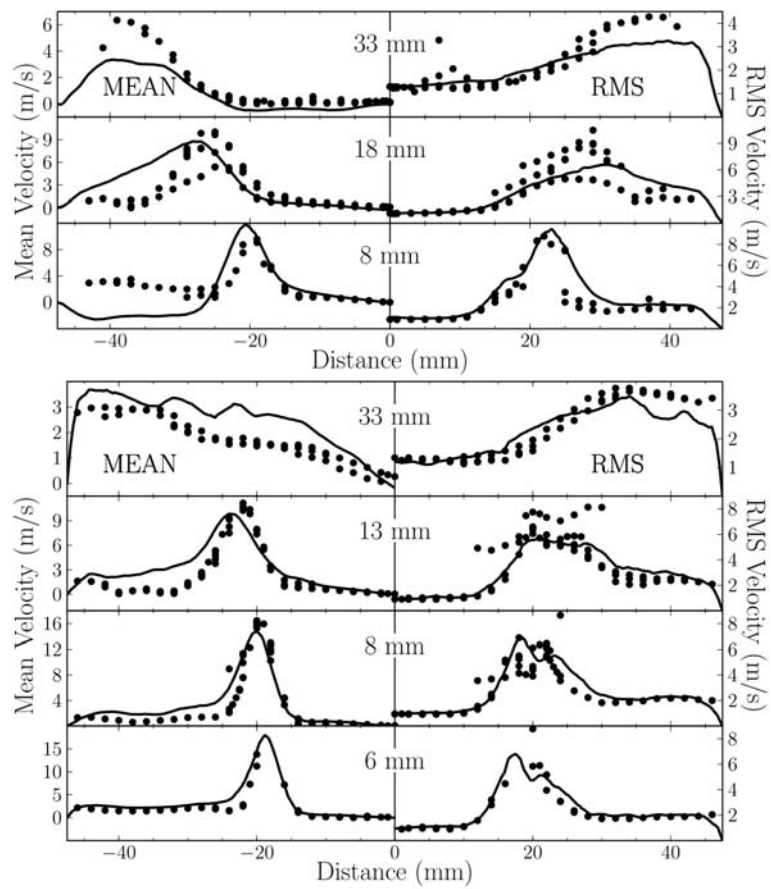


Figure 11.2 : Cas non réactif purement gazeux : LES (lignes) versus expérience (symboles) [204]. Profils radiaux et tangentiels de vitesses gazeuses moyennes et fluctuantes à différentes hauteurs dans la chambre (Fig. 11.3).

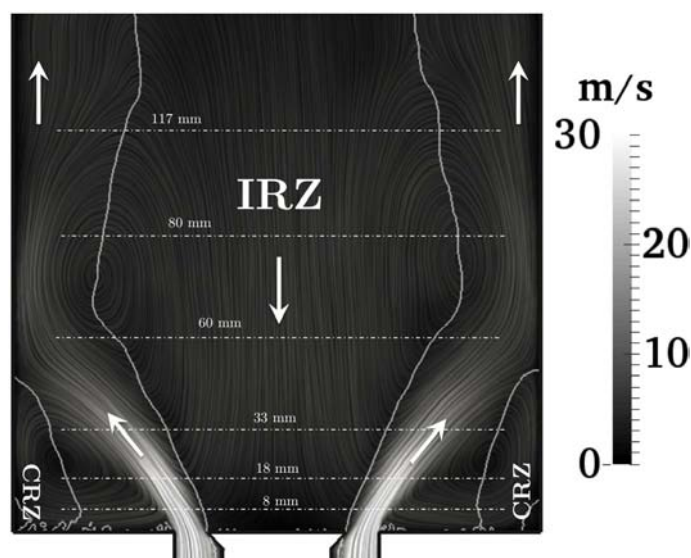


Figure 11.3 : Cas non réactif purement gazeux : Vitesse moyenne dans le plan central de la chambre

jusqu'à la sortie. L'IRZ s'étend jusqu'à l'extérieur de la chambre, ce qui justifie a posteriori l'ajout d'une demi-sphère atmosphérique à la sortie de la chambre.

11.2 Cas réactif

Dans le cas réactif SWH1 [204], une flamme quasi-axisymétrique en forme de M se stabilise à l'arrière du corps de veine en enveloppant le spray liquide. Une comparaison qualitative avec une image issue de l'expérience, montre un bon accord global en termes d'angle du spray, de dispersion des gouttes et de position moyenne de la flamme (Fig. 11.4). Des gouttes traversant la zone principale de réaction sont observées dans l'expérience et dans la LES. Cette interaction forte entre spray et flamme est particulièrement intéressante puisqu'elle entraîne différents régimes de combustion impliquant les gouttes. En revanche, quelques différences sont à noter. Au niveau de l'axe central, la flamme expérimentale est plus proche de la paroi que dans la simulation. A cet endroit, une densité de gouttes plus importante est présente dans l'expérience, potentiellement liée à la méthode d'injection ou à la prédiction numérique des trajectoires de gouttes dans la zone dense du spray. Dans la simulation, aucune goutte n'est injectée dans cette direction, ce qui ne permet pas à la flamme de se propager plus en amont le long de l'axe de la chambre. De plus, la zone de réaction la plus intense se situe plus en aval de l'écoulement dans l'expérience, en périphérie du spray. Dans la simulation, la zone la plus intense est très proche du corps de veine, où des pertes thermiques sont appliquées. La différence de comportement observée est vraisemblablement due à l'incertitude sur les paramètres définissant ces pertes thermiques (température du solide et

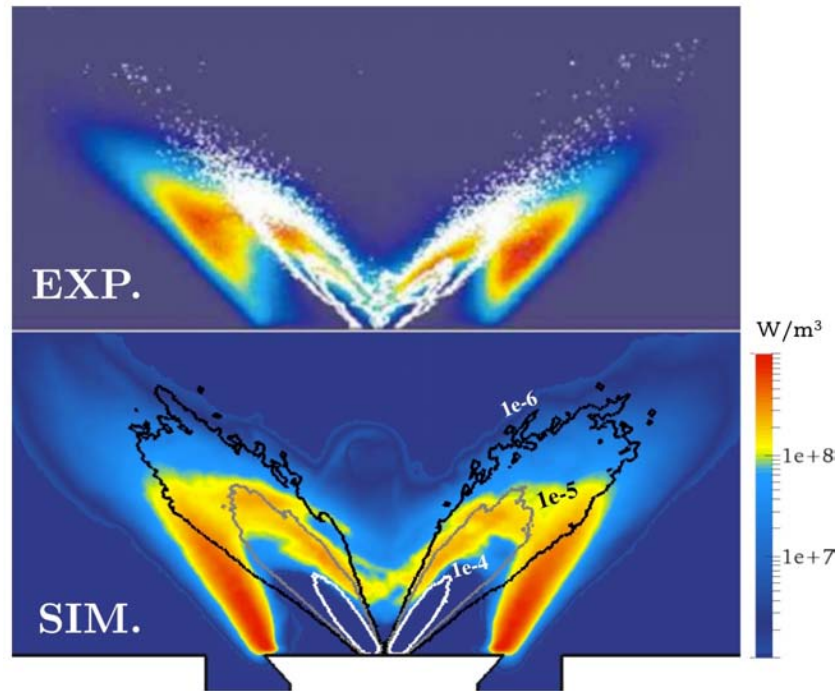


Figure 11.4 : Cas réactif avec spray : expérience (haut) vs. LES-DPS (bas). Haut : image OH-PLIF moyennée (couleurs) et diffusion de Mie des gouttes (blanc) [32]. Les lignes horizontales correspondent aux positions de mesures de vitesses. Bas : Dégagement de chaleur moyen et iso-ligne de fraction volumique de liquide.

résistance thermique). L'absence de mesure pour mieux caractériser ces paramètres n'a pas permis de réduire cette incertitude.

Pour analyser plus en détail cette flamme, la structure moyenne de l'écoulement est illustrée Fig. 11.2. L'injection d'air giratoire génère des zones de recirculation centrales et périphériques très similaires à l'écoulement non réactif. Proche du corps de veine, dans la zone du spray, l'échange de quantité de mouvement lié à la traînée des gouttes génère d'intenses tourbillons en périphérie du spray, qui sont contenus dans la structure en M de la flamme. Ces structures tourbillonnaires sont responsables d'un comportement instationnaire fort, schématisé en Fig. 11.6. Les tourbillons générés par l'injection liquide grossissent par augmentation progressive de leur moment cinétique dûe à la traînée du spray dense, jusqu'à ce que leur taille soit de l'ordre de la moitié de la largeur de la flamme en M. Ils sont ensuite lâchés de manière intermittente en-dehors de la flamme en M, entraînant avec eux, un mélange de gaz brûlés chaud, de carburant évaporé et de gouttes. La fréquence de ce phénomène n'a pas pu être convenablement établie, au vu du temps physique simulé disponible (100 ms), mais son temps caractéristique est de l'ordre de 30 ms. Ce comportement basse fréquence rend la convergence statistique particulièrement longue à obtenir, et explique en partie le manque de symétrie observé sur les différents champs moyens.

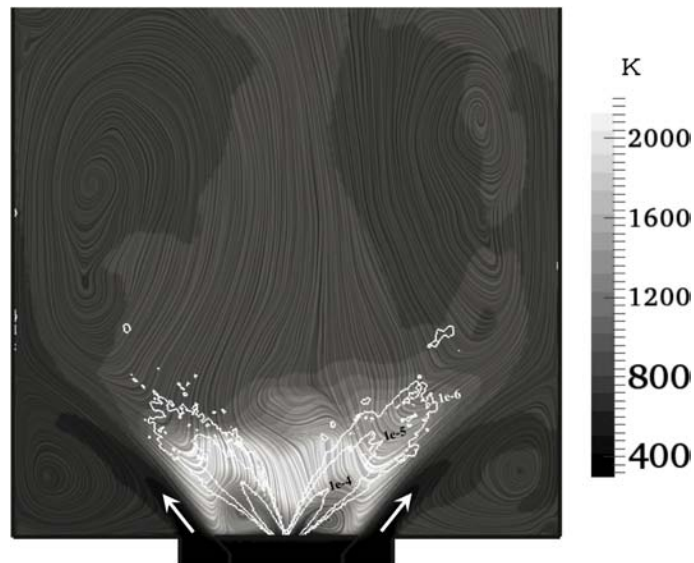


Figure 11.5 : Cas réactif avec spray : Température moyenne et lignes de courant obtenues par LES.

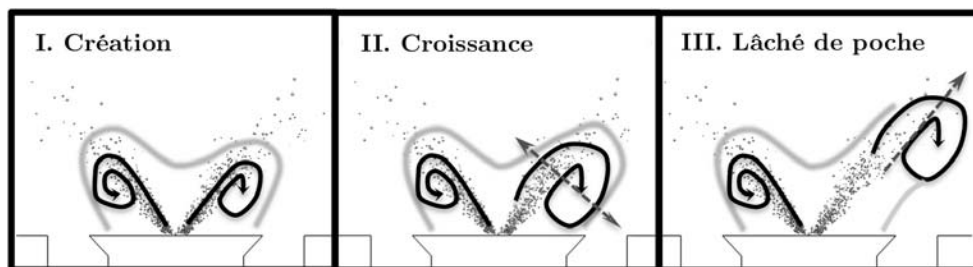


Figure 11.6 : Schéma du comportement instationnaire des tourbillons générés à l'injection par le couplage dynamique entre spray et phase gazeuse.

La température est maximale à la position moyenne de la flamme, et diffuse de part et d'autre de la flamme en M. A l'intérieur du M, l'évaporation du spray est fortement accélérée par la très haute température, entraînant une forte concentration en vapeur de carburant (Fig. 11.7). Les pertes thermiques à la paroi et le pompage d'énergie nécessaire à l'évaporation des gouttes entraînent une diminution locale de la température, avec un minimum situé proche du corps de veine. La flamme en M, attachée le plus souvent au corps de veine, sépare l'air frais à l'extérieur, du carburant gazeux à l'intérieur, tous deux mélangés à des produits chauds de combustion. Il s'agit donc principalement d'une flamme purement non-prémélangée, coïncidant naturellement avec la ligne stoechiométrique (Fig. 11.7).

Une comparaison quantitative des vitesses gazeuses axiales et tangentielles est donnée en Fig. 11.8 à différentes hauteurs dans la chambre. L'écoulement gazeux réactif est reproduit convenablement, notamment en ce qui concerne l'angle d'ouverture du jet, la position et l'intensité des pics

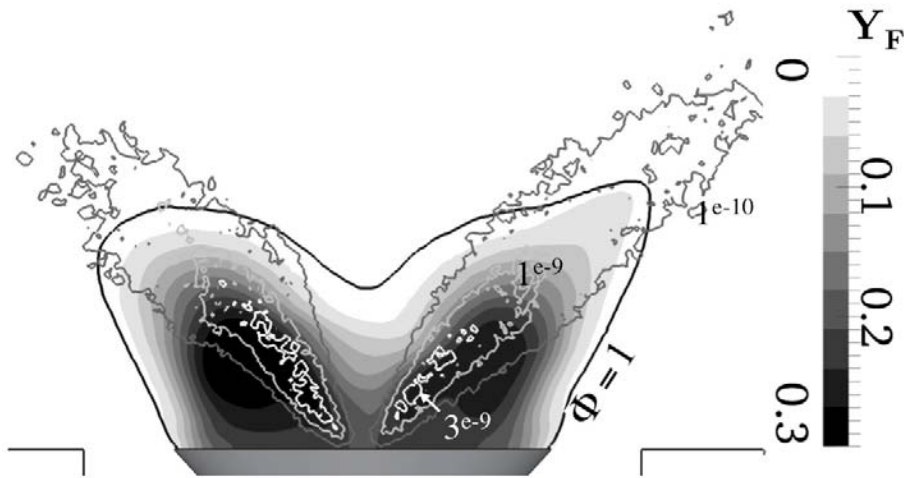


Figure 11.7 : Cas réactif avec spray : Fraction massique de carburant, ligne stoechiométrique (noire $Y_{st} = 0.062$) et iso-lignes de transfert de masse obtenues par LES.

de vitesse. Une mesure expérimentale à l'intérieur du spray n'est malheureusement pas disponible, puisque la précision des mesures LDA n'est pas assurée en présence de gouttes liquides. Les fluctuations de vitesse dans la simulation sont sur-prédites en zone proche du corps de veine, ce qui est probablement lié à la différence de position moyenne de la flamme, déjà mentionnée.

Enfin, les profils moyens de vitesses des gouttes sont comparés en Fig. 11.9 à trois hauteurs différentes. Les mesures de vitesse de gouttes, détaillées en [31], fournissent une moyenne arithmétique sans considération de la taille ou de la masse des gouttes. L'accord entre expérience et simulation est bon au niveau du coeur central du spray, relativement dense en gouttes (zone grisées en Fig. 11.9). En dehors de cette région, des différences significatives sont observées, qui peuvent être liées aux deux raisons suivantes. Premièrement, par rapport à la position moyenne du spray fournie par diffusion de Mie des gouttes (Fig. 11.4), la topologie du spray simulé est légèrement différente : des gouttes sont présentes en des endroits où très peu de gouttes sont observées dans l'expérience, et inversement. Deuxièmement, le comportement inertiel des gouttes, très différent en fonction de la taille, est analysé par classe de diamètre (Fig. 11.9) : les grosses gouttes conservent leur inertie initiale plus longtemps que les petites gouttes, plus susceptibles de suivre l'écoulement. Les trois classes choisies en Fig. 11.9 contribuent de manière très différente à la moyenne arithmétique de la vitesse. De ce fait, une petite erreur sur la distribution de taille du spray injecté impacte directement la moyenne arithmétique, notamment dans les zones faiblement chargées en gouttes. Une telle sensibilité de la vitesse moyenne à la distribution en taille des gouttes, ne permet pas de tirer de conclusions convenables en-dehors du coeur du spray. Des diagnostics plus détaillés, fournissant notamment la distribution locale en taille de gouttes, seraient nécessaires pour interpréter les résultats de simulation.

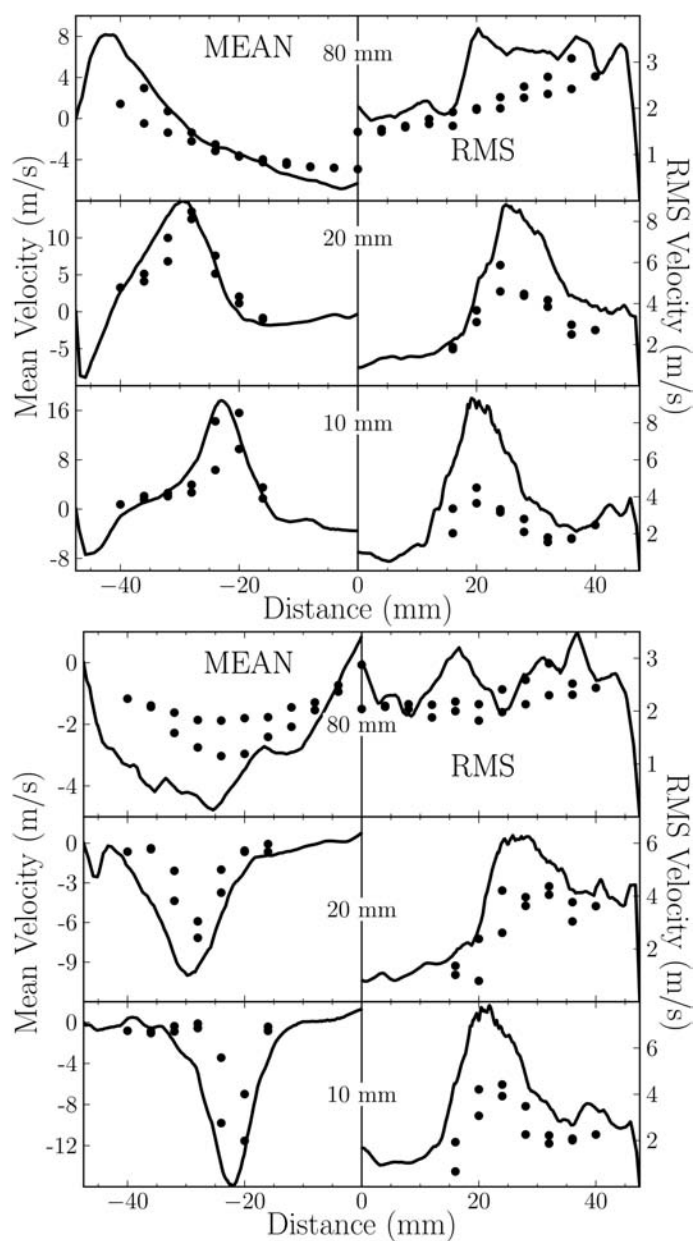


Figure 11.8 : Cas réactif avec spray : LES-DPS (lignes) vs. expérience (symboles) [204]. Profils de vitesse gazeuse moyenne (gauche) et fluctuante (droite) axiale (haut) et tangentielle (bas) pour trois hauteurs différentes dans la chambre (cf. Fig. 11.4).

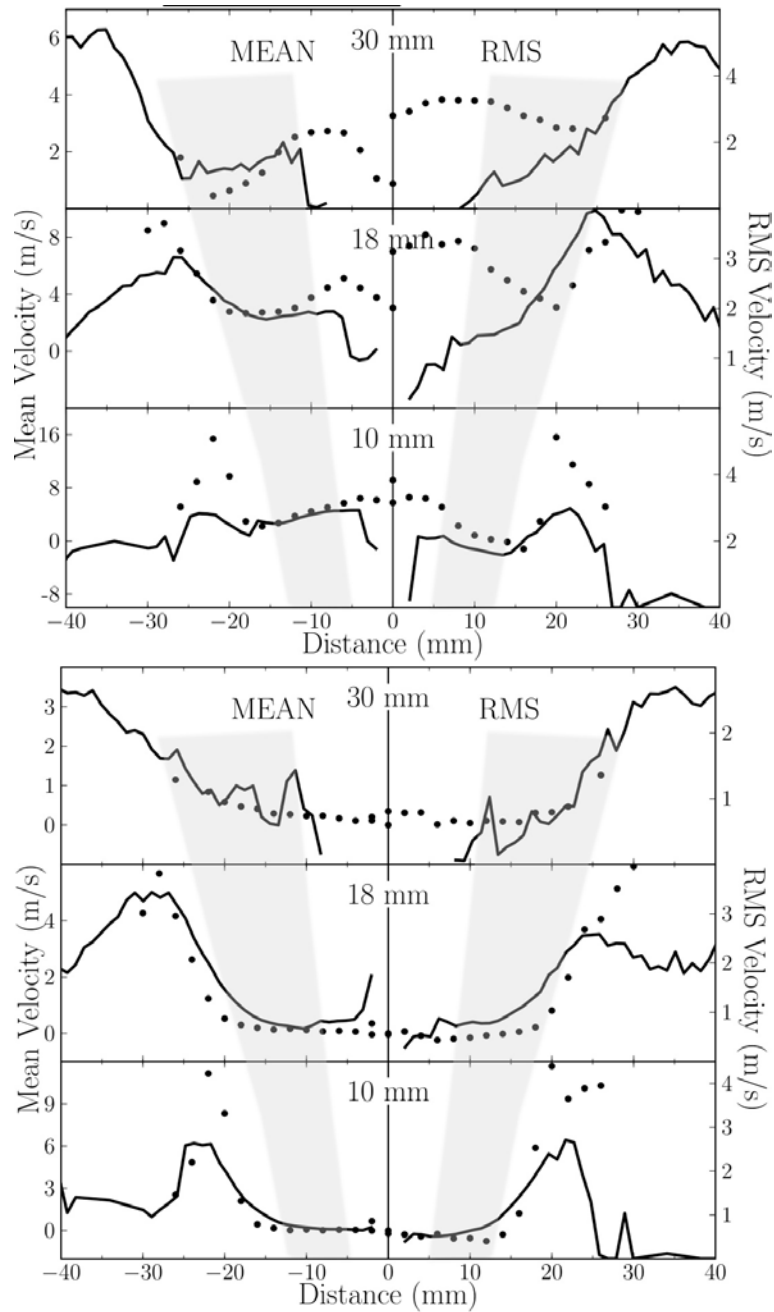


Figure 11.9 : Cas réactif avec spray : LES-DPS (lignes) vs. expérience (symboles) [204]. Profils de vitesse **liquide** moyenne (gauche) et fluctuante (droite) axiale (haut) et tangentielle (bas) pour trois hauteurs différentes dans la chambre (cf. Fig. 11.4). Le coeur du spray est matérialisé par la zone grisée.

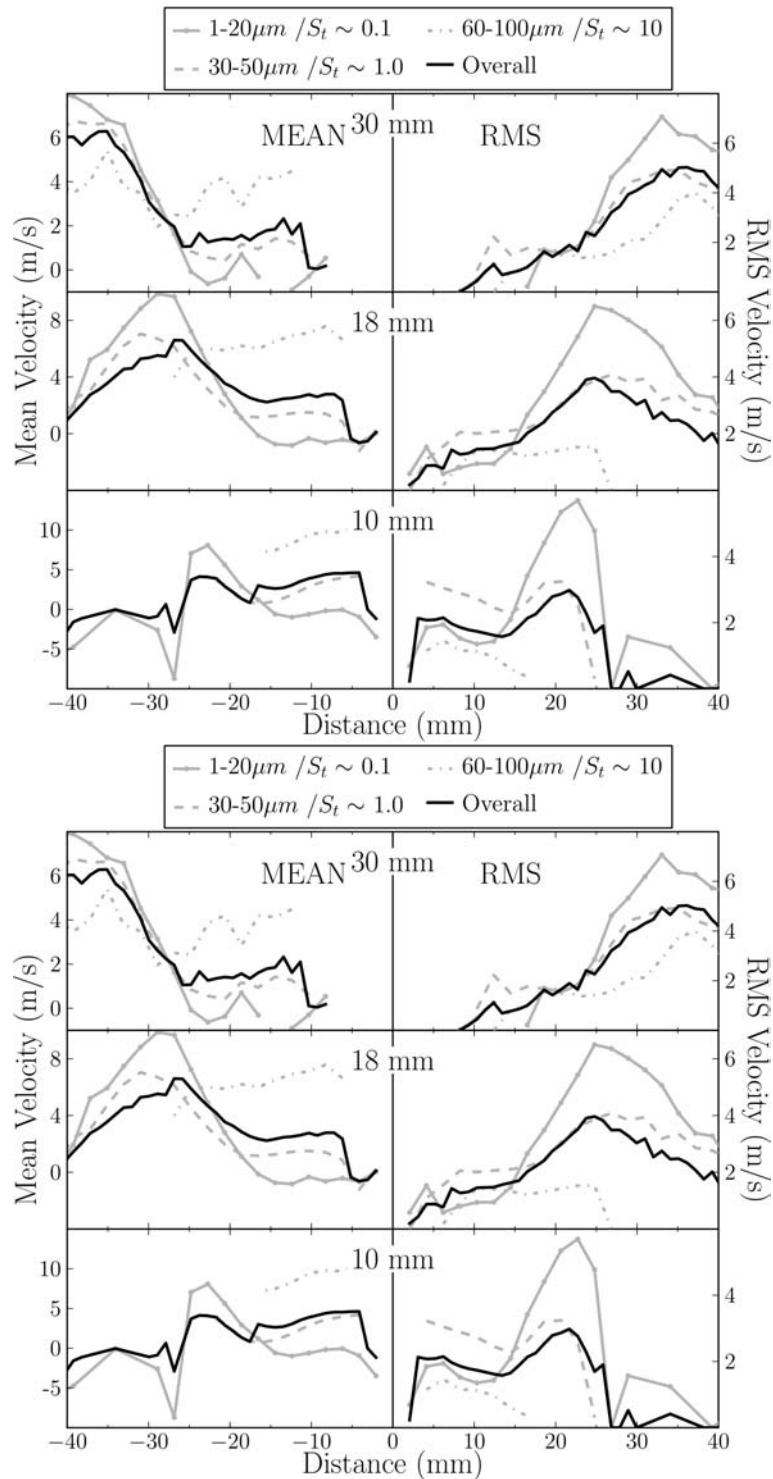


Figure 11.10 : Cas réactif avec spray : profils de vitesse **liquide** moyenne (gauche) et fluctuante (droite) axiale (haut) et tangentielle (bas) pour trois hauteurs différentes dans la chambre (cf. Fig. 11.4), pour trois classes de diamètre de goutte, comparés à la moyenne totale.

11.3 Analyse de la structure de flamme avec le modèle d'évaporation seul

Les champs instantanés de dégagement de chaleur obtenus par LES et expérience (Fig. 11.11) montrent un front de flamme similaire, de forme caractéristique en M, ayant une épaisseur très fine. Quatre régions relativement distinctes du front de flamme peuvent être identifiées. La branche extérieure du M, de forme conique, numérotée I, est une flamme fortement plissée qui se stabilise à une distance fluctuante et non nulle du corps de veine. La partie centrale de la flamme, en forme de V et numérotée II, consiste en un front de flamme très faiblement plissé, se stabilisant au voisinage du point le plus amont de l'IRZ, le long de la ligne stœchiométrique (Fig. 11.7). Ces deux branches (I et II) sont des flammes purement gazeuses, alimentées par la pré-évaporation des gouttes à l'intérieur de la flamme en M. Les deux dernières zones, numérotées III et IV, correspondent à des flammes complexes, où le spray est en interaction directe avec la zone de réaction, et où différents régimes de combustion diphasique peuvent être observés. En III, un front de flamme relativement similaire aux branches I et II brûle du carburant pré-évaporé mais contient également des gouttes dont certaines parviennent à le traverser. Dans la région IV, les gouttes ayant survécu à la région III, entrent dans une zone de gaz frais, entraînant l'apparition d'une réaction très locale autour d'elles. Dans la suite, ces quatre régions sont analysées en détail.

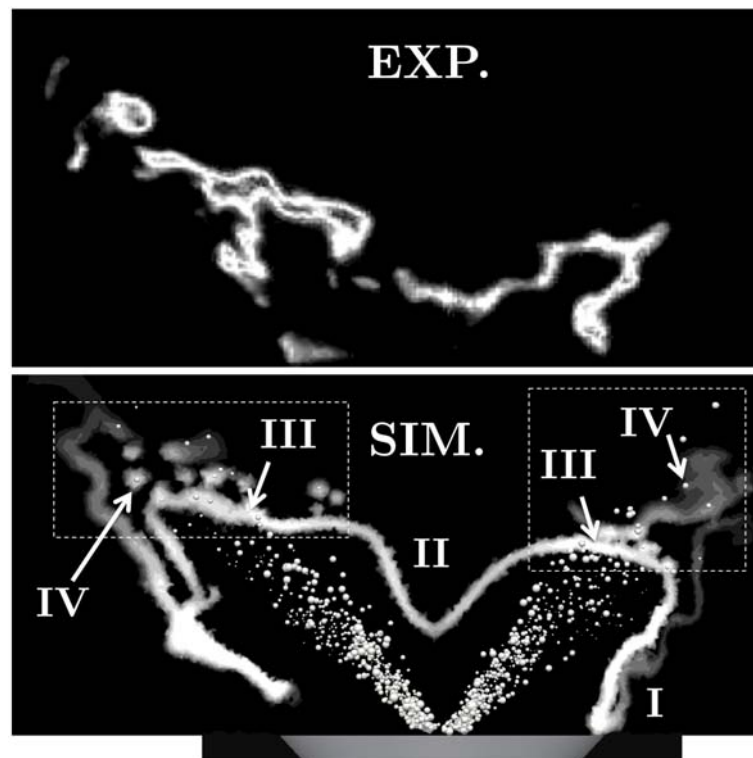


Figure 11.11 : Cas réactif avec spray. Haut : image instantanée de OH-PLIF, tirée de l'expérience [32]. Bas : champs instantanés de dégagement de chaleur (grey levels) et des gouttes (white) obtenus par LES.

11.3.1 Flammes purement gazeuses : branches I et II

Un indice de Takeno [201] est tout d'abord utilisé pour analyser la structure de flamme. Il est défini par :

$$I_{flame} = \frac{\nabla Y_F \nabla Y_{Ox.}}{\|\nabla Y_F \nabla Y_{Ox.}\|} H_R \quad (11.1)$$

Un indice I_{flame} positif dans la flamme indique une combustion prémélangée tandis qu'un indice négatif indique un combustion non-prémélangée. Il est important de noter que la validité d'un tel indice n'est assurée que dans les zones purement gazeuses, la présence de gouttes évaporantes pouvant modifier les gradients d'espèces. Un champ d'indice de Takeno, présenté en Fig. 11.12, montre clairement une structure de flamme non- prémélangée. Un zone de flamme prémélangée, moins puissante, est aussi visible coté air de la flamme non-prémélangée. Ce front est dû à la vapeur de fuel présente à l'extérieur de la flamme, issue des gouttes l'ayant traversé, mais qui reste en faible concentration.

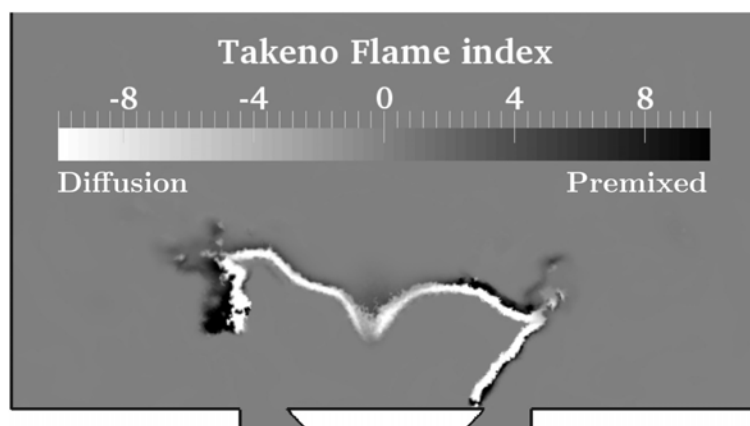


Figure 11.12 : Indice de Takeno (Eq. 11.1) évalué sur un champ instantané.

En accord avec la théorie des flammes de diffusion laminaire [162] et par analogie avec l'écoulement à contre courant, le taux de dissipation scalaire évalué à la stoechiométrie pour une flamme non-prémélangée stabilisée dans un écoulement permet d'évaluer l'étirement local a [162] (Eq. 10.9).

Dans le contexte LES, la dissipation scalaire sur la ligne stoechiométrique χ_{st}^{LES} peut être considérée comme une bonne estimation du taux d'étirement résolu effectivement subi par l'élément de flamme :

$$\hat{a}^{LES} = \pi \hat{\chi}_{st}^{LES} \exp[2(\text{erf}^{-1}(1 - 2Z_{st}))^2] \quad (11.2)$$

La PDF de \hat{a}^{LES} , évaluée sur l'iso-surface stoechiométrique d'un champ instantané, est montrée en Fig. 11.13. Des taux d'étirement allant jusqu'à $O(100s^{-1})$ sont vus par la flamme de diffusion, avec un taux d'étirement moyen de $O(10s^{-1})$. Cette plage d'étirement correspond à des taux

d'étirement modérés comparés à la limite d'extinction, mesurée à environ 600 s^{-1} dans des conditions similaires par Seiser *et al.* [180]. Dans cette plage d'étirement, la chimie réduite se comporte de manière relativement convenable par rapport à la chimie détaillée (Fig. 10.6), avec une légère sur-prédiction du taux de dégagement de chaleur en chimie réduite.

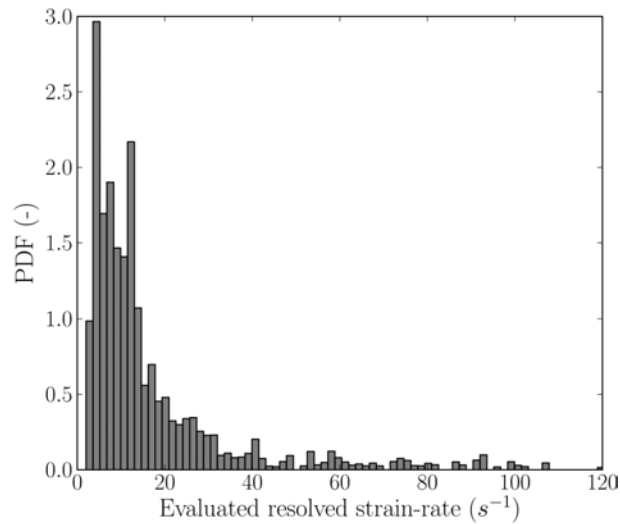


Figure 11.13 : PDF de l'étirement résolu vu par la flamme, évalué à partir du taux de dissipation scalaire à la stoechiométrie dans la LES (Eq. 11.2).

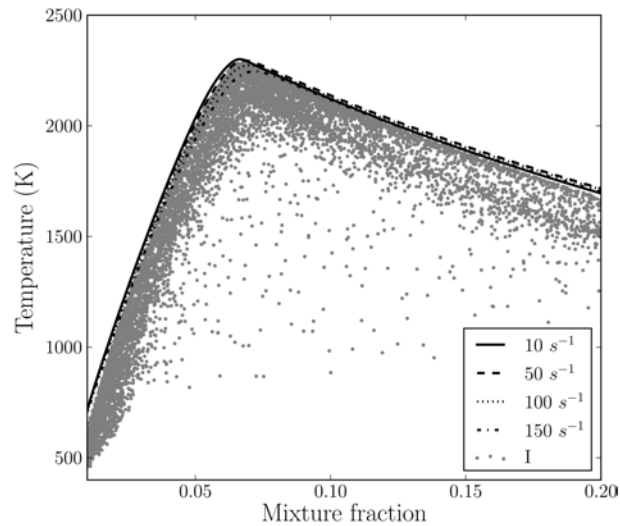


Figure 11.14 : Température et fraction de mélange, obtenues pour la branche I (Fig. 11.11) dans la LES.

Les structures de flammes instantanées des branches I et II sont ensuite analysées dans l'espace de fraction de mélange Z (Figs. 11.14 et 11.15) et comparées à des flammes de diffusion étirées à différents niveaux d'étirement, calculées avec la même chimie réduite. En Fig. 11.15, les points T-Z de la branche II sont concentrés le long du profil de flamme laminaire faiblement étirée, ce qui est

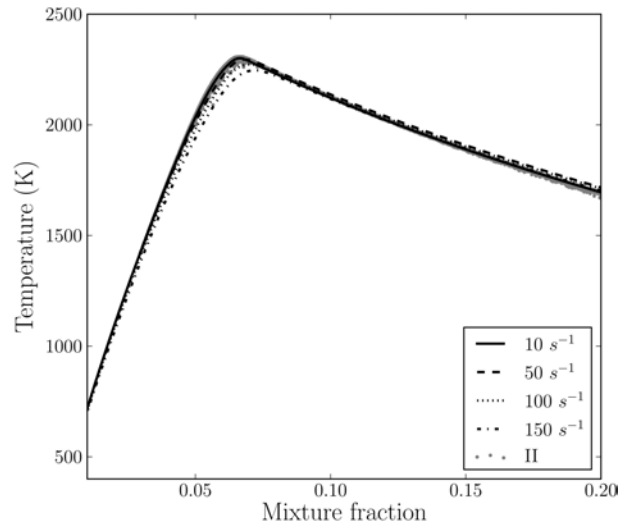


Figure 11.15 : Température et fraction de mélange, obtenues pour la branche II (Fig. 11.11) dans la LES.

cohérent avec le fait que la branche II subit un étirement et une intensité de turbulence très faibles. La stabilisation de cette flamme est assurée par l'IRZ, qui maintient le front de flamme proche de la zone d'injection riche (Fig. 11.2). La flamme suit naturellement la ligne stoechiométrique entre l'oxygène recirculant par le haut et la vapeur de carburant préchauffée par le bas.

En comparaison, la dispersion des points T-Z de la branche I est beaucoup plus forte (Fig 11.14). Cette dispersion est la conséquence de l'étirement intense et fluctuant subi localement par le front de flamme, dans cette zone turbulente de fort cisaillement. De plus, la branche I contient aussi un certain nombre de points T-Z de type prémélangé (n'ayant pas encore atteint leur état d'équilibre). La présence de ces points est liée au mécanisme de stabilisation et de détachement intermittent de la flamme proche de la paroi. Ce mécanisme met en jeu plusieurs phénomènes, schématisés en Fig. 11.16.

Premièrement, les pertes thermiques à la paroi du corps de veine ne permettent pas à la flamme de venir très près de la paroi. Les pertes thermiques totales sur le mur d'environ 100 W, bien qu'inférieures à la puissance de la flamme de 5.4 kW, suffisent à annihiler toute réaction proche de la paroi, du fait de la faible température (800 K). Le profil radial de flux thermique le long de la paroi, obtenu après moyenne azimutale, montre deux pics d'intensité de flux équivalentes, logiquement corrélées à la température du gaz à la paroi (Fig. 11.17). Le pic central est lié à la recirculation de produits de réaction chauds le long de l'axe, visible en Fig. 11.2, qui maintiennent une température d'environ 900 K en proche paroi. Le pic extérieur, proche du bord du corps de veine, est lié à la présence du pied de la flamme, qui maintient une haute température.

Lorsque ces pertes thermiques sont combinées à l'arrivée intermittente de tourbillons issus de la veine d'injection giratoire, l'écoulement est parfois suffisamment puissant pour entraîner le détachement du pied de flamme du corps de veine. Ce mécanisme entraîne une fuite de vapeur

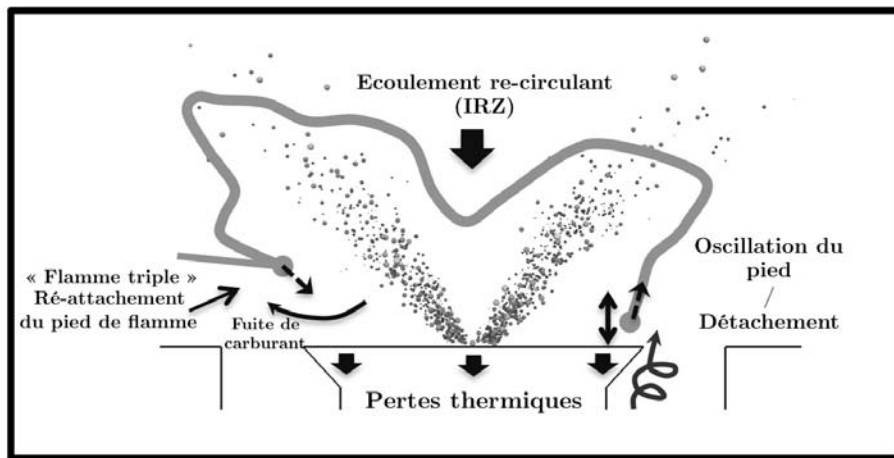


Figure 11.16 : Schéma du mécanisme de stabilisation de flamme des branches I et II (Fig. 11.11).

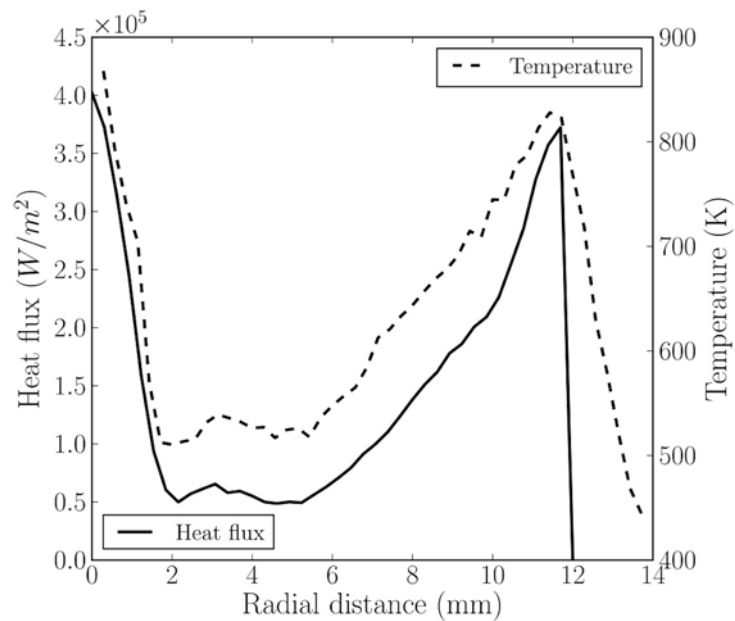


Figure 11.17 : Profils radiaux moyens de flux thermiques et de température à la paroi du corps de veine (Fig. 11.11).

de carburant de l'intérieur de la flamme en M, vers l'extérieur, permettant un mélange avec l'air environnant. Ce mélange crée une petite flamme de prémélange, à l'extérieur de la flamme en M, qui s'allume au pied de flamme, visible en Fig. 11.11. Le pied de flamme est alors très similaire à une flamme triple (illustré précédemment en Fig. 2.9), capable de se propager. Au bout d'un certain temps, le pied de flamme réussit à se ré-attacher à la paroi. Comme la flamme en M est

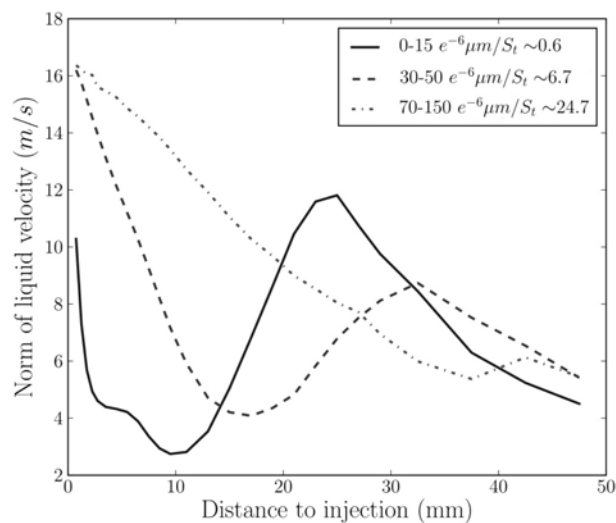


Figure 11.18 : Evolution de la vitesse moyenne des gouttes le long l'axe central de la chambre. Moyennes obtenues dans des plans successifs, perpendiculaires à l'axe, pour trois classes de diamètre de goutte.

axi-symétrique, une partie du pied de flamme peut être attachée quand une autre est détachée, ce qui maintient un attachement global de la branche I sur la paroi du corps de veine.

11.3.2 Combustion du spray : branches III et IV

11.3.2.1 Impact de la polydispersion du spray

En fonction de sa taille, la goutte présente un comportement spécifique en terme d'évaporation et de trajectoire. Trois classes de diamètres de gouttes sont définies afin d'isoler les comportements particuliers liés à la taille des gouttes. Par simplicité de langage, les gouttes appartenant aux classes correspondant à $d_p < 15 \mu m$, $d_p \sim SMD \sim 40 \mu m$, et $d_p > 70 \mu m$ seront respectivement appelées "petites", "moyennes" et "grosses" gouttes.

La polydispersion a tout d'abord un impact important sur la structure globale de la dispersion du spray. Pour analyser le comportement dynamique, l'évolution axiale de la vitesse des gouttes et de l'angle de leur trajectoire avec l'axe de la chambre, obtenue par moyenne dans des plans perpendiculaire successifs, est montrée en Figs. 11.18 et 11.19 respectivement, pour les trois classes de gouttes. Pour chaque classe, le nombre de Stokes S_t (Eq. 4.21) défini pour une taille de goutte moyenne de la classe, est utilisé. Le temps fluide associé τ_f est évalué à partir des caractéristiques moyennes de la turbulence de l'écoulement, en utilisant une évaluation de l'échelle de Kolmogorov η_k et du taux de dissipation ϵ dans cette zone :

$$\tau_f \sim \sqrt[3]{\eta_k^2 / \epsilon} \quad (11.3)$$

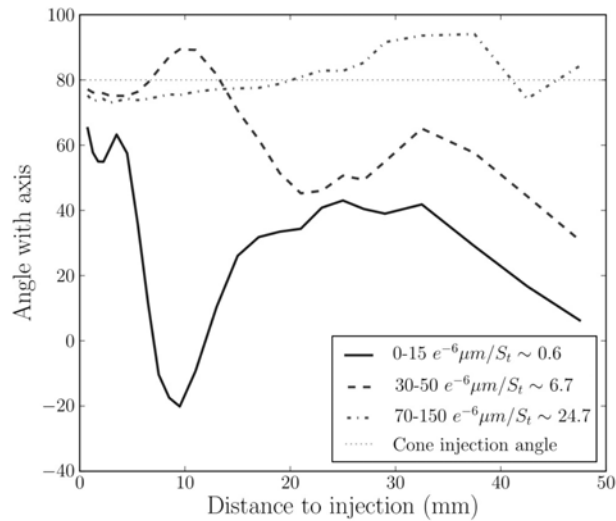


Figure 11.19 : Evolution de l'angle axial moyen de la trajectoire, le long l'axe central de la chambre. Moyennes obtenues dans des plans successifs, perpendiculaires à l'axe, pour trois classes de diamètre de goutte.

La Figure 11.18 montre que toutes les gouttes ralentissent puisqu'elles sont injectées avec une vitesse plus grande que la vitesse de l'écoulement à l'injection. Après cette phase initiale courte, les grosses gouttes sont pratiquement insensibles à la variation de vitesse gazeuse, et suivent une trajectoire quasi-rectiligne depuis leur point d'injection (Fig. 11.19). Au contraire, les petites gouttes décélèrent immédiatement et sont entraînées ensuite par l'écoulement. La forte décélération entraîne une accumulation de petites gouttes en zone proche de l'injecteur. Cette ségrégation spatiale en taille contribue à stratifier la richesse locale, très élevée et homogène à l'injection, faible et hétérogène en aval.

Dans un deuxième temps, la polydispersion du spray joue sur l'intensité locale de l'évaporation. Le transfert massique moyen de carburant issu de l'évaporation (Fig. 11.20) est faible à l'injection puisque les gouttes injectées sont froides. Le taux de transfert augmente rapidement du fait du préchauffage rapide des petites gouttes (Fig. 11.21), qui atteignent rapidement une température proche de la température humide (d'environ 360 K dans ces conditions particulières). En aval, l'expansion radiale du spray entraîne une diminution rapide de la concentration du spray, générant une baisse du taux de transfert massique local, compensée en partie par l'augmentation de la contribution individuelle des gouttes de plus grand diamètre, progressivement chauffées. A l'extérieur de la flamme en M, le taux de transfert de masse devient très faible, car seul un résidu faible de carburant liquide atteint cette zone. De plus, le taux d'évaporation est annihilé par une forte dilution avec les gaz frais. Par conséquent, la température liquide diminue au-delà la flamme en M (dans cette simulation avec modèle d'évaporation seul). Enfin, on observe bien en Fig. 11.21 que le temps de réponse de la température liquide à la variation de température gazeuse, augmente avec la taille de la goutte. Les plus petites gouttes sont préchauffées plus rapidement dans la flamme et plus rapidement refroidies ensuite. L'essentiel de l'évaporation se fait à l'intérieur de la flamme

en M, hors de la zone de réaction. Le carburant pré-évaporé dans cette zone assure l'alimentation des flammes purement gazeuses I et II.

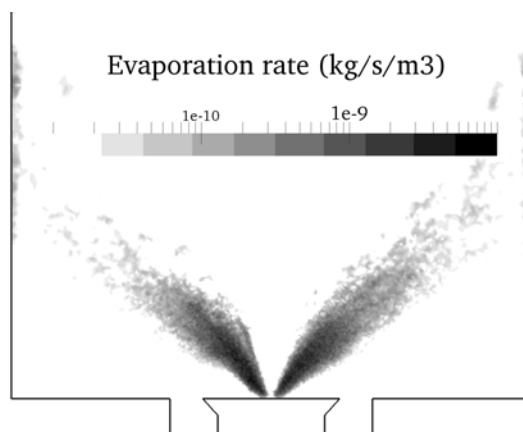


Figure 11.20 : Taux d'évaporation moyen.

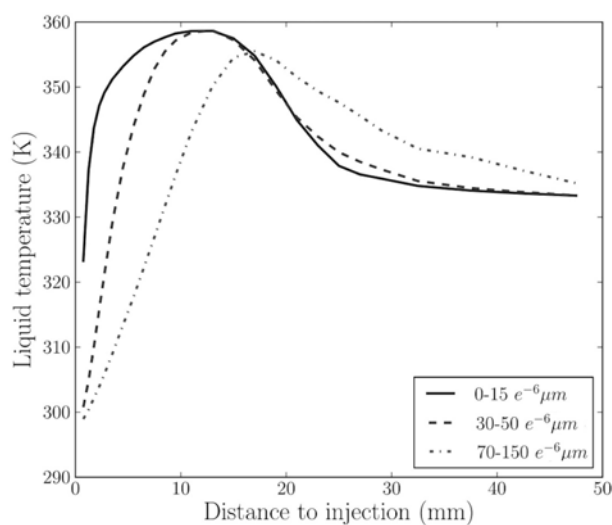


Figure 11.21 : Evolution de la température liquide, le long l'axe central de la chambre. Moyennes obtenues dans des plans successifs, perpendiculaires à l'axe, pour trois classes de diamètres de gouttes.

Enfin, une analyse de l'évolution de la distribution en nombre et en volume de la taille des gouttes le long de l'axe est proposé en Fig. 11.22. La population se dépeuple au début (y de 0 à 15 mm) au niveau des petits diamètres, du fait de leur évaporation rapide et de leur taille. Lorsque la flamme est atteinte par le spray ($y \sim 15$ mm), la distribution se déplace rapidement vers les plus petits diamètres du fait de l'évaporation. La quantité de gouttes diminue très fortement en aval. Un certain nombre de gouttes subsiste assez loin en aval de la chambre.

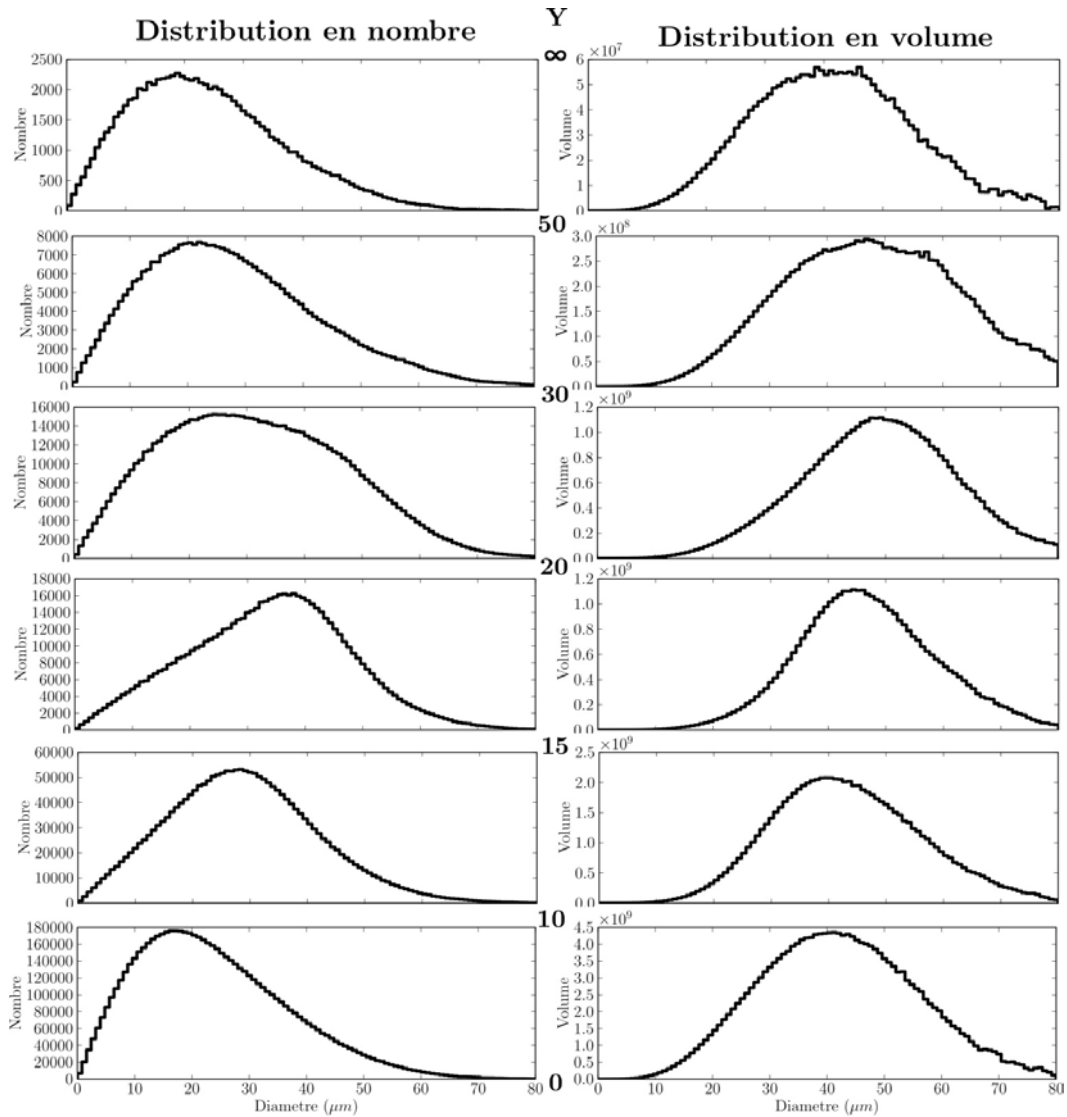


Figure 11.22 : Evolution de distribution en nombre et en volume de la taille des gouttes, pour différentes tranches comprise entre la position axiale y_- et y_+ , dans la chambre.

11.3.2.2 Régimes de combustion diphasique

La présence simultanée de l'évaporation des gouttes et des réactions chimiques dans les zones III et IV, entraîne la formation d'une structure de flamme complexe, impliquant directement la phase liquide.

La Fig. 11.24 montre que la structure de flamme de la zone III est similaire à celle observée en zone I et II, présentant un comportement non-prémélangé très proche de la structure de flamme laminaire non-premélangée étirée. De fait, cette flamme est principalement alimentée par le carbu-

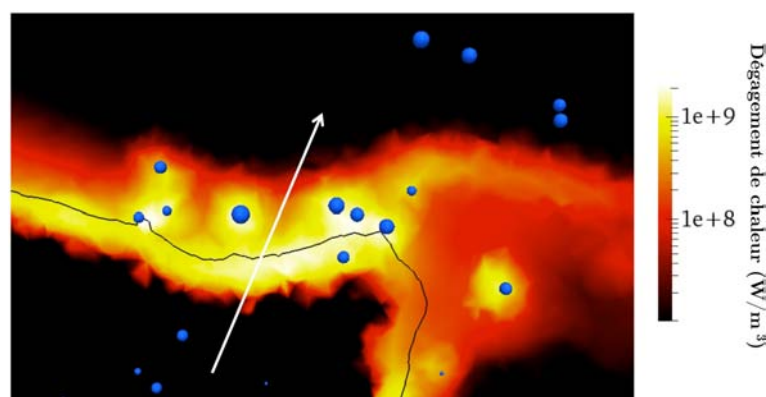


Figure 11.23 : Agrandissement de la zone III et IV, dégagement de chaleur pour le modèle standard AS.

rant pré-évaporé, transporté avec le spray et générant une flamme de diffusion relativement stable. Cependant, au contraire des branches I et II, des gouttes entrent dans cette zone de réaction, où la haute température gazeuse entraîne une augmentation rapide de leur température (Fig. 11.21) et de leur taux évaporation. La vapeur de carburant est ainsi directement produite dans la zone de réaction et modifie le taux de réaction local, comme illustré en Fig. 11.23. Ainsi, le front de flamme présente des variations locales de son taux de dégagement de chaleur, liées aux passages intermittents des gouttes au travers du front. Dans cette zone, soit l'intégralité du carburant localement produit est instantanément brûlée, et le dégagement de chaleur augmente localement, soit une partie de ce carburant seulement est brûlée, ce qui entraîne une accumulation de vapeur de carburant autour de la goutte. L'augmentation de la richesse autour des gouttes qui résulte de cette accumulation modifie légèrement la position de la ligne stoechiométrique et contribue à plisser davantage la flamme (Fig. 11.23). Ce comportement a déjà été observé dans une expérience [142].

La branche III est régulièrement brisée par le lâcher intermittent, déjà évoqué, de grands tourbillons générés à l'injection (Fig. 11.6), entraînant l'émission simultanée de poches de vapeur de carburant mélangée à des produits chauds de combustion et à des gouttes. Ces poches finissent de brûler en aval, encerclées par une flamme de diffusion, de manière très similaire au régime de combustion externe de groupe [43]. Ce comportement semble être observé sur les images expérimentales instantanées de OH-PLIF (Fig. 11.11), bien que la présence de gouttes ne soit pas parfaitement établie dans l'expérience. Une mesure simultanée de la position des gouttes et de OH-PLIF permettrait de répondre à cette question avec plus de certitude.

Contrairement à la zone III, les points T-Z de la zone IV sont concentrés du côté pauvre et n'atteignent pas la température maximum de la branche III (Fig. 11.24), faisant penser à une flamme prémélangée pauvre. Le dégagement de chaleur dans cette zone est faible par rapport à la branche III. En fait, dans cette zone, une forte dilution du mélange produits chaud + gouttes avec l'air frais entraîne une diminution rapide de la température gazeuse et de la richesse. Les gouttes

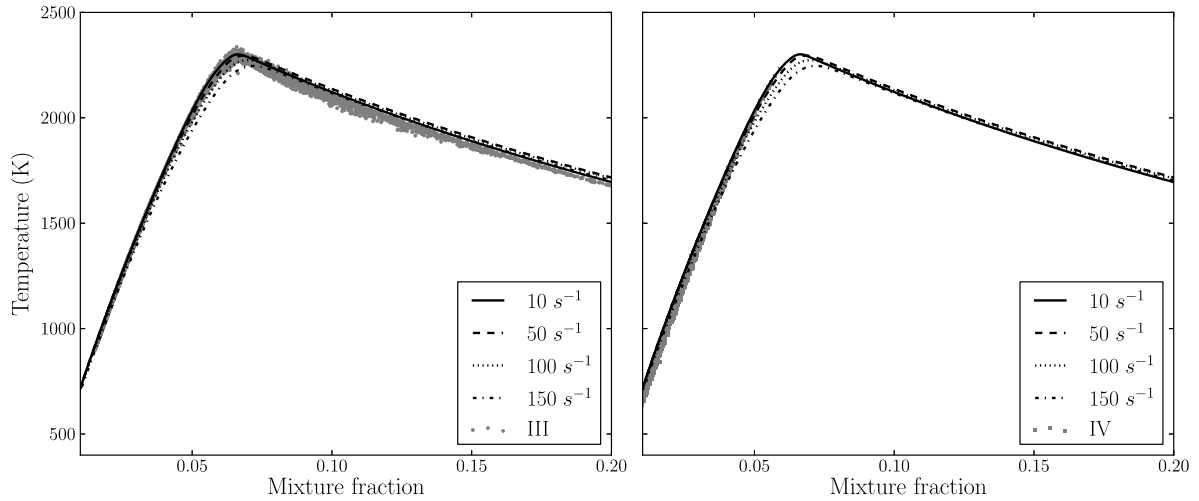


Figure 11.24 : Température et fraction de mélange, obtenues pour les branches III (droite) et IV (gauche) (Fig. 11.11) dans la LES.

qui ont réussi à traverser la branche III, continuent de s'évaporer. Juste en aval de la flamme en M, tant que la température reste suffisamment élevée, une combustion a lieu très localement autour d'une ou de quelques gouttes proches. Cette structure locale est aussi observable sur les images instantanées de OH-PLIF (Fig. 11.11), où les toutes petites poches de signal correspondent probablement à la combustion de gouttes. Dans la simulation, comme déjà précédemment évoqué, le maillage n'est pas suffisamment fin pour résoudre un éventuel front de flamme local pouvant s'établir autour d'une goutte individuelle. De ce fait, la combustion a lieu dans un volume autour de la goutte, comme déjà évoqué en Sect. 8.2.1 : les gouttes génèrent des pics de vapeur de carburant à leur position, qui se mélange avec l'air disponible et brûle en mode prémélangé.

Plus en aval, la température environnante vue par la goutte diminue rapidement du fait de la dilution avec les gaz frais (Fig. 11.11). Les taux de réaction diminuent jusqu'à devenir trop faibles pour maintenir une température élevée. En conséquence, la température liquide diminue rapidement (Fig. 11.21), entraînant une baisse significative du taux d'évaporation et de la richesse. Finalement, la combustion s'arrête et une partie de la vapeur de fuel évaporée reste imbrulée. La sous-résolution du maillage peut entraîner une erreur importante : même dans un milieu froid, la combustion en goutte isolée peut se maintenir grâce à une flamme de diffusion de la taille de la goutte. En revanche, l'apparition d'un régime de combustion de goutte isolée n'est pas avérée dans cette zone. Dans la suite, trois critères sont développés pour évaluer l'occurrence de ce régime particulier de combustion.

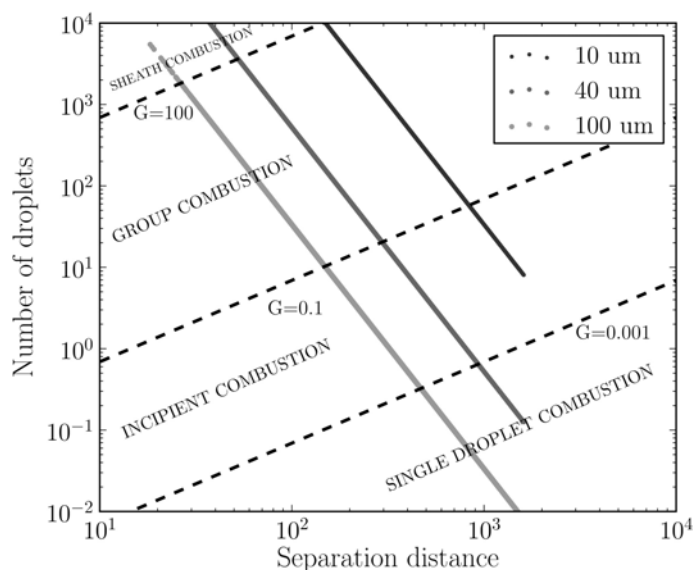


Figure 11.25 : Diagramme de combustion de groupe : évaluation des états obtenus dans la simulation, pour trois diamètres différents.

11.3.2.3 Critère d'apparition du régime de combustion en goutte isolée

Une approche classique pour étudier les régimes de combustion de spray de manière macroscopique est de regarder la valeur du nombre de groupe G , évoqué en Sect. 2.3.3. Le nombre de groupe peut être défini dans le cas présent de la manière suivante [5] :

$$G \sim \alpha_l \left(\frac{d_{nuage}}{d_p} \right)^2 \quad (11.4)$$

avec α_l la fraction volumique liquide locale, d_{nuage} le diamètre d'un nuage de gouttes typique et d_p un diamètre moyen dans ce nuage. Le paramètre d_{nuage} choisi ici correspond à l'épaisseur moyenne de la nappe de spray du cône creux, d'environ 1 cm. Une évaluation de G pour trois tailles de gouttes est disposée dans le diagramme de combustion de goutte (Fig. 11.25), qui classe les régimes de combustion de gouttes en fonction de l'espacement moyen intergoutte et de la valeur du nombre G (Sect. 2.3.3). Dans le cas présent, selon cette analyse, une combustion de groupe est possible pour les trois tailles de gouttes. En revanche, la combustion de goutte isolée n'est possible que pour des gouttes dont le diamètre est supérieur à $\sim 30 \mu m$.

Cette première analyse ne prend pas en compte les conditions gazeuses locales du spray, dont l'impact est étudié ci dessous.

Selon les théories de percolation [114, 208], l'apparition d'un mode de combustion de goutte isolée ne peut être envisagée que si la distance inter-goutte S est suffisante pour contenir une flamme sphérique autour d'une goutte (cf. Sect. 8.2.3). Les valeurs de S et du diamètre de flamme d_f sont obtenues par les équations 8.9 et 8.22 respectivement, en considérant la goutte à sa température

d'ébullition pour les conditions thermodynamiques locales. Lorsque $S/d_f \lesssim 1$, la goutte ne peut pas brûler en combustion isolée. Le rapport S/d_f obtenu pour la configuration étudiée est présenté en Fig. 11.26. Dans la flamme en M, la combustion de goutte isolée ne peut pas être obtenue pour deux raisons : le spray est très dense (S petit) et la fraction d'oxygène est nulle (d_f infini). La transition $S/d_f = 1$ se fait juste en aval du front de flamme, où la distance inter-gouttes augmente et où les gouttes se mélangent avec l'air. En dehors de la flamme en M, une combustion de goutte isolée peut donc être obtenue selon ce critère. Il reste encore à déterminer si la goutte a pu s'allumer et rester allumée jusqu'à son évaporation complète.

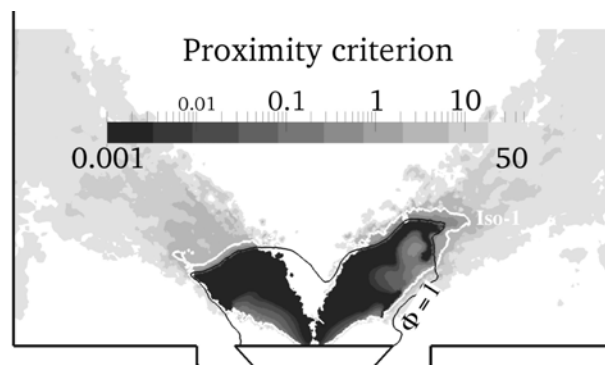


Figure 11.26 : Critère de proximité comparant l'espacement inter-gouttes S au rayon de flamme d_f . La ligne blanche correspond à l'iso-contour $S/d_f = 1$.

On utilise les résultats de Huang *et al.* [100] évoqués en Sect. 2.4.2.3.6 pour évaluer l'apparition de régime de combustion de gouttes isolées. A partir des Damköhler de transition entre les trois différents régimes d'évolution de goutte (évaporation pure, mode sillage et enveloppe), Huang *et al.* proposent un indice de combustion de groupe (IGC) qui prend la valeur 0, 1 ou 2 pour l'évaporation pure, le mode sillage et le mode enveloppe, respectivement. L'évaluation de cet IGC peut également être fait *a posteriori* à partir des champs instantanés obtenus dans la simulation. Les résultats obtenus, pour la configuration étudiée, à partir d'un champ instantané et pour deux diamètres de gouttes particuliers (SMD ($40 \mu m$) et $100 \mu m$, qui correspond au diamètre des gouttes suffisamment grosses pour survivre dans la zone post-flamme) sont montrés en Fig. 11.27. Les gouttes sont considérées à leur température humide évaluée localement en tout point. On observe que le mode "sillage" est très rare dans cette configuration particulière. Ce résultat est cohérent avec le fait que la vitesse relative est généralement faible dans le cas présent. A l'intérieur de la flamme en M, le taux d'oxygène est trop faible pour permettre l'auto-allumage des gouttes, sauf proche de la zone de détachement du pied de flamme, où un mélange avec l'air frais est possible et où la température reste élevée. Les grosses gouttes pourraient être allumées en bordure du cône creux, proche de l'injection. En revanche, comme évalué par le critère de proximité précédent (Fig. 11.26), le spray est trop dense dans cette région pour permettre au mode "enveloppe" d'apparaître. Enfin, les gouttes peuvent s'allumer dans le front de flamme, où les conditions sont optimales. En aval de la flamme en M, les conditions locales sont suffisantes pour activer et maintenir la

combustion de goutte isolée uniquement pour les grosses gouttes. Etant donné le fait que certaines gouttes présentes dans cette zone ont encore une taille significative (Fig. 11.22), ce résultat est particulièrement pertinent.

Ces critères combinés permettent de conclure qu'une combustion de goutte isolée a certainement lieu dans la zone IV (Fig. 11.11). Dans la simulation présentée ici, les gouttes s'évaporent selon le modèle *AS*, qui ne considère jamais le cas de la combustion de goutte isolée, au contraire du modèle *MuStARD*, développé au chapitre 8. Dans le chapitre suivant, le modèle *MuStARD* est appliqué à la configuration de cambridge et les résultats sont comparés à la simulation standard *AS* du présent chapitre.

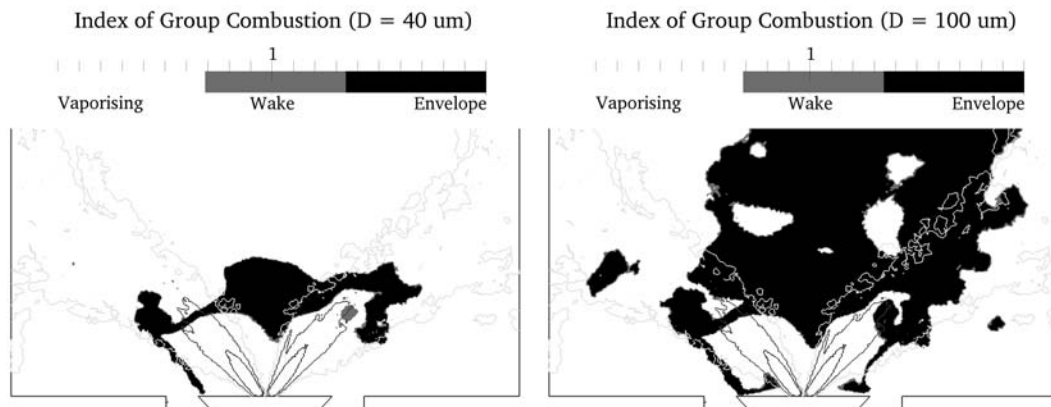


Figure 11.27 : *Indice de combustion de groupe (IGC [100]) pour deux diamètres différents (40 μm and 100 μm). Trois modes sont possibles : évaporation pure, flamme sillage ou flamme enveloppe. La position du spray est illustrée par les iso-contours de fraction volumique de liquide.*

Chapitre 12

Simulation LES du brûleur Cambridge avec le modèle *MuStARD*

Sommaire

12.1 Champs moyens de la phase gazeuse	231
12.2 Champs moyens de la phase liquide	235
12.3 Analyse de la structure de flamme instantanée	239
12.4 Conclusions du chapitre	243

La simulation de l'expérience décrite en Chap. 10 est réalisée à nouveau en utilisant le modèle *MuStARD*, développé au Chap. 8. Dans ce chapitre, le comportement obtenu avec le modèle *MuStARD* est comparé au comportement obtenu dans la simulation *AS*, avec modèle d'évaporation seul.

12.1 Champs moyens de la phase gazeuse

Tout d'abord, les champs moyens de la phase gazeuse issus des simulations *AS* et *MuStARD* sont comparés. Après une phase transitoire de stabilisation, les calculs ont été moyennés sur environ 100 *ms* de temps physique. Ce temps de moyenne est suffisant pour obtenir une bonne convergence de l'écoulement et des grandeurs thermodynamiques, sauf dans la zone directement en aval des lâchers de tourbillons (Fig. 11.6), pour laquelle il aurait fallu moyenner sur un plus long temps physique.

L'activation du modèle *MuStARD* ne modifie pas fondamentalement la stabilisation en M et la structure de la flamme, ni la forme de l'écoulement. L'écoulement moyen présente les mêmes caractéristiques dans les deux calculs (Fig. 12.1) : angle de jet, zone de recirculation et intensité de l'écoulement sont similaires. Les champs de température moyenne (Fig. 12.2) sont également assez

similaires, avec une zone chaude intérieure à la flamme en M, refroidie par l'évaporation du spray, une température maximale dans la zone de réaction et une dilution intense avec les gaz frais, en aval de la flamme.

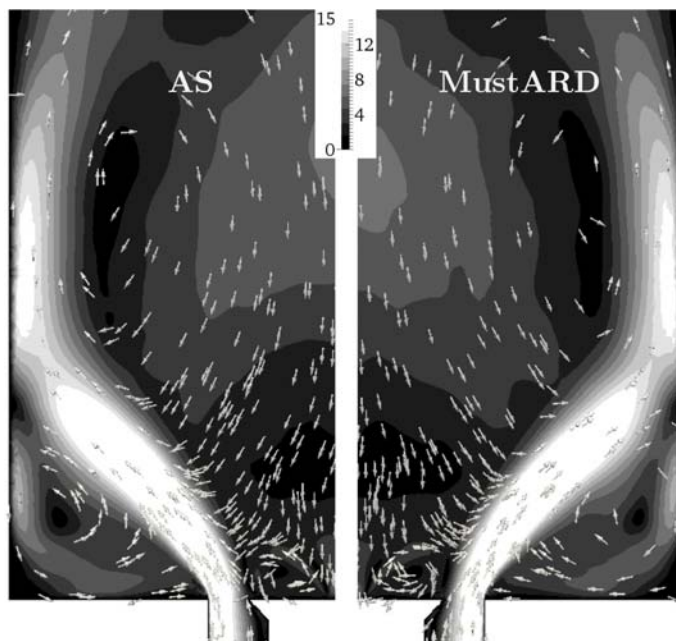


Figure 12.1 : Comparaison AS/ MuStARD des champs de vitesse gazeuse moyenne obtenue dans le plan central. Seule la moitié de la chambre est représentée pour chaque calcul.

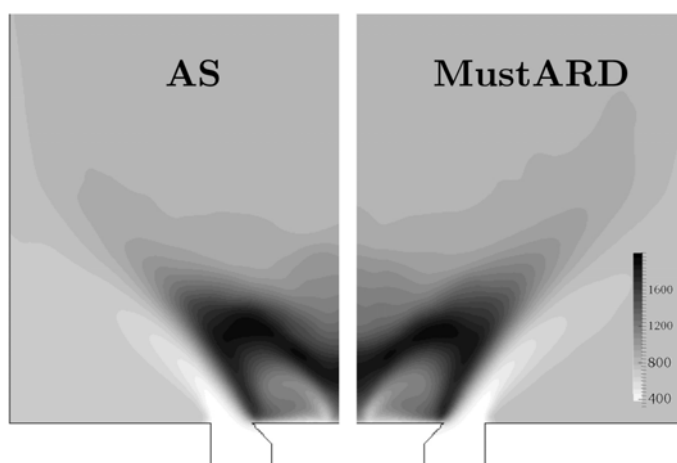


Figure 12.2 : Comparaison AS/ MuStARD des champs de température gazeuse moyenne obtenue dans le plan central. Seule la moitié de la chambre est représentée pour chaque calcul.

Les zones de dégagement de chaleur sont similaires pour les simulations AS et MuStARD (Fig. 12.3), malgré un mécanisme de production différents, comme déjà évoqué précédemment (Chap.

9). Dans la simulation *AS*, le dégagement de chaleur est exclusivement issu des réactions en phase gazeuse après transfert de masse par évaporation de la phase liquide, tandis qu'une partie du dégagement de chaleur du calcul *MuStARD* est issu de la combustion en gouttes isolées à l'intérieur du spray.

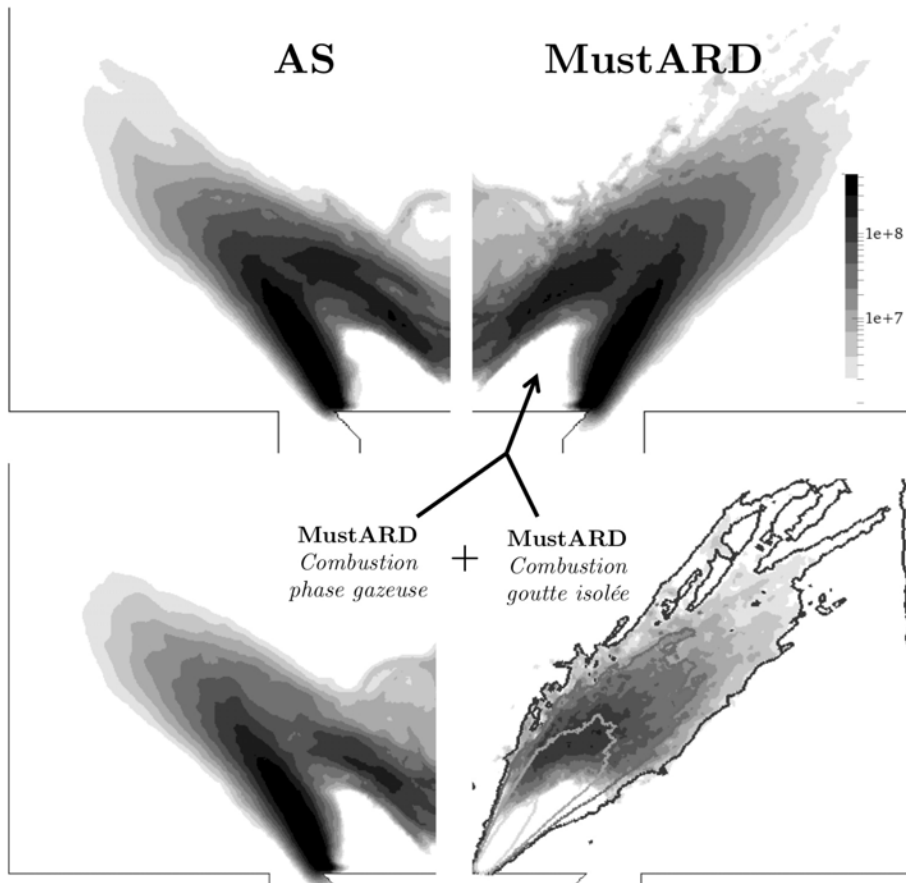


Figure 12.3 : Comparaison *AS/ MuStARD* du taux de dégagement de chaleur moyen obtenu dans le plan central (haut). Seule la moitié de la chambre est représentée pour chaque calcul. Pour le modèle *MuStARD*, le dégagement de chaleur est la somme des contributions des réactions de la phase gazeuse (bas gauche) et de la combustion en gouttes isolées (bas droite, avec iso-contours de fraction volumique de liquide).

En analysant le taux de dégagement intégré dans la chambre de combustion (Fig. 12.4), on remarque l'une des principales différences entre les deux modèles : dans le cas *AS*, la puissance moyenne dans la chambre est de 5,16 kW, ce qui correspond à une efficacité de combustion de 95 %, tandis que la puissance obtenue avec le modèle *MuStARD* est de 5,38 kW (99 % d'efficacité), dont 17 % sont fournis par la combustion de gouttes isolées. Ainsi, la simulation *MuStARD* prédit un taux de dégagement de chaleur total supérieur à la simulation *AS* et une combustion presque complète. Malheureusement, aucun diagnostic suffisamment précis n'est disponible dans l'expérience pour déterminer exactement le rendement de combustion, et donc le modèle le plus

pertinent. La mesure des imbrûlés en sortie de chambre de combustion, qui indique que la combustion expérimentale n'est effectivement pas complète, ne permet pas de conclure sur la puissance réelle du brûleur, du fait d'une trop grande incertitude liée à la méthode de mesure. La vapeur de carburant subsistant en post-flamme dans les deux simulations, est représentée en Fig. 12.5. Bien que la fraction massique résiduelle soit très faible dans les deux cas, on observe bien une quantité d'imbrûlés plus importante dans la simulation *AS* que dans la simulation *MuStARD*.

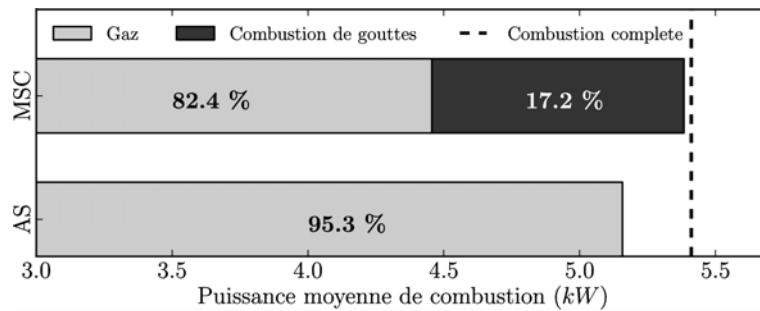


Figure 12.4 : Puissance moyenne du brûleur pour les deux modèles, par rapport à la puissance issue de la combustion complète du carburant injecté. Pour le modèle *MuStARD*, la puissance est générée par les contribution de la combustion gazeuse et de la combustion de goutte isolée.

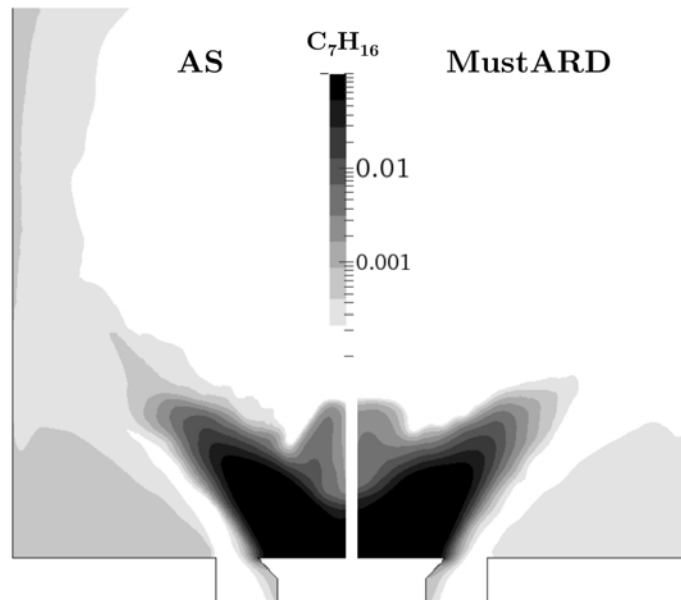


Figure 12.5 : Comparaison *AS/ MuStARD* des champs de fraction massique moyenne de carburant obtenus dans le plan central. Seule la moitié de la chambre est disposée pour chaque calcul.

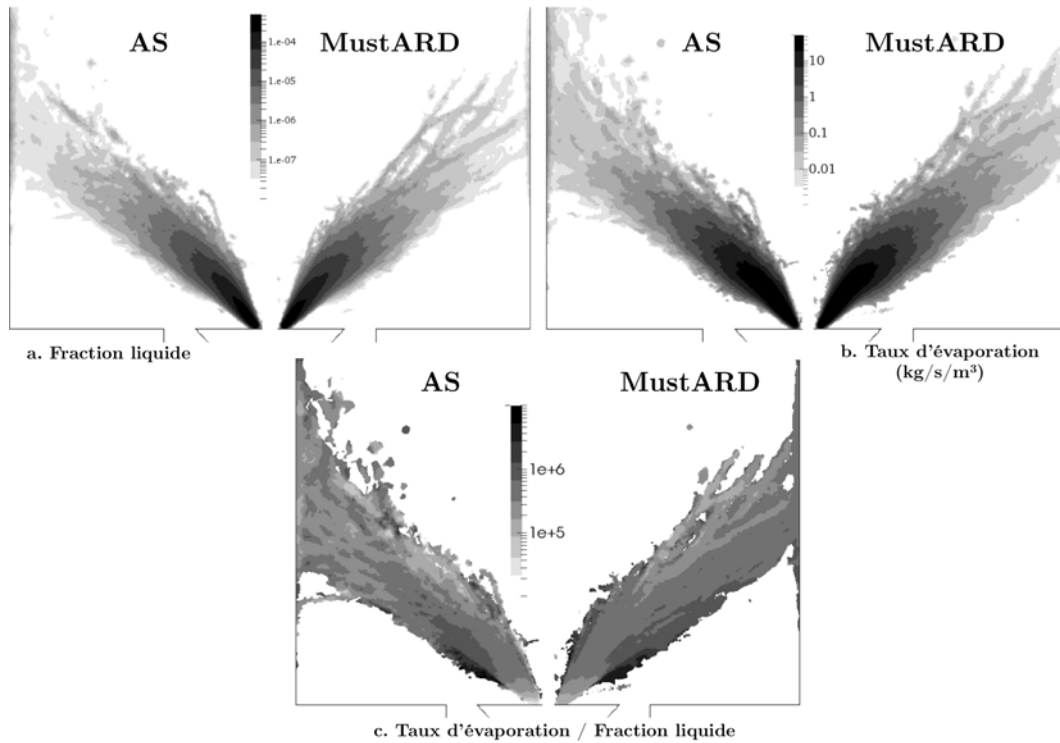


Figure 12.6 : Comparaison AS/ MuStARD de la fraction volumique liquide (a.), du taux d'évaporation (b.) et du rapport entre les deux (bas). Seule la moitié de la chambre est disposée pour chaque calcul.

12.2 Champs moyens de la phase liquide

L'influence du modèle *MuStARD* sur le comportement moyen de la phase liquide apparaît essentiellement en aval de la zone de réaction en M. La charge moyenne en carburant liquide (Fig. 12.6 a.), similaire proche de l'injection, est moins importante en post-flamme dans le cas *MuStARD* : le carburant liquide résiduel après la zone principale de réaction est donc plus important lorsque la combustion de goutte isolée n'est pas prise en compte. Les mêmes caractéristiques sont observées pour le taux d'évaporation (Fig. 12.6 b.), fortement lié à la quantité de gouttes présentes localement. En rapportant le taux d'évaporation à la charge liquide, il est possible de localiser les zones où l'évaporation individuelle des gouttes est plus intense. La figure 12.6 c. montre une croissance rapide du taux d'évaporation proche de l'injection, du fait de la présence de gaz chauds, puis une stabilisation dans le coeur du spray et finalement une décroissance dans la zone de dilution avec les gaz frais. On remarque une zone périphérique autour du spray où l'évaporation ramenée à la masse liquide est très importante ($\sim 10^7$). Du fait des mouvements de recirculation, cette zone est fortement chargée en petites gouttes, dont le taux d'évaporation est très grand relativement à leur taille, puisque leur temps de préchauffage est plus faible que pour les grosses gouttes. En aval de

la zone de réaction principale, le taux d'évaporation diminue moins fortement dans la simulation *MuStARD* que dans la simulation *AS*.

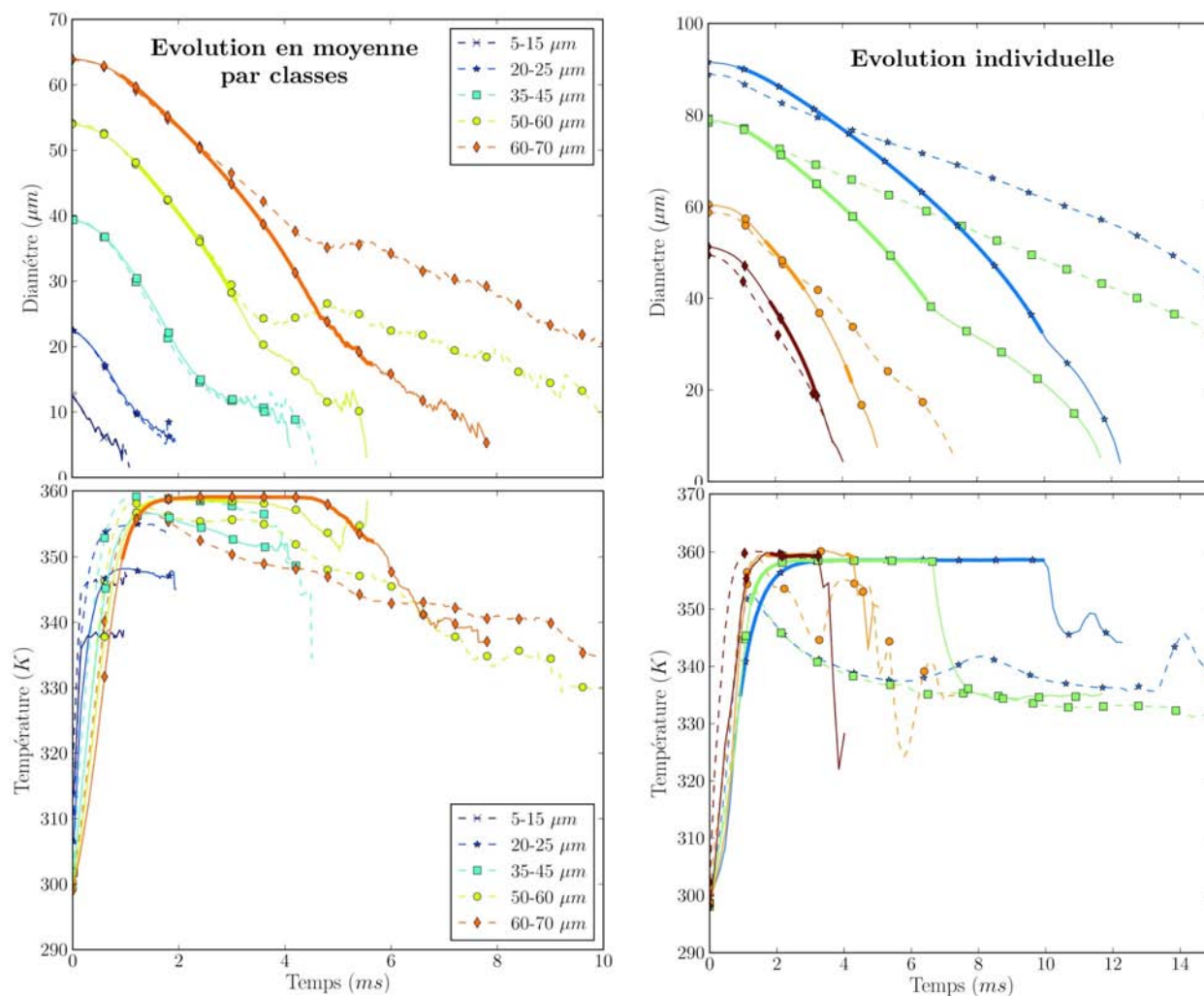


Figure 12.7 : *Evolutions temporelles moyennes du diamètre et de la température pour différentes classes de diamètre initial de gouttes (gauche) et évolutions individuelles de quelques gouttes depuis leur injection. Lignes pointillées : AS; Lignes pleines : MuStARD. Le mode de combustion de goutte isolée pour MuStARD est activé lorsque le trait plein est gras.*

Pour illustrer cette différence de comportement entre les deux modèles, l'évolution temporelle moyenne de différentes classes de gouttes est analysée. Une classe correspond ici à l'ensemble des gouttes dont le diamètre **initial** est compris dans un intervalle donné. Le comportement temporel moyen pour 5 classes de diamètres initiaux est présenté en Fig. 12.7. Pour toutes les classes, le comportement moyen est très similaire pour les deux modèles, en termes de décroissance du diamètre et d'évolution de la température de la goutte jusqu'à 4 ms, temps de vie de goutte atteint uniquement par les gouttes de plus de 40 μm et qui correspond au moment où les gouttes

atteignent la zone de dilution par les gaz frais. Le modèle d'évaporation seul dans la simulation *AS* (lignes pointillées) prédit alors une baisse significative de la température des gouttes et de la pente de décroissance du diamètre de goutte, tandis que ces deux quantités se maintiennent stable avec le modèle *MuStARD*, grâce à l'activation de la combustion de gouttes isolées en aval de la zone de réaction. Le temps de vie moyen des gouttes dans la zone de dilution est donc plus faible pour le modèle *MuStARD* que pour le modèle d'évaporation seul. Vers la fin de la vie des gouttes allumées dans le modèle *MuStARD* (Classes 50 – 70 μm), le critère d'extinction s'active du fait de la taille des gouttes, devenue très petite. Les gouttes s'éteignent, et l'évolution de la température et la pente de décroissance du diamètre devient à nouveau similaire aux évolutions dans la simulation *AS*.

L'évolution moyenne de la population de gouttes le long de l'axe de la chambre est analysée en traçant la distribution en diamètre des gouttes contenues dans différentes tranches superposées le long de l'axe de la chambre de combustion et comprise entre les coordonnées Y_- et Y_+ (Fig. 12.8). La distribution est fournie en volume (volume occupé par une classe de diamètre de goutte), et également en contribution au taux d'évaporation. De plus, pour le modèle *MuStARD*, les contributions de chaque mode (*E* ou *V*) sont indiqués. Enfin, les pourcentages en Fig. 12.8 représentent le rapport entre le taux d'évaporation total mesuré dans la tranche (en fonction du mode pour *MuStARD*) et le débit liquide entrant (0,12 g/s). En régime stationnaire, la quasi-totalité du débit liquide entrant s'évapore. La somme des pourcentages pour chacun des deux modèles est donc proche de 100%.

Dans la première tranche (0-10 mm), les deux modèles présentent un comportement similaire, puisque la contribution du mode E de *MuStARD* est très faible dans cette région très pauvre en oxygène (absence de partie noire dans la distribution). Au delà de 10 mm du point d'injection, le mode E commence à s'activer (4,7 % du taux d'évaporation total, dans cette tranche). L'activation du mode E concerne en majorité les diamètres supérieurs à 20 μm : les gouttes plus petites ne s'allument pas à cause du critère d'extinction en diamètre ($d_{ext} \sim 20 \mu$ avec ces conditions locales). Pour la tranche 15-20 mm, qui correspond à la zone de réaction, le taux d'évaporation entre simulation *AS* et *MuStARD* est similaire pour un volume liquide équivalent, puisque le comportement de l'évaporation à haute température est proche de celui d'une goutte allumée, comme vu précédemment. A partir de 20 mm, la grande majorité des gouttes restantes sont en mode E. On remarque que dans la tranche 20 – 30 mm, le taux d'évaporation entre les deux modèles est sensiblement équivalent, pour un volume de goutte beaucoup moins important en *MuStARD*. En effet, comme vu précédemment, le mode E contribue de manière plus importante à l'évaporation pour un volume liquide équivalent. Globalement, la quantité de carburant liquide présente dans la chambre en régime stationnaire est plus importante dans la simulation *AS* que dans la simulation *MuStARD*, mais le taux d'évaporation total généré par cette quantité liquide est le même pour les deux modèles. Au delà de 30 mm, le mode E est moins présent, puisque les grosses gouttes allumées initialement atteignent progressivement leur diamètre d'extinction, ou rencontrent un zone d'écoulement trop intense pour maintenir leur mode de combustion (extinction

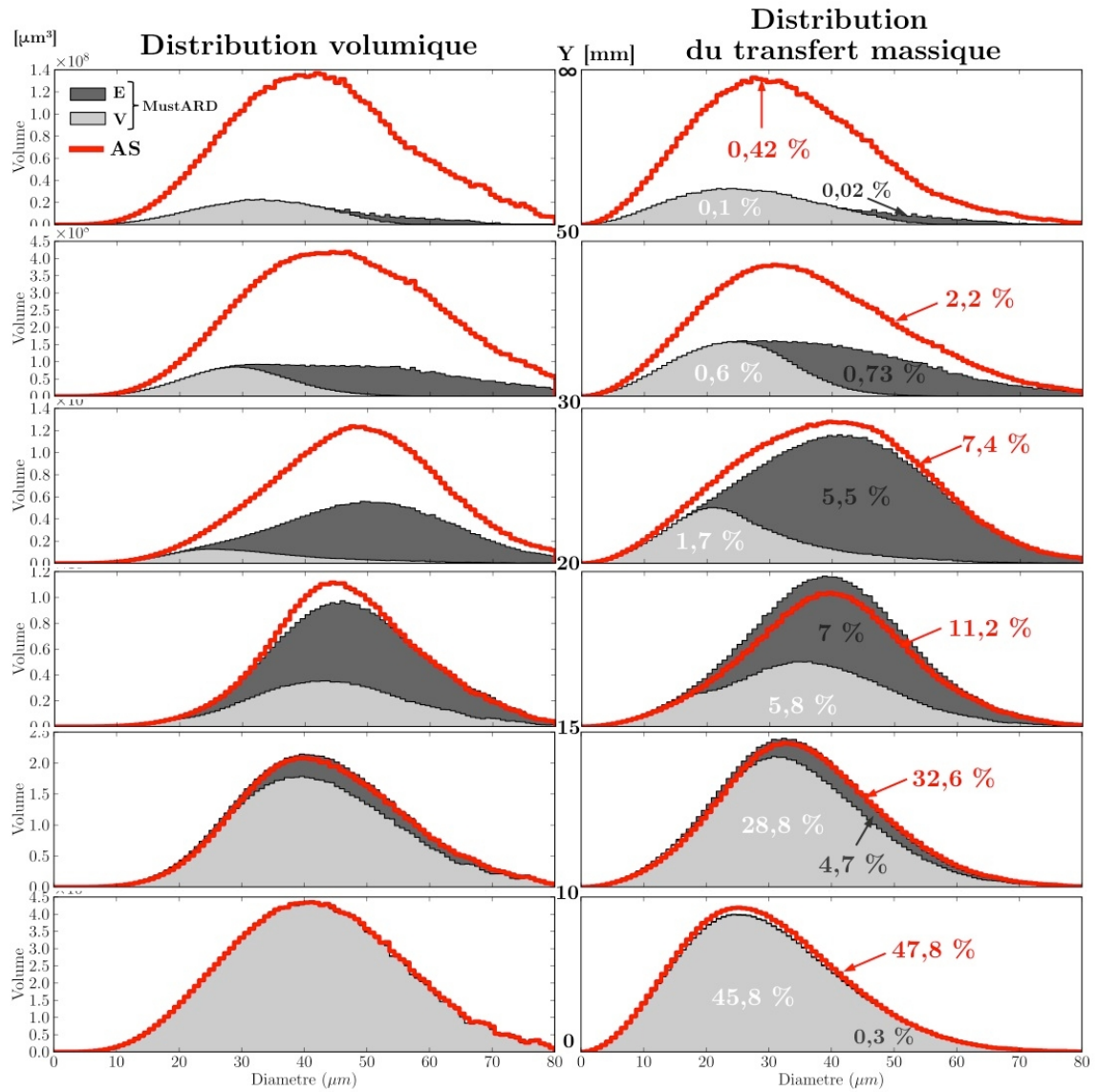


Figure 12.8 : Evolution spatiale des populations de gouttes pour différentes tranches successives le long de l'axe de la chambre (bornes inférieures et supérieures d'abscisses Y (mm), matérialisées en Fig. 12.9). Distributions volumiques à gauche, et contributions au taux d'évaporation en pourcentage du taux d'évaporation total (~ 0.12 g/s). Pour MuStARD, l'état des gouttes (V ou E) est distingué.

par soufflage). Dans la dernière tranche, toutes les gouttes de diamètre inférieur à $40 \mu\text{m}$ sont éteintes. Cette analyse permet d'illustrer la contribution importante du mode de combustion de goutte isolée à la combustion du spray.

Une carte de probabilité de présence conditionnée par le diamètre initial et par l'état de la goutte (V ou E) est proposée pour 3 classes de diamètres initiaux, en Fig. 12.9. La zone $T > 1500\text{K}$ et $Y_{\text{O}_2} > 10^{-2}$, propice à l'allumage de goutte isolée, est matérialisée en gris. La probabilité de

présence d'une goutte de chaque classe est illustrée par des iso-contours continus pour le mode V (évaporation) et en pointillés pour le mode E (mode "enveloppe"). Pour la simulation *AS*, ne disposant que du mode V, on observe une pénétration des gouttes du spray qui augmente avec le diamètre initial de gouttes. Les petites gouttes ralentissant et s'évaporant plus rapidement, ne sont présentes que proche de l'injection. Pour le modèle *MuStARD*, on remarque que la combustion de goutte isolée ne s'active ni proche de l'injecteur, du fait de la densité trop forte qui active le critère de proximité, ni dans la zone interne au M, du fait de l'absence d'oxygène. La combustion de goutte isolée ne s'active qu'à partir du moment où la zone propice à l'allumage (oxygène et température suffisants) est atteinte. Pour *MuStARD*, la classe $[0 - 20] \mu m$ est très similaire à la simulation *AS*, puisque les petites gouttes n'arrivent pas à s'allumer. De même, la classe $[30 - 50] \mu m$, qui présente un nombre relativement faible de gouttes allumées dans la simulation *MuStARD*, a une répartition similaire à la simulation *AS*. Le mode E s'active dès l'entrée de la zone propice à l'allumage. Toutes les gouttes de la classe $[30 - 50] \mu m$ se sont évaporées avant de sortir de cette zone. Enfin, la classe de grand diamètre initial ($[60 - 100] \mu m$) présente des différences notables de répartition entre les deux modèles, liées à une forte implication du mode de combustion de goutte isolée pour cette classe. Ce dernier est essentiellement présent dans la zone propice à la combustion, puis se maintient en aval, avant de disparaître du fait de l'extinction des gouttes. La pénétration du jet de grosses gouttes est plus faible pour *MuStARD* que pour *AS*, puisque leur temps de vie moyen est inférieur dans le mode E.

L'étude de la phase liquide par classe de diamètre **initial** permet de répondre à certaines questions pertinentes pour la conception, comme par exemple : quelle distance parcourent les gouttes d'un diamètre donné ? Comment se répartissent les gouttes de petit diamètre initial ? Dans quelles régions s'active tel régime de combustion, pour quel diamètre d'injection ? Ces informations peuvent notamment permettre d'adapter la distribution physique à l'injection pour obtenir une répartition plus convenable.

12.3 Analyse de la structure de flamme instantanée

Le comportement individuel de certaines gouttes est comparé dans les deux simulations en Fig. 12.7 (droite). Les tendances moyennes observées précédemment sont retrouvées sur le comportement individuel : les gouttes de diamètre initial inférieur à $30 \mu m$ ont un comportement similaire pour les deux modèles, le mode E ne s'activant que peu pour ces gouttes. Entre 40 et $60 \mu m$ de diamètre initial, les deux modèles présentent des comportements similaires, même si le mode E s'active dans le modèle *MuStARD*. Pour l'une des gouttes (diamètre initial de $60 \mu m$), on remarque un premier allumage suivi d'une extinction puis d'un ré-allumage. Ce comportement est observé lorsque la flamme présente une branche réactive qui s'enroule ("cusp", Fig. 12.10) : la goutte traverse une première fois dans le sens carburant \rightarrow oxygène en s'allumant, puis une deuxième fois dans le sens oxygène \rightarrow carburant, elle s'éteint alors, du fait de l'absence d'oxygène, puis se ré-allume en retraversant une dernière fois le front de flamme dans le sens carburant \rightarrow oxygène.

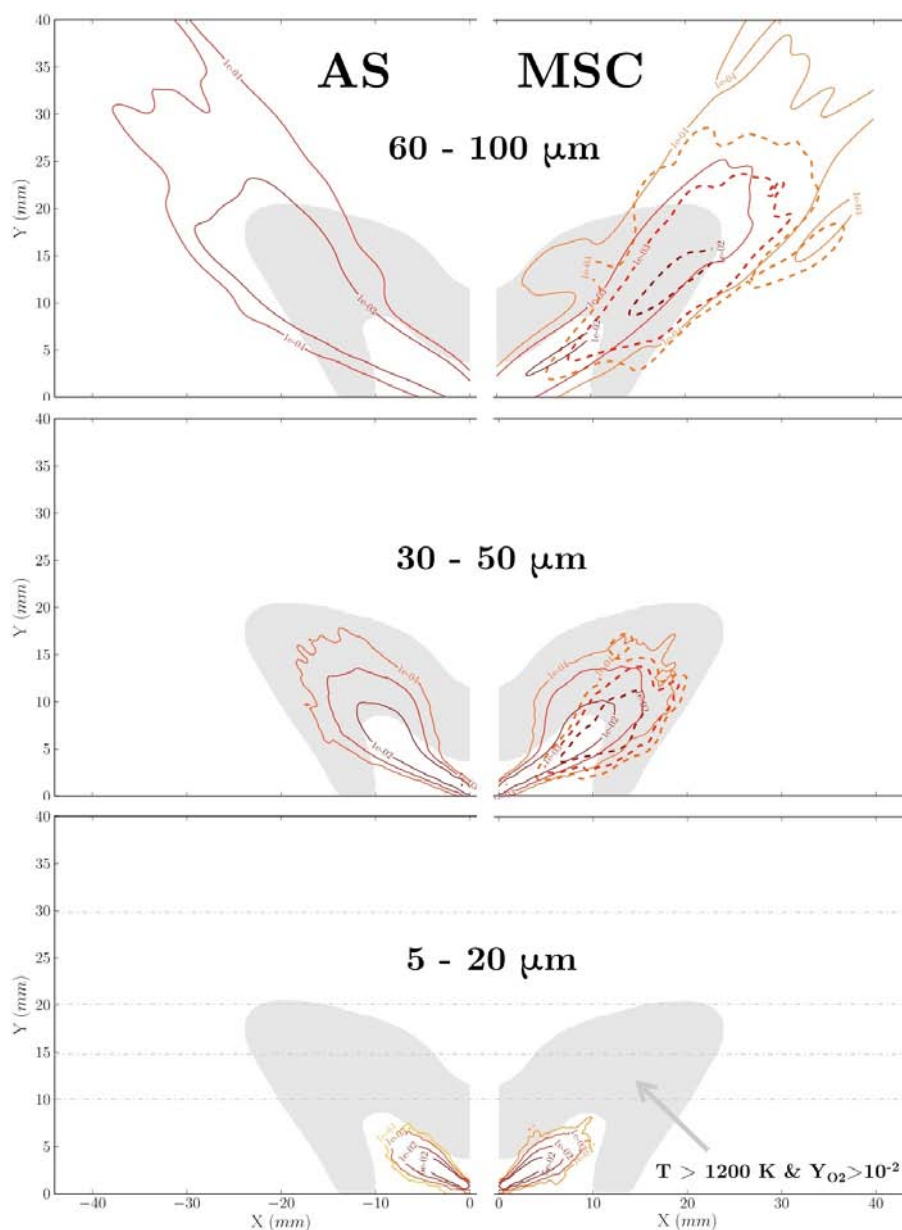


Figure 12.9 : Carte de probabilité de présence conditionnée par le diamètre initial et par l'état de la goutte, pour la simulation AS (gauche) et MuStARD (droite) pour trois classes de diamètre *initial*. Lignes continues : mode V; Lignes pointillées : mode E. La zone $T > 1500 \text{ K}$ et $Y_{O_2} > 10^{-2}$ est matérialisée en gris.

Pour les gouttes de diamètre supérieur à $60 \mu\text{m}$, on remarque l'écart important entre simulation AS et MuStARD, lié à l'activation du mode E dans la zone de dilution par les gaz frais. On note de plus la décroissance rapide de la température liquide et du taux de décroissance du diamètre

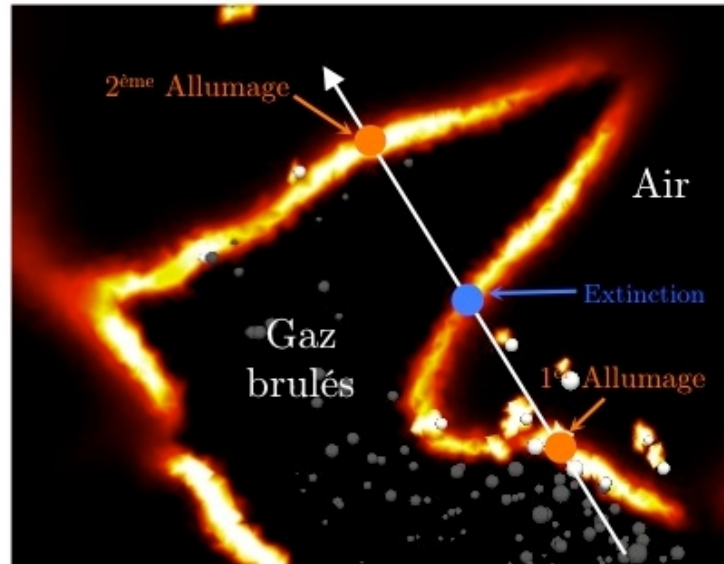


Figure 12.10 : Comportement particulier des gouttes lorsque la flamme présente un repliement ("cusp"), dans la simulation MuStARD.

dès l'instant où la goutte est éteinte. Le temps de vie est clairement plus faible pour les gouttes en combustion.

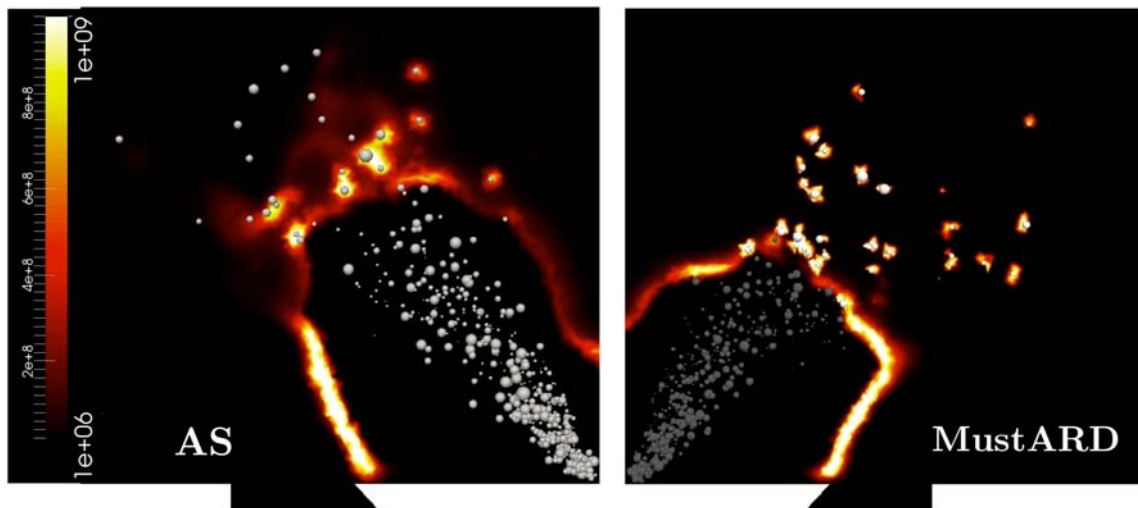


Figure 12.11 : Dégagement de chaleur instantané, avec sur-imposition des gouttes, dont la taille est proportionnelle au diamètre de goutte. Pour MuStARD, le mode E est activé pour les gouttes colorées en blanc.

La structure instantanée typique du dégagement de chaleur et du spray est illustrée pour les deux simulations en Fig. 12.11. Dans la simulation AS, on retrouve l'interaction caractéristique entre

spray et zone de réaction, avec un front de flamme modifié par la présence des gouttes et une zone post-flamme de combustion gazeuse locale autour des gouttes individuelles, décroissant rapidement en aval. Avec le modèle *MuStARD*, les gouttes allumées à partir du front de flamme (colorées en blanc dans Fig. 12.11) génèrent un dégagement de chaleur très marqué, lié au couplage liquide-gaz de la combustion de goutte isolée, qui subsiste en aval. Les autres branches de la flamme en M sont peu modifiées par la différence de comportement dans la zone d'interaction spray/flamme.

Deux séquences d'images montrant la structure instantanée de la flamme pour les deux modèles (Fig. 12.12) sont comparées à une séquence équivalente d'images, obtenues par OH-PLIF dans l'expérience (Fig. 12.13). Ces séquences correspondent à un temps physique de 3 ms environ et illustrent à nouveau le comportement relativement différent des deux modèles dans la zone d'activation du mode E. Hormis cette différence, les structures de flammes en M sont similaires, et présentent les mêmes caractéristiques de stabilisation, de mouvement, d'extinction locale, de lâcher de poche de gaz chaud. Lorsque l'on compare ces séquences à la séquence d'images expérimentales, on retrouve des caractéristiques similaires, en terme de plissement du front de flamme, de relâchement de poches chaudes, de combustion très locale en post-flamme, d'extinction locale.

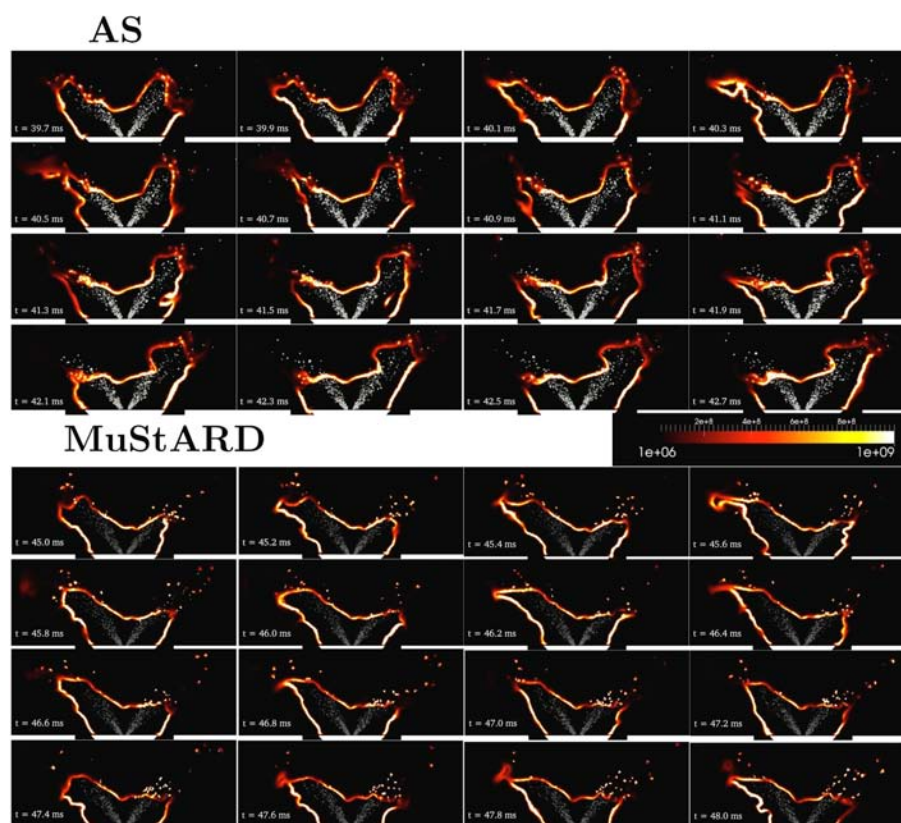


Figure 12.12 : Séquence d'images instantanées de dégagement de chaleur, espacées de 0.2 ms, sur 3 ms de temps physique.

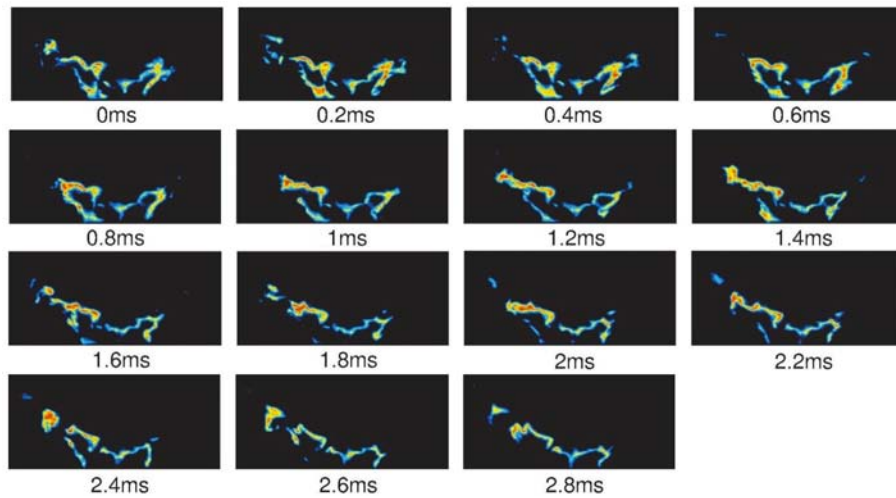


Figure 12.13 : Séquence d'images instantanées de OH-PLIF, espacées de 0.2 ms, sur 2.8 ms de temps physique (adapté de [32]).

12.4 Conclusions du chapitre

Sans modifier de manière significative la structure de l'écoulement et de la flamme, l'application du modèle *MuStARD* entraîne des différences notables en post-flamme, avec une consommation plus importante des imbrulés et une pénétration plus courte du spray dans la chambre. Dans le cas du brûleur de Cambridge, un cinquième de la puissance totale est fournie sous la forme d'une combustion de goutte isolée. La quantité d'imbrulés en sortie de chambre de combustion est plus faible lorsque la combustion de goutte isolée est prise en compte. Cette dernière s'active très majoritairement dans le front de flamme et se maintient en aval jusqu'à l'apparition de phénomènes d'extinction (diamètre d'extinction ou soufflage de la flamme par convection relative).

Conclusions générales et perspectives

Cette thèse a été l'occasion de poursuivre le développement du code AVBP Euler-Lagrange, en termes de fonctionnalités et d'optimisation des procédures. Une modification du principe de localisation et de transport des particules dans le maillage a été tout d'abord proposée, afin de résoudre un problème de perte de particules aux parois et d'améliorer la robustesse du transport des particules dans le maillage partitionné. Une nouvelle méthode d'injection d'une distribution en taille de goutte permettant de fournir en entrée une distribution quelconque a été également développé. Cette fonctionnalité facilite grandement la mise en donnée d'une injection lagrangienne, en permettant d'imposer directement la distribution du spray injecté en fonction d'une mesure expérimentale de la distribution de goutte de l'injecteur, sans passage par une opération d'adaptation d'une distribution usuelle, source d'incertitudes. Une méthode de traitement des erreurs point source en LES-DPS a été ensuite proposée, permettant de limiter la perturbation locale d'un point source par étalement uniforme sur un volume dépendant de la taille de la goutte. Enfin, une nouvelle répartition des particules numériques sur la distribution en taille à l'injection a été proposée, permettant d'améliorer significativement la convergence statistique d'une simulation lagrangienne par rapport aux méthodes usuelles de répartitions. Au cours de la thèse, d'autres développements prometteurs du code ainsi que des méthodes de post-traitement avancés de la phase liquide, non évoquées dans ce manuscrit, ont pu être mis en évidence et testés, et font actuellement l'objet d'un travail d'intégration.

Une autre contribution importante de cette thèse est l'amélioration de la modélisation de la combustion diphasique en LES-DPS. Dans un premier temps, une adaptation du modèle de combustion turbulente TFLES est proposée pour simuler de manière plus précise le comportement de la combustion diphasique **homogène**. Dans un deuxième temps, un modèle multi-état de combustion de goutte, appelé *MuStARD*, est proposé pour simuler de manière plus précise la combustion diphasique **hétérogène**. Ce modèle, validé étape après étape, permet de définir si une goutte ne fait que s'évaporer ou si elle est susceptible de présenter une combustion de goutte isolée, en fonction d'un critère d'allumage, d'extinction et de densité. Lorsque la goutte brûle, son évolution suit un modèle analytique de combustion de goutte, qui fournit de très bons résultats par rapport aux expériences de gouttes isolées en combustion. Le modèle *MuStARD* est validé dans des configurations de complexité croissante, puis appliqué au brûleur académique précédemment étudié. La comparaison entre une simulation avec un modèle d'évaporation seul et avec le modèle *MuStARD* met

en évidence une forte influence de la prise en compte de la combustion de goutte isolée, notamment en ce qui concerne le taux de dégagement total prédit dans la simulation. L'introduction d'un certain nombre de processus physiques supplémentaires dans la simulation du spray réactif, non pris en compte par la méthode standard, avec modèle d'évaporation seul, ainsi que le bon accord de *MuStARD* avec des configuration expérimentales simples, permettent de conclure à un apport significatif du modèle *MuStARD* pour prédire la combustion d'un spray.

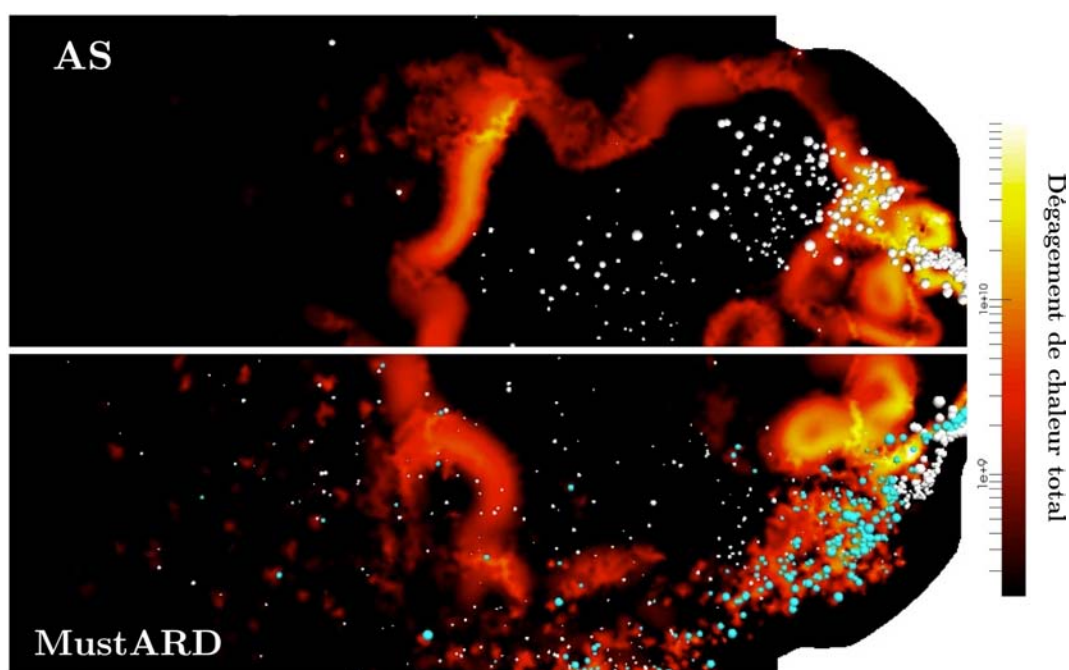


Figure 12.14 : Illustration du comportement dans une chambre de combustion industrielle *Turbomeca*. Les gouttes colorées en blanc et bleu sont respectivement en mode V (évaporation pure) et en mode E (combustion de goutte isolée).

En tout dernier lieu, le modèle *MuStARD* a fait l'objet d'une application dans une chambre de combustion industrielle *Turbomeca*, avec une procédure de mise en donnée pouvant être généralisée notamment à d'autres carburants et d'autre points de fonctionnement, et prenant en compte autant que possible les contraintes liées à une utilisation en bureau d'étude dans le futur. Pour des raisons de confidentialité, cette simulation n'est pas détaillée dans ce manuscrit. Elle met en évidence la présence de combustion de goutte isolée, comme illustré en Fig. 12.14. L'influence du modèle *MuStARD* sur la prédiction du profil de température en sortie de chambre, de la structure de flamme, des limites d'extinction et de ré-allumage du moteur, fera l'objet d'études dans le futur.

A la fin de cette thèse, quelques perspectives d'amélioration de la modélisation de la combustion diphasique en LES-DPS peuvent être dégagées :

- **Amélioration des critères de changement d'état dans *MuStARD*** : La modélisation a mis en évidence un certain nombre de points à améliorer : prise en compte du comportement de

l'auto-allumage des gouttes à basse température ($< 1000\text{ K}$), critère d'extinction en soufflage, prise en compte de l'extinction due aux pertes par rayonnement.

- **Amélioration du modèle de combustion de goutte isolée** : le modèle pourrait être amélioré en prenant en compte l'influence de l'écoulement autour de la goutte, l'influence de la structure thermique interne de la goutte, les effets liés à l'accumulation instationnaire de carburant autour de la goutte, les émissions de polluants liés à la présence d'une flamme de diffusion etc. De plus, le mode de combustion de goutte présentant une flamme dans le sillage de la goutte pourrait être introduit, comme état supplémentaire d'évolution de la goutte.
- **Modélisation de la combustion diphasique homogène en sous-maille** : l'influence d'un spray homogène sur la combustion turbulente en sous-maille pourrait être prise en compte de manière plus précise en analysant le comportement à l'échelle de sous maille de la combustion diphasique homogène en présence de turbulence.
- **Traitement de l'erreur point-source** : cette thèse a mis en évidence les erreurs de prédiction croissantes liées au non-respect de l'hypothèse de non-perturbation dans l'approche point-source en LES-DPS. Une ébauche de méthodologie de traitement a été proposée, mais nécessiterait un travail de recherche plus abouti, pour être proprement traité et anticiper les problèmes liés aux raffinements continus des maillages LES.

Bibliographie

- [1] B. Abramzon and S. Sazhin. Droplet vaporization model in the presence of thermal radiation. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 48 :1868–1873, 2005. citée en p. [92](#), [153](#)
- [2] B. Abramzon and W. A. Sirignano. Droplet vaporisation model for spray combustion calculations. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 9 :1605–1618, 1989. citée en p. [5](#), [91](#), [95](#), [207](#)
- [3] Suresh K. Aggarwal. Single droplet ignition : Theoretical analyses and experimental findings. *Progress in Energy and Combustion Science*, 45 :79–107, 2014. citée en p. [28](#), [155](#)
- [4] F. Akamatsu, Y. Mizutani, M. Katsuki, S. Tsushima, and Y. D. Cho. Measurement of the local group combustion number of droplet clusters in a premixed spray stream. *Proceedings of the Combustion Institute*, 26 :1723–1729, 1996. citée en p. [42](#), [47](#)
- [5] K. Annamalai and W. Ryan. Interactive processes in gasification and combustion. part 1 : Liquid drop arrays and clouds. *Progress in Energy and Combustion Science*, 18 :221–295, 1992. citée en p. [36](#), [40](#), [41](#), [42](#), [228](#)
- [6] Y. Aouina, U. Maas, E. Gutheil, U. Riedel, and J. Warnatz. Mathematical modeling of droplet heating, vaporization, and ignition including detailed chemistry. *Combustion Science and Technology*, 173 :1–23, 2001. citée en p. [31](#)
- [7] I. Awasthi, G. Gogos, and T. Sundararajan. Effects of size on combustion of isolated methanol droplets. *Combustion and Flame*, 160 :1789–1802, 2013. citée en p. [32](#), [35](#), [169](#)
- [8] I. Awasthi, D. N. Pope, and G. Gogos. Effects of the ambient temperature and initial diameter in droplet combustion. *Combustion and Flame*, 161 :1883–1899, 2014. citée en p. [32](#), [166](#)
- [9] Y. Baba and R. Kurose. Analysis and flamelet modelling for spray combustion. *Journal of Fluid Mechanics*, 612 :45–79, 2008. citée en p. [52](#)
- [10] A. Bader, P. Keller, and C. Hasse. The influence of non-ideal vapor/liquid equilibrium on the evaporation of ethanol/isooctane droplets. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 64 :547–558, 2013. citée en p. [92](#)
- [11] S. Balachandar and John K. Eaton. Turbulent dispersed multiphase flow. *Annual Review of Fluid Mechanics*, 42 :111–133, 2010. citée en p. [25](#), [26](#)
- [12] K. D. Bartle, E. M. Fitzpatrick, J. M. Jones, M. L. Kubacki, R. Plant, M. Pourkashanian, A. B. Ross, and A. Williams. The combustion of droplets of liquid fuels and biomass particles. *Fuel*, 90 :1113–1119, 2011. citée en p. [32](#)
- [13] A. B. Basset. *Treatise on Hydrodynamics*, volume 2. Deighton Bell, London, 1888. citée en p. [83](#)
- [14] G. K. Batchelor. *An introduction to fluid dynamics*. Cambridge University Press, Cambridge, 1988. citée en p. [92](#)
- [15] C.H. Beck, R. Koch, and H. J. Bauer. Identification of droplet burning modes in lean, partially prevaporized swirl-stabilized spray flames. *Proceedings of the Combustion Institute*, 32 :2195–2203, 2009. citée en p. [33](#), [34](#), [41](#)
- [16] C.H. Beck, R. Koch, and H.J. Bauer. Numerical investigation of the time scales of single droplet burning. *Flow, Turbulence and Combustion*, 82 :571–598, 2009. citée en p. [27](#), [33](#), [34](#)
- [17] Josette Bellan and Martin Summerfield. Theoretical examination of assumptions commonly used for the gas phase surrounding a burning droplet. *Combustion and Flame*, 33 :107–122, 1978. citée en p. [92](#)

- [18] Robert W. Bilger. A mixture fraction framework for the theory and modeling of droplets and sprays. *Combustion and Flame*, 158 :191–202, 2011. citée en p. [36](#), [58](#), [60](#), [170](#), [202](#)
- [19] M. Bini and W. P. Jones. Large eddy simulation of an evaporating acetone spray. *International Journal of Heat and Fluid Flow*, 30 :471–480, 2009. citée en p. [55](#)
- [20] R. B. Bird, W. E. Stewart, and E. N. Lighfoot. *Transport phenomena*. John Wiley, New York, 1960. citée en p. [91](#)
- [21] Madjid Birouk and Iskender Gokalp. Current status of droplet evaporation in turbulent flows. *Progress in Energy and Combustion Science*, 32 :408–423, 2006. citée en p. [27](#)
- [22] M. Boileau. *Simulation aux grandes échelles de l’allumage diphasique des foyers aéronautiques*. Phd thesis, INP Toulouse, 2007. citée en p. [50](#), [142](#), [147](#)
- [23] M. Boileau, G. Staffelbach, B. Cuenot, T. Poinso, and C. Bérat. Les of an ignition sequence in a gas turbine engine. *Combustion and Flame*, 154 :2–22, 2008. citée en p. [59](#)
- [24] Marc Boivin, Olivier Simonin, and Kyle D Squires. Direct numerical simulation of turbulence modulation by particles in isotropic turbulence. *Journal of Fluid Mechanics*, 375 :235–263, 1998. citée en p. [25](#), [26](#)
- [25] G. Borghesi, E. Mastorakos, and R. S. Cant. Complex chemistry DNS of n-heptane spray autoignition at high pressure and intermediate temperature conditions. *Combustion and Flame*, 160 :1254–1275, 2013. citée en p. [53](#), [58](#)
- [26] R. Borghi. Background on droplets and sprays. In *Combustion and turbulence in two phase flows, Lecture Series 1996-02*. Von Karman Institute for Fluid Dynamics, 1996. citée en p. [37](#), [42](#)
- [27] R. Borghi. The links between turbulent combustion and spray combustion and their modelling. *Transport phenomena in combustion*, 1996. citée en p. [42](#)
- [28] J. Boussinesq. *Théorie Analytique de la Chaleur*, volume 2. Ecole Polytechnique, Paris, 1903. citée en p. [83](#)
- [29] M. Burger, R. Schmehl, K. Prommersberger, O. Schaefer, R. Koch, and S. Wittig. Droplet evaporation modeling by the distillation curve model : accounting for kerosene fuel and elevated pressures. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 46 :4403–4412, 2003. citée en p. [92](#)
- [30] S. Candel, F. Lacas, N. Darabiha, and J. Rolon. Group combustion in spray flames. *Multiphase Science and Technology*, 11 :1–18, 1999. citée en p. [40](#)
- [31] D. Cavaliere. PhD thesis, University of Cambridge, 2013. citée en p. [199](#), [213](#)
- [32] D.E Cavaliere, J. Kariuki, and E. Mastorakos. A comparison of the blow-off behaviour of swirl-stabilized premixed, non-premixed and spray flames. *Flow, Turbulence and Combustion*, 91 :347–372, 2013. citée en p. [48](#), [195](#), [197](#), [198](#), [211](#), [217](#), [243](#)
- [33] CERFACS. *AVBP Handbook - http://cerfacs.fr/~avbp/AVBP_V5.X/HANDBOOK*. CERFACS, 2009. citée en p. [95](#)
- [34] B. H. Chao, C. K. Law, and J. S. Tien. Structure and extinction of diffusion flames with flame radiation. In *Progress in Energy and Combustion Science*, pages 523–531, 1991. citée en p. [35](#), [169](#)
- [35] S. Chapman and T. Cowling. *The Mathematical Theory of Non-Uniform Gases*. Cambridge University Press, Cambridge, 3rd edition, 1970. citée en p. [68](#)
- [36] F. Charlette, D. Veynante, and C. Meneveau. A power-law wrinkling model for LES of premixed turbulent combustion : Part i - non-dynamic formulation and initial tests. *Combustion and Flame*, 131 :159–180, 2002. citée en p. [76](#), [206](#)
- [37] G. Chaussonnet. *Modeling of liquid film and breakup phenomena in Large-Eddy Simulations of aeroengines fueled by airblast atomizers*. PhD thesis, INP Toulouse, 2014. citée en p. [61](#), [103](#)
- [38] Geoffroy Chaussonnet. Modeling of liquid film and breakup phenomena in large-eddy simulations of aeroengines fueled by airblast atomizers, 2014. citée en p. [99](#)
- [39] J. Chen and X. Peng. An approach of droplet ignition delay time. *Heat Transfer - Asian Research*, 38 :73–82, 2009. citée en p. [155](#), [156](#)
- [40] K. S. Chen and J. Y. Hwang. Experimental study on the mixing of one- and dual-line heated jets with a cold crossflow in a confined channel. *AIAA Journal*, 29 :353–360, 1991. citée en p. [42](#)
- [41] Z. Chen, M. P. Burke, and Y. Ju. Effects of lewis number and ignition energy on the determination of laminar flame speed using propagating spherical flames. *Progress in Energy and Combustion Science*, 32 :1253–1260, 2009. citée en p. [31](#)

-
- [42] H. H. Chiu and E. J. Croke. Group combustion of liquid fuel sprays. Energy Technology Lab 81-2, University of Illinois, Chicago, 1981. citée en p. 40
- [43] H.H. Chiu. Advances and challenges in droplet and spray combustion. i. toward a unified theory of droplet aerothermochemistry. *Progress in Energy and Combustion Science*, 26 :381–416, 2000. citée en p. 31, 34, 94, 226
- [44] H.H. Chiu and L.H. Hu. Dynamics of ignition transience and gasification partition of a droplet. *Symposium (International) on Combustion*, 27 :1889–1896, 1998. citée en p. 31
- [45] H.H Chiu and J.S. Huang. Multiple-state phenomena and hysteresis of a combusting isolated droplet. *Atomization and Sprays*, 6 :1–26, 1996. citée en p. 34, 36, 59, 60, 152, 153, 170
- [46] H.H. Chiu, H.Y. Kim, and E.J. Croke. Internal group combustion of liquid droplets. *Symposium (International) on Combustion*, 19 :971–980, 1982. citée en p. 7, 40
- [47] Huei-Huang Chiu and S. P. Su. Theory of droplets (ii) : states, structures, and laws of interacting droplets. *Atomization and Sprays*, 7 :1–32, 1997. citée en p. 94
- [48] R. Clift, J. R. Grace, and M. E. Weber. *Bubbles, Drops, and Particles*. Academic Press, 1978. citée en p. 83, 91
- [49] O. Colin, F. Ducros, D. Veynante, and T. Poinso. A thickened flame model for large eddy simulations of turbulent premixed combustion. *Physics of Fluids*, 12 :1843–1863, 2000. citée en p. 75, 206
- [50] O. Colin and M. Rudgyard. Development of high-order Taylor-Galerkin schemes for LES. *Journal of Computational Physics*, 162 :338–371, 2000. citée en p. 95
- [51] C.T. Crowe, J. D. Schwarzkopf, M. Sommerfeld, and Y. Tsuji. *Multiphase Flows With Droplets and Particles*. CRC Press, August 2011. citée en p. 82, 84, 154
- [52] B. Cuenot and T. Poinso. Asymptotic and numerical study of diffusion flames with variable lewis number and finite rate chemistry. *Combustion and Flame*, 104 :111–137, 1996. citée en p. 205
- [53] A. Cuoci, M. Mehl, G. Buzzi-Ferraris, T. Faravelli, D. Manca, and E. Ranzi. Autoignition and burning rates of fuel droplets under microgravity. *Combustion and Flame*, 143 :211–226, 2005. citée en p. 31, 32, 35, 169
- [54] S. De and S.H. Kim. Large eddy simulation of dilute reacting sprays : Droplet evaporation and scalar mixing. *Combustion and Flame*, 160 :2048–2066, 2013. citée en p. 58, 60
- [55] S. De, K.N. Lakshminisha, and Robert W. Bilger. Modeling of nonreacting and reacting turbulent spray jets using a fully stochastic separated flow approach. *Combustion and Flame*, 158 :1992–2008, 2011. citée en p. 58
- [56] D. de Oliveira Maionchi and F. Fachini Filho. An exact solution for droplet vaporization with variable transport coefficient. *22nd International Congress of Mechanical Engineering*, pages 9887–9892, 2013. citée en p. 93
- [57] O. Delabroy, F. Lacas, B. Labegorre, and J.-M. Samaniego. Paramètres de similitude pour la combustion diphasique. *Rev. Gén. Therm.*, pages 934–953, 1998. citée en p. 45
- [58] D.G. Goodwin. *Cantera C++ Users Guide*. <http://sourceforge.net/projects/cantera>, 2002. citée en p. 157, 184, 201
- [59] L. A. Dombrovsky and S. S. Sazhin. A parabolic temperature profile model for heating of droplets. *ASME Journal of Heat Transfer*, pages 535–537, 2003. citée en p. 92
- [60] P. Domingo, L. Vervisch, and J. Réveillon. DNS analysis of partially premixed combustion in spray and gaseous turbulent flame-bases stabilized in hot air. *Combustion and Flame*, 140 :172–195, 2005. citée en p. 52
- [61] B. Duret, G. Luret, J. Reveillon, T. Menard, A. Berlemont, and F.X. Demoulin. DNS analysis of turbulent mixing in two-phase flows. *International Journal of Multiphase Flow*, 40 :93–105, 2012. citée en p. 49
- [62] Harry A. Dwyer and Billy R. Sanders. A detailed study of burning fuel droplets. *Symposium (International) on Combustion*, 21 :633–639, 1988. citée en p. 34
- [63] J. K. Eaton and J. R. Fessler. Preferential concentration of particles by turbulence. *International Journal of Multiphase Flow*, 20 :169–209, 1994. citée en p. 26
- [64] V. Ebrahimiyan and C. Habchi. Towards a predictive evaporation model for multi-component hydrocarbon droplets at all pressure conditions. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 54 :3552–3565, 2011. citée en p. 94
- [65] T. Edwards and L. Q. Maurice. Surrogate mixtures to represent complex aviation and rocket fuels. *Journal of Propulsion and Power*, 17 :461–466, 2001. citée en p. 15
-

- [66] Paul Eisenklam, S. A. Arunachalam, and J. A. Weston. Evaporation rates and drag resistance of burning drops. *Symposium (International) on Combustion*, 11 :715–728, 1967. citée en p. 91
- [67] S. Elghobashi and G. C. Truesdell. On the two-way interaction between homogeneous turbulence and dispersed solid particles. I : Turbulence modification. *Physics of Fluids*, 5 :1790–1801, 1993. citée en p. 26
- [68] G. M. Faeth and D. R. Olson. The ignition of hydrocarbon fuel droplets in air. SAE technical paper, Society of automotive engineers, 1968. citée en p. 156, 158, 159
- [69] T. I. Farouk and F. L. Dryer. Isolated n-heptane droplet combustion in microgravity : a cool flames two-stage combustion. *Combustion and Flame*, 161 :565–581, 2014. citée en p. 29, 31
- [70] P. Fede, P. Février, and O. Simonin. Numerical study of the effect of the fluid turbulence microscales on particle segregation and collision in gas-solid turbulent flows. In *5th International Conference on Multiphase Flow*, Yokohama, Japan, 2004. ICMF. citée en p. 18, 19
- [71] P. Fede and O. Simonin. Numerical study of the subgrid fluid turbulence effects on the statistics of heavy colliding particles. *Physics of Fluids*, 18, 2006. citée en p. 55
- [72] E. Fernández-Tarrazo, A. L. Sánchez, A. Liñán, and F. A. Williams. A simple one-step chemistry model for partially premixed hydrocarbon combustion. *Combustion and Flame*, 147 :32–38, 2006. citée en p. 182, 183
- [73] B. Franzelli, E. Riber, M. Sanjosé, and T. Poinso. A two-step chemical scheme for Large-Eddy Simulation of kerosene-air flames. *Combustion and Flame*, 157 :1364–1373, 2010. citée en p. 182
- [74] J. A. Friedman and M. Renksizbulut. Investigating a methanol spray flame interacting with an annular air jet using phase-Doppler interferometry and planar laser-induced fluorescence. *Combustion and Flame*, 117 :661–684, 1999. citée en p. 44, 45
- [75] A. Fujita, H. Watanabe, R. Kurose, and S. Komori. Two-dimensional direct numerical simulation of spray flames - part 1 : Effects of equivalence ratio, fuel droplet size and radiation, and validity of flamelet model. *Fuel*, 104 :515–525, 2013. citée en p. 53
- [76] M Garcia. INP toulouse theses - development and validation of the Euler-Lagrange formulation on a parallel and unstructured solver for large-eddy simulation. <http://ethesis.inp-toulouse.fr/archive/00000715/>. citée en p. 61, 99, 101, 102
- [77] H.-W. Ge, I. Duwel, H. Kronemayer, R. W. Dibble, E. Gutheil, C. Schulz, and J. Wolfrum. Laser-based experimental and monte carlo PDF numerical investigation of an ethanol/air spray flame. *Combustion Science and Technology*, 180 :1529–1547, 2008. citée en p. 46, 57
- [78] H.-W. Ge and Eva Gutheil. Simulation of a turbulent spray flame using coupled PDF gas phase and spray flamelet modeling. *Combustion and Flame*, 153 :173–185, 2008. citée en p. 57
- [79] Hai-Wen Ge and Eva Gutheil. Probability density function (PDF) simulation of turbulent spray flows. *Atomization and Sprays*, 16 :531–542, 2006. citée en p. 58
- [80] H. Ghassemi, Baek S. W., and Q. S. Khan. Experimental study on evaporation of kerosene droplets at elevated pressures and temperatures. *Combustion Science and Technology*, 178 :1669–1684, 2006. citée en p. 94
- [81] A. Giauque, L. Selle, T. Poinso, H. Buechner, P. Kaufmann, and W. Krebs. System identification of a large-scale swirled partially premixed combustor using LES and measurements. *Journal of Turbulence*, 6 :1–20, 2005. citée en p. 61
- [82] S.R. Gollahalli and T.A. Brzustowski. Flame characteristics in the wake of a burning methanol drop. *Combustion and Flame*, 24 :273–275, 1975. citée en p. 34
- [83] R. A. Gore and C. T. Crowe. Effect of particle size on modulating turbulence intensity. *International Journal of Multiphase Flow*, 15 :279–285, 1989. citée en p. 26
- [84] J. D. Gounder, A. Kourmatzis, and A. R. Masri. Turbulent piloted dilute spray flames : Flow fields and droplet dynamics. *Combustion and Flame*, 159 :3372–3397, 2013. citée en p. 47
- [85] J. B. Greenberg, I. Silverman, and Y. Tambour. A new heterogeneous burning velocity formula for the propagation of a laminar flame front through a polydisperse spray of droplet. *Combustion and Flame*, 104 :358–368, 1996. citée en p. 39
- [86] E. Gutheil and W. A. Sirignano. Counterflow spray combustion modeling with detailed transport and detailed chemistry. *Combustion and Flame*, 113 :92–105, 1998. citée en p. 43

-
- [87] Eva Gutheil. Issues in computational studies of turbulent spray combustion. In *Experiments and Numerical Simulations of Diluted Spray Turbulent Combustion*, volume 17, pages 1–39. Springer Netherlands, 2011. citée en p. [43](#), [58](#)
- [88] G. Hannebique. *Etude de la structure des flammes diphasiques dans les brûleurs aéronautiques*. PhD thesis, INP Toulouse, 2014. citée en p. [61](#), [99](#)
- [89] G. Hannebique, P. Sierra, E. Riber, and B. Cuenot. Large eddy simulation of reactive two-phase flow in a aeronautical multipoint burner. *Flow, Turbulence and Combustion*, 90 :449–469, 2012. citée en p. [93](#), [95](#)
- [90] H. Hara and S. Kumagai. The effect of initial diameter on free droplet combustion with spherical flame. *Symposium (International) on Combustion*, 25 :423–430, 1994. citée en p. [32](#), [167](#), [170](#)
- [91] A. Haselbacher, F. M. Najjar, and J. P. Ferry. An efficient and robust particle localization algorithm for unstructured grids. *Journal of Computational Physics*, 225 :2198–2213, 2007. citée en p. [102](#)
- [92] J. Hayashi, H. Watanabe, R. Kurose, and F. Akamatsu. Effects of fuel droplet size on soot formation in spray flames formed in a laminar counterflow. *Combustion and Flame*, 158 :2559–2568, 2011. citée en p. [43](#)
- [93] C. Heye, H. Koo, and V. Raman. Probability density function approach for large eddy simulation of turbulent spray combustion. In *Proceedings of the 7th US Combustion Meeting, Atlanta, US*, 2011. citée en p. [57](#)
- [94] C. Heye, V. Raman, and A. R. Masri. LES/probability density function approach for the simulation of an ethanol spray flame. *Proceedings of the Combustion Institute*, 34 :1633–1641, 2012. citée en p. [53](#), [57](#)
- [95] C. Heye, V. Raman, and A. R. Masri. Influence of spray/combustion interactions on auto-ignition of methanol spray flames. *Proceedings of the Combustion Institute*, 35 :1639–1648, 2015. citée en p. [57](#)
- [96] C. W. Hirt and B.D. Nichols. Volume of fluid (VOF) method for the dynamics of free boundaries. *Journal of Computational Physics*, 39 :201–225, 1981. citée en p. [49](#)
- [97] C. Hoefler, S. Braun, R. Koch, and H. Bauer. Modeling spray formation in gas turbines - a new meshless approach. *Journal of Engineering for Gas Turbines and Power*, 135, 2012. citée en p. [49](#)
- [98] C. Hollmann and E. Gutheil. Diffusion flames based on a laminar spray flame library. *Combustion Science and Technology*, 135 :175–192, 1998. citée en p. [57](#)
- [99] J.S. Huang and H.H. Chiu. Multistate behavior of a droplet in dilute sprays. *Atomization and Sprays*, 7 :479–506, 1997. citée en p. [34](#)
- [100] J.S. Huang and H.H. Chiu. Comparison of droplet combustion models in nonpremixed spray combustion. In *38th AIAA/ASME/SAE/ASEE Joint Propulsion Conference & Exhibit*, 2002. citée en p. [59](#), [60](#), [152](#), [229](#), [230](#)
- [101] J.S. Huang and H.H. Chiu. Canonical reacting fluid dynamics analysis of droplet vaporization and combustion. *Atomization and Sprays*, 18 :471–494, 2008. citée en p. [31](#)
- [102] L.W. Huang and C.H. Chen. Droplet ignition in a high-temperature convective environment. *Combustion and Flame*, 109 :145–162, 1997. citée en p. [31](#)
- [103] F. Jaegle. *LES of two-phase flow in aero-engines*. PhD thesis, Université de Toulouse - Ecole doctorale MEGeP, CERFACS - CFD Team, Toulouse, December 2009. citée en p. [61](#), [99](#)
- [104] F. Jaegle, J.-M. Senoner, M. Garcia, F. Bismes, R. Lecourt, B. Cuenot, and T. Poinso. Lagrangian and eulerian simulations of evaporating fuel spray in an aeronautical multipoint injector. *Proceedings of the Combustion Institute*, 33 :2099–2107, 2011. citée en p. [61](#), [129](#), [200](#)
- [105] P. Jenny, D. Roekaerts, and N. Beishuizen. Modeling of turbulent dilute spray combustion. *Progress in Energy and Combustion Science*, 38 :846–887, 2012. citée en p. [18](#), [114](#)
- [106] S. Jerzembeck, N. Peters, P. Pepiot-Desjardins, and H. Pitsch. Laminar burning velocities at high pressure for primary reference fuels and gasoline : Experimental and numerical investigation. *Combustion and Flame*, 156 :292–301, 2009. citée en p. [157](#)
- [107] T.L. Jiang, W.S. Chen, M.J. Tsai, and H.H. Chiu. A numerical investigation of multiple flame configurations in convective droplet gasification. *Combustion and Flame*, 103 :221–238, 1995. citée en p. [34](#)
- [108] W. P. Jones, A. J. Marquis, and D. Noh. LES of a methanol spray flame with a stochastic sub-grid model. *Proceedings of the Combustion Institute*, 35 :1685–1691, 2015. citée en p. [57](#)
-

- [109] W. P. Jones, A.J. Marquis, and K. Vogiatzaki. Large-eddy simulation of spray combustion in a gas turbine combustor. *Combustion and Flame*, 161 :222–239, 2014. citée en p. 55, 57
- [110] W.P. Jones, C. Lettieri, A.J. Marquis, and S. Navarro-Martinez. Large eddy simulation of the two-phase flow in an experimental swirl-stabilized burner. *International Journal of Heat and Fluid Flow*, 38 :145–158, 2012. citée en p. 55
- [111] T.L. Kaltz, L.N. Long, M. M. Micci, and J.K. Little. Supercritical vaporization of liquid oxygen droplets using molecular dynamics. *Combustion Science and Technology*, 136 :279–301, 1998. citée en p. 85
- [112] A. N. Karpetis and A. Gomez. An experimental study of well-defined turbulent nonpremixed spray flames. *Combustion and Flame*, 121 :1–23, 2000. citée en p. 47
- [113] A. Kaufmann, O. Simonin, and T. Poinso. Direct numerical simulation of particle-laden homogeneous isotropic turbulent flows using a two-fluid model formulation. In *5th Int. Conf. on Multiphase Flow. ICMF’04*, 2004. citée en p. 39
- [114] A. R. Kerstein and C. K. Law. Percolation in combustion sprays I : Transition from cluster combustion to percolate combustion in non-premixed sprays. In *Symposium (International) on Combustion*, pages 961–969, 1982. citée en p. 40, 43, 153, 228
- [115] T. Kitano, T. Nakatani, R. Kurose, and S. Komori. Two-dimensional direct numerical simulation of spray flames - part 2 : Effects of ambient pressure and lift, and validity of flamelet model. *Fuel*, 104 :526–535, 2013. citée en p. 53
- [116] A. Y. Klimenko and R. W. Bilger. Conditional moment closure for turbulent combustion. *Progress in Energy and Combustion Science*, 25 :595 – 687, 1999. citée en p. 58
- [117] A. N. Kolmogorov, I. G. Petrovski, and N. S. Piskunov. *Bjul Moskosvkovo Gos Univ*, 1 :1–72, 1937. citée en p. 66
- [118] A. Kourmatzis, W. O’Loughlin, and A. R. Masri. Effects of turbulence, evaporation and heat release on the dispersion of droplets in dilute spray jets and flames. *Flow, Turbulence and Combustion*, 91 :405–427, 2013. citée en p. 47
- [119] H. Kronemayer, P. Ifeacho, C. Hecht, T. Dreier, H. Wiggers, and C. Schulz. Gas-temperature imaging in a low-pressure flame reactor for nano-particle synthesis with multi-line NO-LIF thermometry. *Applied Physics B*, 88 :373–377, 2007. citée en p. 45
- [120] A. P. Kryukov, V. Yu. Levashov, and S. S. Sazhin. Evaporation of diesel fuel droplets : kinetic versus hydrodynamic models. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 47 :2541–2549, 2004. citée en p. 85
- [121] K. K. Kuo. *Principles of combustion*. John Wiley & Sons, Inc., Hoboken, New Jersey, 2nd edition, 2005. citée en p. 32, 85, 160, 161, 162
- [122] R. Kurose, O. Desjardins, M. Nakamura, F. Akamatsu, and H. Pitsch. Numerical simulations of spray flames. In *Annual Research Briefs*, pages 269–280. Center for Turbulence Research, NASA Ames/Stanford Univ., 2004. citée en p. 43
- [123] C. K. Law. Asymptotic theory for ignition and extinction in droplet burning. *Combustion and Flame*, 24 :89–98, 1975. citée en p. 30, 35, 169, 170
- [124] C. K. Law, S. H. Chung, and N. Srinivasan. Gas-phase quasi-steadiness and fuel vapor accumulation effects in droplet burning. *Combustion and Flame*, 38 :173–198, 1980. citée en p. 31, 32, 155, 165, 168, 169
- [125] A. H. Lefebvre. *Atomization and Sprays*. Taylor & Francis, 1989. citée en p. 109
- [126] A. H. Lefebvre. *Gas Turbines Combustion*. Taylor & Francis, 1999. citée en p. 15, 17
- [127] F. Lemoine and G. Castanet. Temperature and chemical composition of droplets by optical measurement techniques : a state-of-the-art review. *Experiments in Fluids*, 54 :1–34, 2013. citée en p. 94
- [128] S. Lerman and J. Barry Greenberg. Spray diffusion flame - an asymptotic theory. *Atomization and Sprays*, 20 :1047–1064, 2010. citée en p. 43
- [129] C. Letty, B. Renou, J. Reveillon, S. Saengkaew, and G. Grehan. Experimental study of droplet temperature in a two-phase heptane/air v-flame. *Combustion and Flame*, 160 :1803–1811, 2013. citée en p. 45
- [130] A. Linan. The asymptotic structure of counterflow diffusion flames for large activation energies. *Acta Astronautica*, 1 :1007, 1974. citée en p. 169, 204
- [131] F. Liu, M. Yang, G.J. Smallwood, and H. Zhang. Evaluation of the SNB based full-spectrum CK method for thermal radiation calculations in $CO_2 - H_2O$ mixtures. In *Proceedings of ICHMT, RADO4, Istanbul, Turkey*, 2004. citée en p. 35

-
- [132] Y. Liu, J. Li, Y. Gao, and X.M. Yuan. Laser diagnostic investigation on the spray and combustion with Butanol-Biodiesel-Diesel fuel blends. *Advanced Materials Research*, 443-444 :986–995, 2012. citée en p. 29, 32, 166, 167, 168
- [133] J. C. Livengood and P. C. Wu. Correlation of autoignition phenomena in internal combustion engines and rapid compression machines. In *Symposium (International) on Combustion*, volume 5, pages 347–356. Elsevier, 1955. citée en p. 156
- [134] T. Lu and C.K. Law. Strategies for mechanism reduction for large hydrocarbons : n-heptane. *Combustion and Flame*, 154 :153–163, 2008. citée en p. 181
- [135] K. Luo, H. Pitsch, M. G. Pai, and O. Desjardins. Direct numerical simulations and analysis of three-dimensional n-heptane spray flames in a model swirl combustor. *Proceedings of the Combustion Institute*, 33 :2143–2152, 2011. citée en p. 53, 54
- [136] Anthony J. Marchese, Timothy L. Vaughn, Kenneth Kroenlein, and Frederick L. Dryer. Ignition delay of fatty acid methyl ester fuel droplets : Microgravity experiments and detailed numerical modeling. *Proceedings of the Combustion Institute*, 33 :2021–2030, 2011. citée en p. 29
- [137] T. Marchione, S.F. Ahmed, and E. Mastorakos. Ignition of turbulent swirling n-heptane spray flames using single and multiple sparks. *Combustion and Flame*, 156 :166–180, 2009. citée en p. 48
- [138] S.K. Marley, K.M. Lyons, and K.A. Watson. Leading-Edge reaction zones in Lifted-Jet gas and spray flames. *Flow, Turbulence and Combustion formerly 'Applied Scientific Research'*, 72 :29–47, 2004. citée en p. 46
- [139] S.K. Marley, E.J. Welle, K.M. Lyons, and W.L. Roberts. Effects of leading edge entrainment on the double flame structure in lifted ethanol spray flames. *Experimental Thermal and Fluid Science*, 29 :23–31, 2004. citée en p. 46, 47, 51
- [140] M. Massot, M. Kumar, M.D. Smooke, and A. Gomez. Spray counterflow diffusion flames of heptane : Experiments and computations with detailed kinetics and transport. *Symposium (International) on Combustion*, 27 :1975–1983, 1998. citée en p. 43
- [141] J. D. Mattingly. *Elements of gas turbine propulsion*. AIAA, 2nd edition, 2005. citée en p. 13
- [142] X. Mercier, M. Orain, and F. Grisch. Investigation of droplet combustion in strained counterflow diffusion flames using planar laser-induced fluorescence. *Journal of Physics A : Chemistry*, 88 :151–160, 2007. citée en p. 31, 41, 43, 226
- [143] M. Mikami, S. Miyamoto, and N. Kojima. Counterflow diffusion flame with polydisperse sprays. *Proceedings of the Combustion Institute*, 29 :593–599, 2002. citée en p. 31, 38, 41, 43, 110, 111, 179, 180, 181, 185, 186, 187
- [144] M. Mikami, Y. Mizuta, Y. Tsuchida, and N. Kojima. Flame structure and stabilization of lean-premixed sprays in a counterflow with low-volatility fuel. *Proceedings of the Combustion Institute*, 32 :2223–2230, 2009. citée en p. 38, 43
- [145] M. Mikami, H. Oyagi, N. Kojima, Y. Wakashima, M. Kikuchi, and S. Yoda. Microgravity experiments on flame spread along fuel-droplet arrays at high temperatures. *Combustion and Flame*, 146 :391–406, 2006. citée en p. 29, 39
- [146] R.S. Miller, K. Harstad, and J. Bellan. Evaluation of equilibrium and non-equilibrium evaporation models for many-droplet gas-liquid flow simulations. *International Journal of Multiphase Flow*, 24 :1025–1055, 1998. citée en p. 92, 93
- [147] F. Moreau and R. Bazile. Evaporation of bi-component droplets in a heated, highly turbulent flow. *Experiments in Fluids*, pages 1–12. citée en p. 94
- [148] M. Mortensen and R.W. Bilger. Derivation of the conditional moment closure equations for spray combustion. *Combustion and Flame*, 156 :62–72, 2009. citée en p. 58
- [149] M. Nakamura, F. Akamatsu, R. Kurose, and M. Katsuki. Combustion mechanism of liquid fuel spray in a gaseous flame. *Physics of Fluids*, 17 :123301, 2005. citée en p. 43
- [150] S. Navarro-Martinez, A. Kronenburg, and F. Mare. Conditional Moment Closure for Large Eddy Simulations. *Flow, Turbulence and Combustion*, 75 :245–274, 2005. citée en p. 58
- [151] V. Nayagam. Activation energy asymptotics for methanol droplet extinction in microgravity. *Combustion and Flame*, 160 :2638–2640, 2013. citée en p. 35, 169
- [152] V. Nayagam, D. L. Dietrich, P. V. Ferkul, M. C. Hicks, and F. A. Williams. Can cool flames support quasi-steady alkane droplet burning? *Combustion and Flame*, 159 :3583–3588, 2012. citée en p. 29, 31
-

- [153] A. Neophytou and E. Mastorakos. Simulations of laminar flame propagation in droplet mists. *Combustion and Flame*, 156 :1627–1640, 2009. citée en p. [39](#), [40](#)
- [154] A. Neophytou, E. Mastorakos, and R.S. Cant. DNS of spark ignition and edge flame propagation in turbulent droplet-laden mixing layers. *Combustion and Flame*, 157 :1071–1086, 2010. citée en p. [53](#)
- [155] F. Nicoud and F. Ducros. Subgrid-scale stress modelling based on the square of the velocity gradient tensor. *Flow, Turbulence and Combustion*, 62 :183–200, 1999. citée en p. [73](#), [200](#)
- [156] T. Niioka, S. Hasegawa, T. Tsukamoto, and J. Sato. Diffusion-flame extinction of liquid fuel at elevated pressures. *Combustion and Flame*, 86 :171–178, 1991. citée en p. [36](#)
- [157] C. W. Oseen. *Hydrodynamik*. Leipzig, 1927. citée en p. [82](#), [83](#)
- [158] S. Osher and R. P. Fedkiw. Level set methods : An overview and some recent results. *Journal of Computational Physics*, 169 :463–502, 2001. citée en p. [49](#)
- [159] C. Pichard, Y. Michou, C. Chauveau, and I. Gokalp. Average droplet vaporization rates in partially pre-vaporized turbulent spray flames. *Proceedings of the Combustion Institute*, 29 :527–533, 2002. citée en p. [47](#)
- [160] C. Poelma, J. Westerweel, and G. Ooms. Particle-fluid interactions in grid-generated turbulence. *Journal of Fluid Mechanics*, 589 :315–351, 2007. citée en p. [25](#)
- [161] T. Poinso and S. Lele. Boundary conditions for direct simulations of compressible viscous flows. *Journal of Computational Physics*, vol.101 :104–129, 1992. citée en p. [94](#), [200](#)
- [162] T. Poinso and D. Veynante. *Theoretical and Numerical Combustion*. Third Edition (www.cerfacs.fr/elearning), 2011. citée en p. [6](#), [23](#), [33](#), [39](#), [40](#), [59](#), [72](#), [202](#), [205](#), [218](#)
- [163] Daniel N. Pope and George Gogos. Numerical simulation of fuel droplet extinction due to forced convection. *Combustion and Flame*, 142 :89–106, 2005. citée en p. [35](#), [36](#), [169](#), [170](#), [171](#)
- [164] S. B. Pope. Pdf methods for turbulent reactive flows. *Progress in Energy and Combustion Science*, 19 :119–192, 1985. citée en p. [56](#), [57](#)
- [165] J. Pozorski and S. V. Apte. Filtered particle tracking in isotropic turbulence and stochastic modeling of subgrid-scale dispersion. *International Journal of Multiphase Flow*, 35 :118–128, 2009. citée en p. [55](#)
- [166] C. Presser. Benchmark experimental database for multiphase combustion model input and validation : A users Follow-Up. 2007. citée en p. [48](#)
- [167] V. Raghavan, V. Babu, T. Sundararajan, and R. Natarajan. Flame shapes and burning rates of spherical fuel particles in a mixed convective environment. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 48 :5354–5370, 2005. citée en p. [32](#)
- [168] R. H. Rangel and W. A. Sirignano. An evaluation of the point-source approximation in spray calculation. *Numerical Heat Transfer, Part A : Applications*, 16 :37–57, 1989. citée en p. [78](#), [114](#), [115](#), [151](#)
- [169] W. E. Ranz and W. R. Marshall. Evaporation from drops. *Chem. Eng. Prog.*, 48 :173, 1952. citée en p. [90](#), [165](#)
- [170] J. Reveillon. Direct numerical simulation of sprays : Turbulent dispersion, evaporation and combustion. In Daniele L. Marchisio and Rodney O. Fox, editors, *Multiphase Reacting Flows : Modelling and Simulation*, volume 492, pages 229–269. Springer Vienna, Vienna. citée en p. [40](#), [181](#), [182](#)
- [171] J. Reveillon and F.X. Demoulin. Evaporating droplets in turbulent reacting flows. *Proceedings of the Combustion Institute*, 31 :2319–2326, 2007. citée en p. [53](#)
- [172] J. Réveillon and L. Vervisch. Analysis of weakly turbulent diluted-spray flames and spray combustion regimes. *Journal of Fluid Mechanics*, 537 :317–347, 2005. citée en p. [50](#), [51](#), [52](#)
- [173] O. Reynolds. On the dynamical theory of incompressible viscous fluids and the determination of the criterion. *Phil. Trans. R. Soc. London A*, 186 :123–164, 1895. citée en p. [71](#)
- [174] L. F. Richardson. *Weather Prediction by Numerical Process*. Cambridge University Press, cambridge edition, 1922. citée en p. [66](#)
- [175] J. Rocchi. Modèle de combustion turbulente non-prémélangée en les. In *CRCT - communication*, 2013. citée en p. [205](#), [206](#)

-
- [176] M. Sanjosé, T. Lederlin, L. Gicquel, B. Cuenot, H. Pitsch, N. García-Rosa, R. Lecourt, and T. Poinsot. LES of two-phase reacting flows. In *Proceedings of the Summer Program*, pages 251–263. Center for Turbulence Research, NASA Ames/Stanford Univ., 2008. citée en p. [48](#)
- [177] S. Sazhin. Advanced models of fuel droplet heating and evaporation. *Progress in Energy and Combustion Science*, 32 :162–214, 2006. citée en p. [91](#), [92](#)
- [178] S. S. Sazhin, A. E. Elwardany, and M. R. Heikal. New approaches to the modelling of multi-component fuel droplet heating and evaporation. *6th International Workshop on Multi-Rate Processes and Hysteresis*, 2012. citée en p. [94](#)
- [179] L. Schiller and A. Nauman. A drag coefficient correlation. *VDI Zeitung*, 77 :318–320, 1935. citée en p. [83](#), [95](#)
- [180] R. Seiser, H. Pitsch, K. Seshadri, W.J. Pitz, and H.J. Gurran. Extinction and autoignition of n-heptane in counterflow configuration. *Proceedings of the Combustion Institute*, 28(2) :2029–2037, 2000. citée en p. [219](#)
- [181] A. Sengissen, J. F. Van Kampen, R. Huls, G. Stoffels, J. B. W. Kok, and T. Poinsot. Les and experimental studies of cold and reacting flows in a swirled partially premixed burner with and without fuel modulation. *Combustion and Flame*, 150 :40–53, 2007. citée en p. [61](#)
- [182] J.-M. Senoner. *Simulations aux grandes échelles de l'écoulement diphasique dans un brûleur aéronautique par une approche Euler-Lagrange*. PhD thesis, INP Toulouse, 2010. citée en p. [59](#), [61](#), [147](#)
- [183] J. Seo and K. Y. Huh. Analysis of combustion regimes and conditional statistics of autoigniting turbulent n-heptane sprays. *Proceedings of the Combustion Institute*, 33 :2127–2134, 2011. citée en p. [53](#)
- [184] J. Seo and K. Y. Huh. Lagrangian conditional statistics of turbulent n-heptane spray combustion in different injection conditions. *Proceedings of the Combustion Institute*, 34 :1687, 1695, 2012. citée en p. [53](#)
- [185] B. Sotorban and F. Mashayek. Modeling subgrid-scale effects on particles by approximate deconvolution. *Physics of Fluids*, 17 :081701, 2005. citée en p. [56](#)
- [186] P. Sierra. *Modeling the dispersion and evaporation of sprays in aeronautical combustion chambers*. PhD thesis, INP Toulouse, 2012. citée en p. [61](#), [162](#)
- [187] O. Simonin, P. Février, and Jérôme Laviéville. On the spatial distribution of heavy-particle velocities in turbulent flow : from continuous field to particulate chaos. *Journal of Turbulence*, 3 :40, 2002. citée en p. [78](#)
- [188] W. A. Sirignano. *Fluid dynamics and transport of droplets and sprays*. Cambridge University Press, 1999. citée en p. [32](#), [78](#), [85](#), [92](#), [113](#), [114](#), [115](#), [160](#)
- [189] W. A. Sirignano. Liquid-fuel burning with nonunitary lewis number. *Combustion and Flame*, 148 :177–186, 2007. citée en p. [93](#)
- [190] William A. Sirignano. Advances in droplet array combustion theory and modeling. *Progress in Energy and Combustion Science*, 42 :54–86, June 2014. citée en p. [36](#)
- [191] J. Smagorinsky. General circulation experiments with the primitive equations : 1. the basic experiment. *Monthly Weather Review*, 91 :99–164, 1963. citée en p. [73](#)
- [192] A.J. Smallbone, W. Liu, C.K. Law, X.Q. You, and H. Wang. Experimental and modeling study of laminar flame speed and non-premixed counterflow ignition of n-heptane. *Proceedings of the Combustion Institute*, 32 :1245–1252, 2009. citée en p. [181](#), [184](#), [201](#)
- [193] D. B. Spalding. The combustion of liquid fuels. In *4th Symp. (Int.) on Combustion*, pages 847–864. The Combustion Institute, Pittsburgh, 1953. citée en p. [85](#)
- [194] D. B. Spalding. Experiments on the burning and extinction of liquid fuel spheres. *Fuel*, 32 :169–185, 1953. citée en p. [32](#)
- [195] K. D. Squires and J. K. Eaton. Particle response and turbulence modification in isotropic turbulence. *Physics of Fluids A*, 2(7) :1191–1203, 1990. citée en p. [26](#)
- [196] G. Staffelbach, L. Y. M. Gicquel, and T. Poinsot. *Highly Parallel Large Eddy Simulations of Multiburner Configurations in Industrial Gas Turbines*, volume Complex Effects in LES, pages 325–336. Lecture Notes in Computational Science and Engineering, 2007. citée en p. [61](#)
- [197] R. Stauch, S. Lipp, and U. Maas. Detailed numerical simulations of the autoignition of single n-heptane droplets in air. *Combustion and Flame*, 145 :533–542, 2006. citée en p. [31](#), [158](#), [160](#)
-

- [198] R. Stauch and U. Maas. The auto-ignition of single n-heptane/iso-octane droplets. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 50 :3047–3053, 2007. citée en p. [31](#), [158](#), [160](#)
- [199] W. Sutherland. The viscosity of gases and molecular force. *Philosophical Magazine*, 5 :507–531, 1893. citée en p. [69](#)
- [200] T. Suzuki and H. Chiu. Multi droplet combustion on liquid propellants. In *Proceedings of the Ninth International Symposium on Space and Technology and Science*, pages 145–154, 1971. citée en p. [40](#)
- [201] T. Takeno, M. Murayama, and Y. Tanida. Fractal analysis of turbulent premixed flame surface. *Experiments in Fluids*, 10 :61–70, 1990. citée en p. [7](#), [218](#)
- [202] D. Thevenin, P. H. Renard, G. Fiechtner, J. Gord, and J. C. Rolon. Regimes of nonpremixed flame/vortex interaction. In *28th Symp. (Int.) on Combustion*, pages 2101–2108. The Combustion Institute, Pittsburgh, 2000. citée en p. [205](#)
- [203] S. Tonini and Gi. E. Cossali. A novel vaporisation model for a single-component drop in high temperature air streams. *International Journal of Thermal Sciences*, 75 :194–203, 2014. citée en p. [93](#)
- [204] D. Tyliczszak, A. Cavaliere and E. Mastorakos. LES/CMC of blow-off in a liquid fueled swirl burner. *Flow, Turbulence and Combustion*, 2013. citée en p. [5](#), [58](#), [197](#), [198](#), [208](#), [209](#), [210](#), [214](#), [215](#)
- [205] Markus Uhlmann. An immersed boundary method with direct forcing for the simulation of particulate flows. *Journal of Computational Physics*, 209 :448–476, 2005. citée en p. [49](#)
- [206] S. Ulzama and E. Specht. An analytical study of droplet combustion under microgravity : Quasi-steady transient approach. *Proceedings of the Combustion Institute*, 31 :2301–2308, 2007. citée en p. [31](#), [32](#)
- [207] A. Umemura. Spray group combustion. In Nasser Ashgriz, editor, *Handbook of Atomization and Sprays*, pages 299–313. Springer US, Boston, MA, 2011. citée en p. [36](#), [39](#), [43](#), [153](#)
- [208] A. Umemura and S. Takamori. Percolation theory for flame propagation in non- or less-volatile fuel spray : A conceptual analysis to group combustion excitation mechanism. *Combustion and Flame*, 141 :336–349, 2005. citée en p. [36](#), [37](#), [43](#), [228](#)
- [209] J. Urzay. A revised spray-combustion diagram of diffusion-controlled burning regimes in fuel-spray clouds. *Annual Research Briefs of the Center for Turbulence Research*, pages 193–198, 2011. citée en p. [42](#)
- [210] J. Urzay, H. Pitsch, and A. Linan. Source terms for calculations of vaporizing and burning fuel sprays with non-unity lewis numbers in gases with temperature-dependent thermal conductivities. citée en p. [93](#)
- [211] L. Valino. A Field Monte Carlo Formulation for Calculating the Probability Density Function of a Single Scalar in a Turbulent Flow. *Flow, Turbulence and Combustion*, 60 :157–172, 1998. citée en p. [57](#)
- [212] T. Veronika. Non-equilibrium diffusion combustion of a fuel droplet. *Acta Astronautica*, 75 :78–84, 2012. citée en p. [92](#)
- [213] B. Vieille, C. Chauveau, X. Chesneau, A. Odeode, and I. Gokalp. High-pressure droplet burning experiments in microgravity. *Symposium International on Combustion*, 26 :1259–1265, 1996. citée en p. [32](#)
- [214] F. Wang, B. Hu, and Y. Huang. A two-phase turbulent combustion model and its validation for spray flames. *Fuel*, 113 :280–286, 2013. citée en p. [60](#), [152](#)
- [215] L-P Wang and M. R. Maxey. Settling velocity and concentration distribution of heavy particles in homogeneous isotropic turbulence. *Journal of Fluid Mechanics*, 256 :27–68, 1993. citée en p. [26](#)
- [216] H. Watanabe, R. Kurose, S. M. Hwang, and F. Akamatsu. Characteristics of flamelets in spray flames formed in a laminar counterflow. *Combustion and Flame*, 148 :234–248, 2007. citée en p. [43](#)
- [217] H. Watanabe, R. Kurose, S. Komori, and H. Pitsch. Effects of radiation on spray flame characteristics and soot formation. *Combustion and Flame*, 152 :2–13, 2008. citée en p. [43](#)
- [218] J. F. Widmann and C. Presser. A benchmark experimental database for multiphase combustion model input and validation. *Combustion and Flame*, 129 :47–86, 2002. citée en p. [48](#)
- [219] C. R. Wilke. A viscosity equation for gas mixtures. *The Journal of Chemical Physics*, 18 :517–519, 1950. citée en p. [93](#)
- [220] F. A. Williams. *Combustion Theory*. Benjamin Cummings, Menlo Park, CA, 1985. citée en p. [75](#)
- [221] A. M. Wood, W. Hwang, and J. K. Eaton. Preferential concentration of particles in homogeneous and isotropic turbulence. *International journal of multiphase flow*, 31 :1220–1230, 2005. citée en p. [26](#)

- [222] G. Wu and W. A. Sirignano. Transient burning of a convective fuel droplet. *Combustion and Flame*, 157 :970–981, 2010. citée en p. [35](#)
- [223] G. Wu, W. A. Sirignano, and F. A. Williams. Simulation of transient convective burning of an n-octane droplet using a four-step reduced mechanism. *Combustion and Flame*, 158(6) :1171–1180, June 2011. citée en p. [35](#)
- [224] X. Wu, C. K. Law, and A. C. Fernandez-Pello. A unified criterion for the convective extinction of fuel particles. *Combustion and Flame*, 44 :113–124, 1982. citée en p. [35](#), [36](#), [169](#), [170](#)
- [225] X. Wu and P. Moin. Transitional and turbulent boundary layer with heat transfer. *Physics of Fluids*, 22 :085105, 2010. citée en p. [36](#), [170](#)
- [226] G. Xu, M. Ikegami, S. Honma, K. Ikeda, X. Ma, H. Nagaishi, D. L. Dietrich, and P. M. Struk. Inverse influence of initial diameter on droplet burning rate in cold and hot ambiances : a thermal action of flame in balance with heat loss. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 46 :1155–1169, 2003. citée en p. [32](#), [165](#), [166](#), [176](#), [177](#)
- [227] J. R. Yang and S. C. Wong. On the suppression of negative temperature coefficient (NTC) in autoignition of n-heptane droplets. *Combustion and Flame*, 132 :475–491, 2003. citée en p. [30](#), [159](#)
- [228] M.R.G. Zoby, S. Navarro-Martinez, A. Kronenburg, and A.J. Marquis. Evaporation rates of droplet arrays in turbulent reacting flows. *Proceedings of the Combustion Institute*, 33(2) :2117–2125, 2011. citée en p. [49](#)
- [229] M.R.G. Zoby, S. Navarro-Martinez, A. Kronenburg, and A.J. Marquis. Turbulent mixing in three-dimensional droplet arrays. *International Journal of Heat and Fluid Flow*, 32(3) :499–509, June 2011. citée en p. [49](#)