

CERFACS
CFD – Combustion



Tuteurs : Thierry POINSOT et Bénédicte CUENOT

Etude numérique de la propagation d'une flamme sous l'influence d'un film liquide de carburant sur la paroi

Rapport de stage de fin d'études

Gaëtan DESOUTTER

Septembre 2003

Ref : WN/CFD/03/82



**Ecole Nationale Supérieure d'Electrotechnique, d'Electronique,
d'Informatique, d'Hydraulique et des Télécommunications**

Résumé

Le développement des moteurs à injection directe essence (IDE) semble être une solution intéressante pour le compromis recherché suivant : faible consommation en carburant et limitation des émissions polluantes. Malheureusement, l'injection directe du carburant dans la chambre de combustion entraîne parfois des dépôts importants qui engendrent des émissions d'hydrocarbures imbrûlés (HC) inhabituelles. Dans la majorité des modes de fonctionnement des moteurs IDE et particulièrement pendant le démarrage du moteur, le jet de carburant impacte directement le piston créant ainsi un film liquide qui sera l'une des sources de productions de HC et de fumée. Actuellement, peu de travaux ont été menés afin d'étudier l'arrêt ou non de la combustion à l'approche du dépôt. En revanche, beaucoup de travaux ont porté sur l'interaction d'une flamme avec une paroi sèche. Au cours de ce stage, nous avons effectué des simulations numériques directes (DNS) de l'interaction flamme-paroi avec film liquide à l'aide du code de calcul NTMIX3D. L'objectif est de maîtriser les mécanismes de base qui entrent en jeu lors de l'interaction de la flamme avec le film liquide, en particulier l'évaporation du film à l'approche de la flamme et son impact sur la structure de la flamme. Nous avons pu aussi comparer les résultats de l'interaction flamme-paroi avec et sans film liquide de carburant.

Mots clés :

simulation numérique directe, flamme, film liquide, paroi

Remerciements

Je tiens à remercier Thierry Poinot pour m'avoir accueilli au sein de l'équipe CFD du CER-FACS.

Je remercie Bénédicte CUENOT qui m'a encadré pendant ce stage.

Je remercie enfin toute l'équipe CFD, permanents, thésards et post-doctorants pour leurs conseils et leur disponibilité.

Nomenclature

Symboles	Signification
0	initial
f	flamme
F	Fuel
g	Gaz
l	Liquide
ox	Oxygène
Q	coincement (Quenching en anglais)
ref	reference
S	interface liquide gaz

TAB. 1 – Convention des indices

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

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

Symbole	Signification
C_p	Capacité calorifique à pression constante
D	Coefficient de diffusion des espèces
D_{th}	Coefficient de diffusion thermique
ΔT	écart de température entre les gaz frais et les gaz brûlés
L	taille du domaine de calcul
λ	Conductivité thermique
p	Pression
R	Constante des gaz parfaits
ρ	Densité
S_l	Vitesse de flamme
T	Température
u	Vitesse
W	Masse molaire
Y_F	Fraction massique du Fuel
Y_{ox}	Fraction massique de l'oxydant

TAB. 3 – Convention des symboles généraux

Symbole	Signification
$\delta(t)$	Profondeur de pénétration de la chaleur dans le film liquide
E_{cond}	Energie fournie par conduction au film liquide
E_{film}	Energie nécessaire pour évaporer complètement le film liquide
E_{flamme}	Energie fournie par la flamme au film liquide
h	Épaisseur du film liquide
L_V	Chaleur latente de vaporisation
\dot{M}	Débit d'évaporation de Fuel à l'interface liquide gaz
ϕ_l	Flux de chaleur interfacial dans le liquide
ϕ_g	Flux de chaleur interfacial dans le gaz
S	Surface du film liquide
T_0	Température initiale des gaz frais et du film liquide
t_{cond}	Temps de conduction thermique dans le gaz
t_{cycle}	Temps de cycle moteur
t_{final}	Temps de fin de la simulation
t_{int}	Temps auquel la flamme interagit avec le film liquide
t_W	Temps de pénétration de la chaleur dans le film liquide
$(Y^F)_S$	Fraction massique de Fuel à l'interface liquide gaz

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

Introduction

0.1 Le CERFACS : Centre Européen de Recherche et de Formation Avancée en Calcul Scientifique

Le CERFACS, créé en 1987, est un laboratoire reconnu au niveau international dans le domaine du calcul scientifique à haute performance. Il héberge environ 100 chercheurs permanents et post-doctorants de toutes nationalités, ainsi que de nombreux stagiaires, doctorants et visiteurs.

Le CERFACS est constitué de cinq équipes de recherche :

- Climatologie,
- Traitement du signal,
- Electromagnétisme,
- Algorithmique et calcul parallèle,
- Mécanique des fluides numérique (CFD).

Cette dernière équipe est elle-même divisée en deux pôles de recherche : aérodynamique et combustion. Ce stage a été effectué au sein de l'équipe combustion dont les principales activités sont :

- la Simulation Numérique Directe (DNS) pour l'étude des interactions flamme/turbulence et flamme/paroi.
- la Simulation aux Grandes Echelles (LES) pour étudier le mélange et les instabilités de combustion.

0.2 Contexte d'études

Dans les moteurs à combustion interne, la transformation de l'énergie thermique (combustion) en énergie mécanique passe par la présence de parois avec lesquelles la flamme interagit. Le phénomène a déjà abondamment été traité dans la bibliographie [3]. L'interaction flamme paroi se déroule près des murs dans des zones de l'ordre de l'épaisseur de flamme laminaire si bien que la turbulence n'intervient pas directement. Par ailleurs, une flamme turbulente peut-être considérée localement laminaire lorsque le régime de combustion correspond à l'approche en flammelles, qui est une décomposition de la flamme plissée turbulente en une multitude de flammes laminaires. La compréhension du mécanisme d'interaction flamme paroi en régime laminaire est donc très utile pour l'approche du régime turbulent. C'est pourquoi, toutes nos simulations numériques d'interaction flamme-paroi ont été réalisées en régime laminaire.

Par ailleurs, dans le cas des moteurs à injection directe essence (IDE), le jet de carburant impacte directement le piston créant un film liquide avec lequel la flamme va interagir comme le montre le schéma 1 :

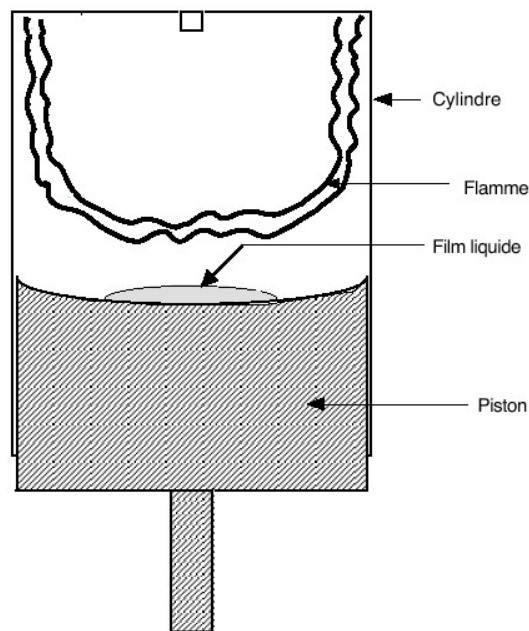


FIG. 1 – Dépôt d'un film liquide de carburant dans les moteurs à injection directe essence.

On ne sait pas comment se comporte la flamme à l'approche de ce dépôt puisque il n'existe pratiquement aucun travaux sur le sujet.

0.3 Objectifs du stage

La finalité de ce stage est de comprendre les mécanismes de bases de l'interaction flamme-paroi avec film liquide en réalisant des simulations numériques directes (DNS) sur une configuration très simple. On se limite en effet, à une simulation monodimensionnelle laminaire. La plus grosse partie du travail a consisté à réaliser un modèle théorique de film liquide et à le coder en tant que condition limite pour le code de calcul NTMIX3D. Ce rapport se décompose en 3 parties principales :

- Le chapitre 1 traite des bases de l'interaction flamme paroi sèche afin de pouvoir discerner les spécificités de l'interaction flamme-film liquide au chapitre 3.
- Le chapitre 2 présente le modèle théorique de film liquide que l'on a codé dans NTMIX3D.
- Le chapitre 3 compare les résultats de l'interaction flamme paroi avec et sans film liquide de carburant.

Chapitre 1

Bases de l'interaction flamme paroi

1.1 Introduction

Il existe trois configurations possibles d'interaction flamme laminaire paroi données par le schéma 1.1, page 7.

Les configurations du schéma 1.1 ne donnent pas lieu à la même valeur de la distance de coincement δ_Q . Par ailleurs, la configuration c) peut empêcher toute flamme de passer dans le tube si son rayon est plus petit que la distance de coincement de la flamme.

Au préalable à l'interaction flamme film liquide, on a réalisé une simulation numérique directe (DNS) d'un cas académique d'interaction entre une flamme monodimensionnelle laminaire et une paroi froide isotherme. Pour cela on a choisit une configuration HOQ puisque c'est la plus simple à simuler et la mieux étudié dans la littérature [3].

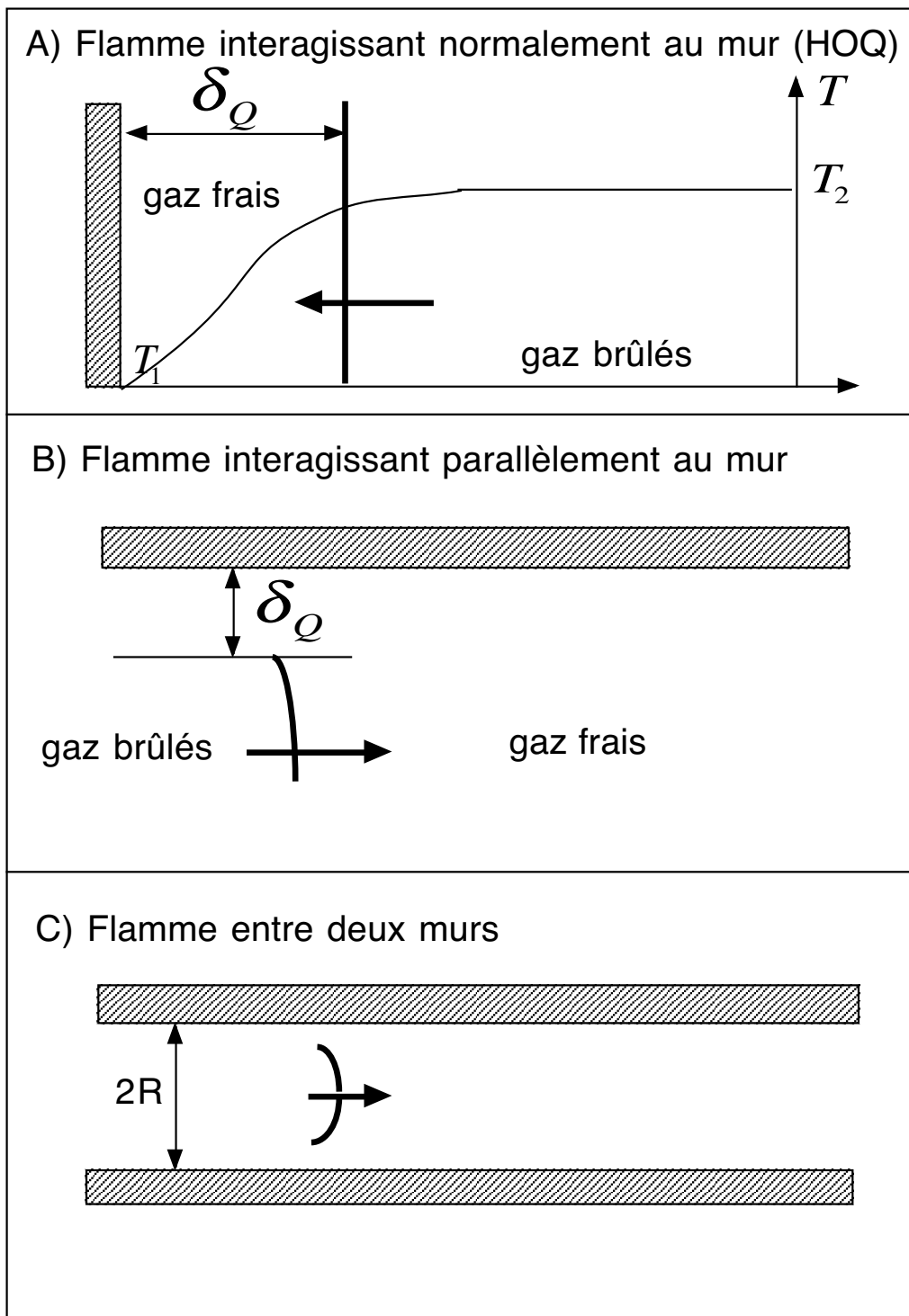


FIG. 1.1 – Configurations flamme laminaire-paroi.

1.2 Calcul monodimensionnel laminaire

1.2.1 Présentation du code de calcul NTMIX3D

NTMIX3D est un code compressible de simulation numérique directe (DNS) qui résout les équations de conservation de la mécanique des fluides ainsi que les équations de conservation des espèces avec un terme source de combustion. Ce terme source de combustion est calculé avec une chimie simple. Le schéma spatial est du 6eme ordre et le schéma temporel est du 3eme ordre de type Runge-Kutta (RK3). Il faut également savoir que NTMIX3D est un code adimensionnel et que tous les résultats présentés dans ce rapport ont été redimensionnés afin de les rendre exploitable.

1.2.2 Configuration et paramètres du calcul

D'après les différentes études menées sur l'interaction flamme paroi [3, 13], celle-ci est contrôlée au premier ordre par la thermique et seulement au second ordre par la chimie. C'est pourquoi dans notre calcul, on utilise une chimie simple à une étape et une espèce (avec une vitesse de flamme $S_L = 3.4m.s^{-1}$ et une épaisseur de flamme $\delta_L = 0.03mm$). Par ailleurs, la paroi ainsi que les gaz frais sont à la température de 300 K. Le calcul est réalisé dans une boîte monodimensionnelle de longueur $L=0.35$ mm avec 801 points de telle sorte que la flamme est bien résolue. La configuration du calcul est donnée sur la figure 1.2 :

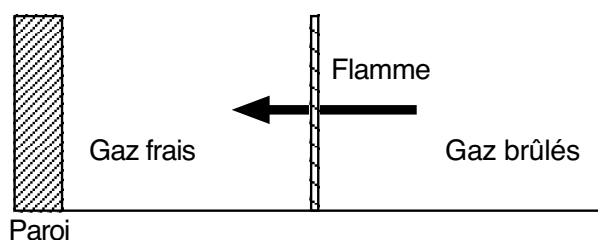


FIG. 1.2 – Configuration de l'interaction flamme paroi sèche et inerte

1.2.3 Résultats et mécanisme de l'interaction flamme paroi

Certains résultats sont donnés sans dimension pour des raisons d'interprétation physique. C'est le cas des distances, données en terme d'épaisseur caractéristique de flamme $d = \left(\frac{\lambda}{\rho C_p S_L}\right)^0$, des temps adimensionnés par le de temps de flamme $t_f = \frac{d}{S_L^0}$ et des flux de chaleur pariétaux donnés en terme de puissance surfacique de référence de la flamme $\phi_f = (\rho C_p S_L \Delta T)^0$.

Résultats : profils

Le taux de réaction de la flamme, la température ainsi que la fraction massique de fuel sont donnés pour différents temps, respectivement sur les figures 1.3,1.4,1.5. Sur les trois figures, la flamme se propage de la droite vers la gauche où se situe le mur.

D'après la figure. 1.3, on constate que lorsque la flamme arrive à une certaine distance du mur, elle commence à s'éteindre comme en atteste le taux de réaction. Par la suite, lorsque la flamme

est presque éteinte, on constate qu'elle s'éloigne du mur. Il existe donc une distance minimale, dite de coincement δ_Q entre le mur et la flamme, typique du mécanisme d'interaction flamme-paroi.

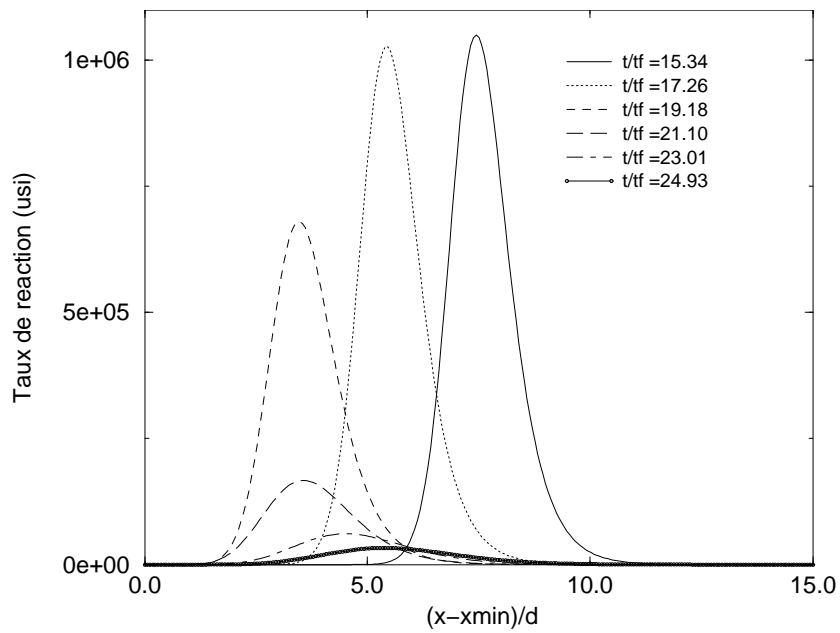


FIG. 1.3 – Taux de réaction en fonction de la distance à la paroi à différents moments de l'interaction.

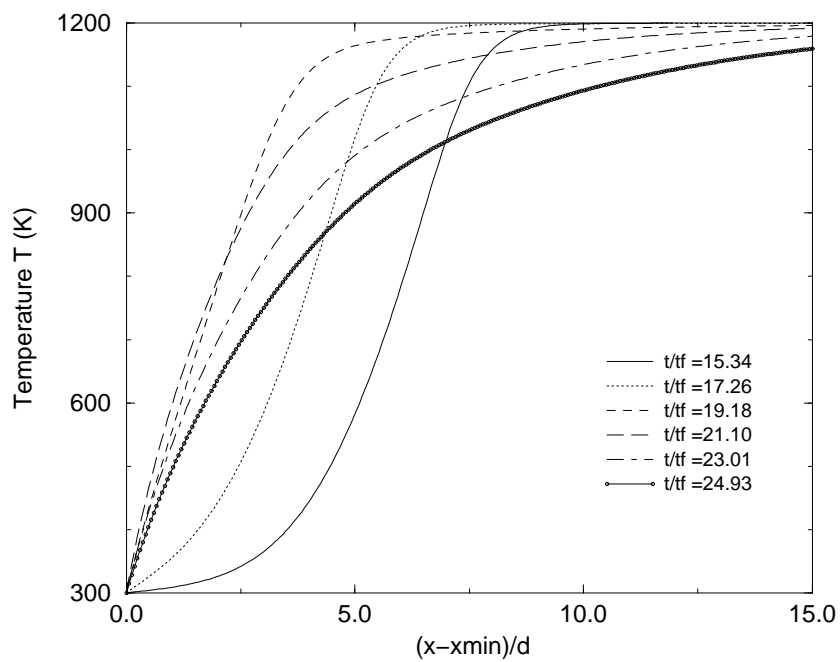


FIG. 1.4 – Température T en fonction de la distance à la paroi à différents moments de l'interaction.

D'après les figures 1.4 et 1.5, on peut en expliquer simplement le mécanisme. En effet, d'après la figure 1.4, on constate que lorsque la flamme s'approche du mur froid, il existe un gradient de température à la paroi très important puisque la paroi est maintenue à température constante. Ce gradient est à l'origine du flux thermique à la paroi. La flamme perd donc de la chaleur et finit par quasiment s'éteindre. Par la suite, les gaz frais restant près de la paroi diffusent vers la flamme comme en atteste la figure 1.5. Ainsi, la flamme ne s'éteint pas complètement mais recule.

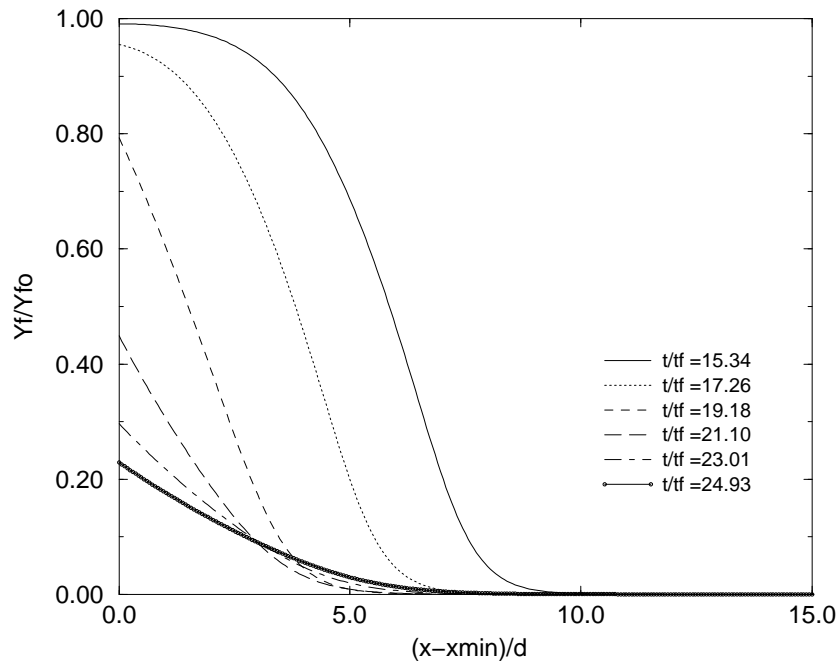


FIG. 1.5 – Fraction massique de fuel adimensionné par la fraction massique de fuel initiale dans les gaz frais en fonction de la distance à la paroi à différents moments de l'interaction.

Résultats : évolutions temporelles

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

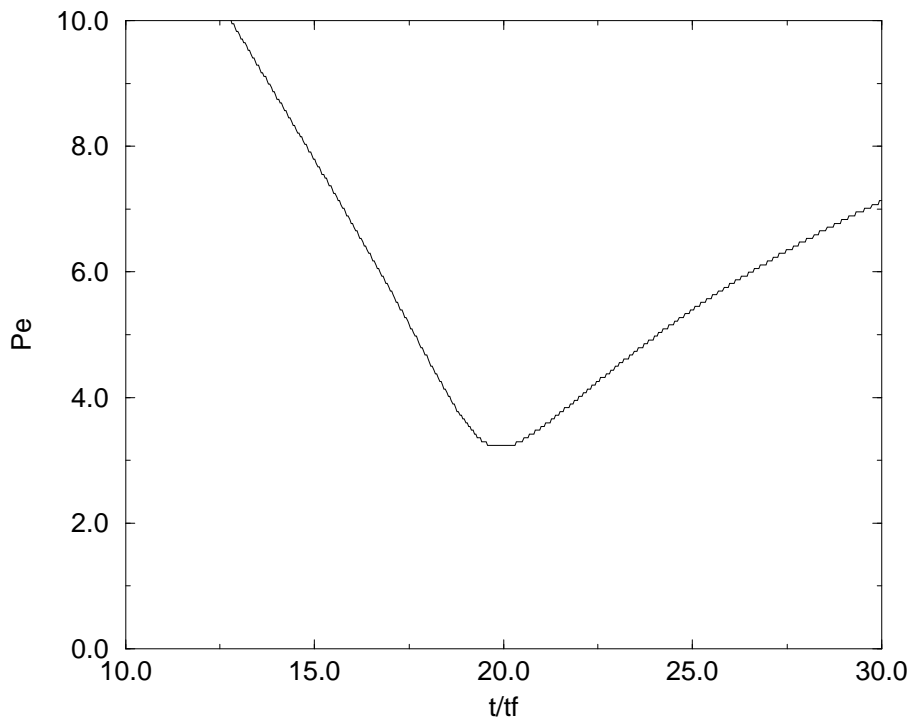


FIG. 1.6 – $Pe = \frac{\delta}{d}$ en fonction du temps réduit.

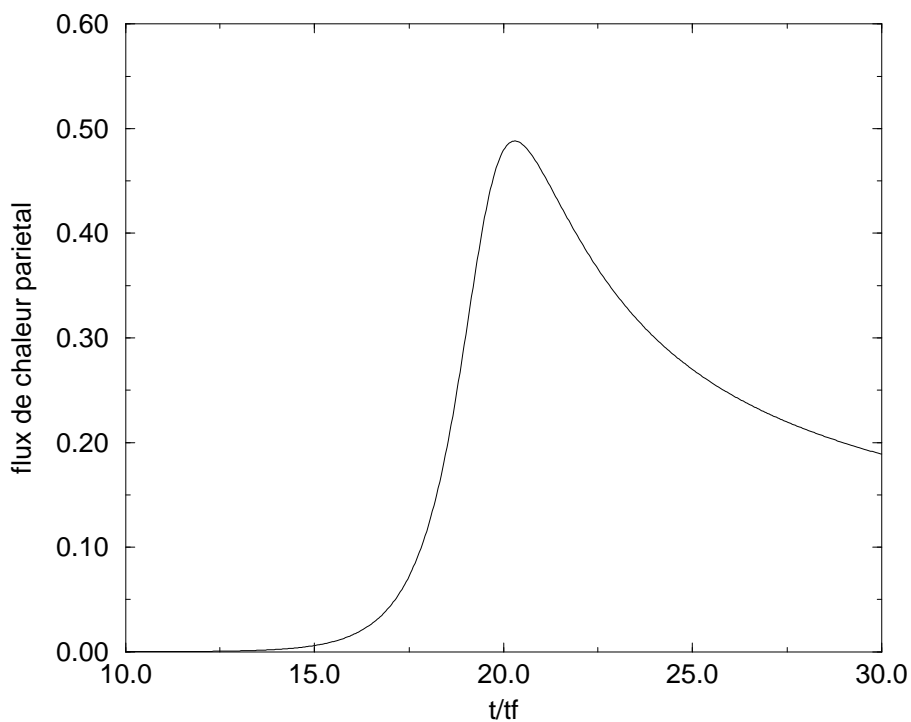


FIG. 1.7 – Flux de chaleur pariétal réduit $\phi = \frac{\varphi}{\varphi_f}$ en fonction du temps réduit.

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

Ces résultats sont cohérents avec les résultats trouvés dans la bibliographie [3, 13] puisque des simulations numériques d'interaction flamme paroi réalisées pour différents fuels montrent que la distance de coincement est toujours à peu près identique avec $Pe_Q = \frac{\delta_Q}{d} \approx 3$.

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

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

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

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

Des DNS d'interactions flamme paroi en régime turbulent ont déjà été réalisées dans la bibliographie [3]. Elles ont permis de dégager au moins un résultat et un mécanisme associé : Bien que localement, l'interaction puisse toujours être rapportée à une configuration laminaire, des structures pariétales turbulentes peuvent projeter la flamme sur le mur alors que des poches de gaz frais peuvent être aspirées dans les gaz brûlés. Il en résulte globalement, des distances de coincement sont plus petites et des flux de chaleur pariétaux plus élevés.

Chapitre 2

Aspects théoriques de l'interaction flamme film liquide

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

2.1 Configuration et hypothèses

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

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

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

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

- Géométrie monodimensionnelle
- Absence de turbulence motivée par le fait que l'on se trouve en proche paroi
- Film liquide monocomposant
- Paroi isotherme
- Pas d'effets de paroi sur l'évaporation (si la température de paroi T_p dépasse la température d'ébullition du liquide, des bulles de gaz apparaissent dans le liquide, allant même jusqu'à la formation d'un film gazeux entre la paroi et le liquide, changeant l'évaporation du film liquide [1, 6])
- Conduction pure (pas de rayonnement thermique)
- Configuration d'interaction flamme-paroi HOQ

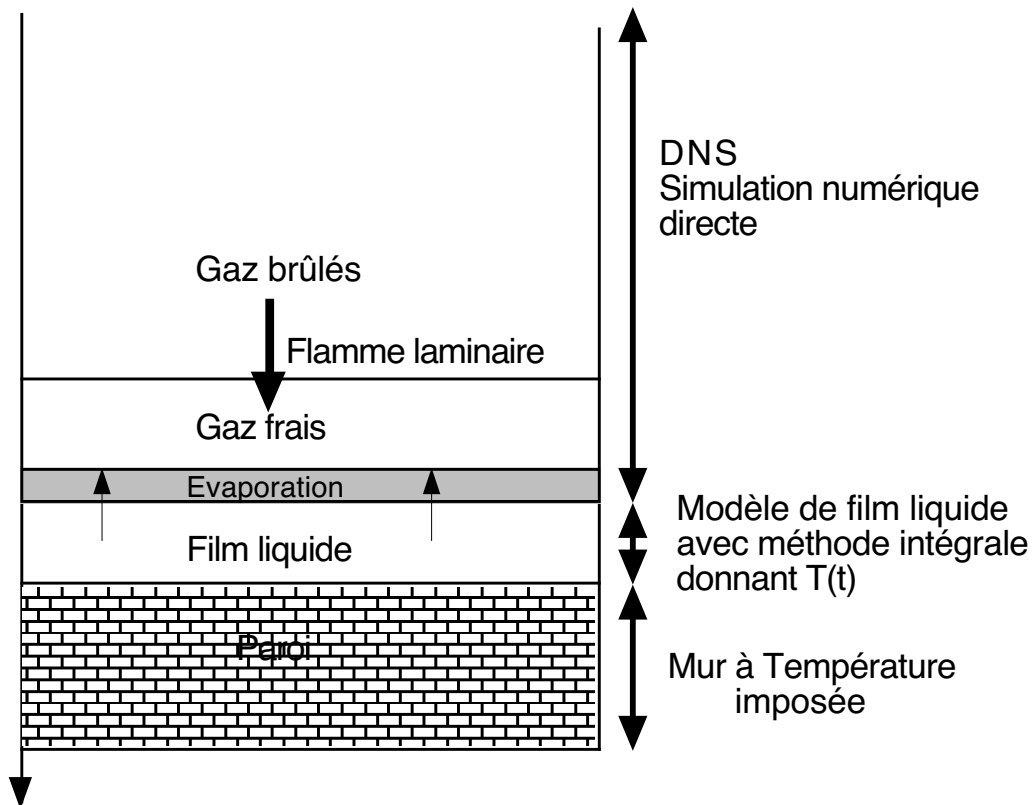


FIG. 2.1 – Configuration de l'interaction flamme paroi avec film liquide

2.2 Approche qualitative de l'interaction flamme film liquide

2.2.1 Scénario envisagé

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

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

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

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

2.2.2 Analyse des grandeurs caractéristiques mises en jeu

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

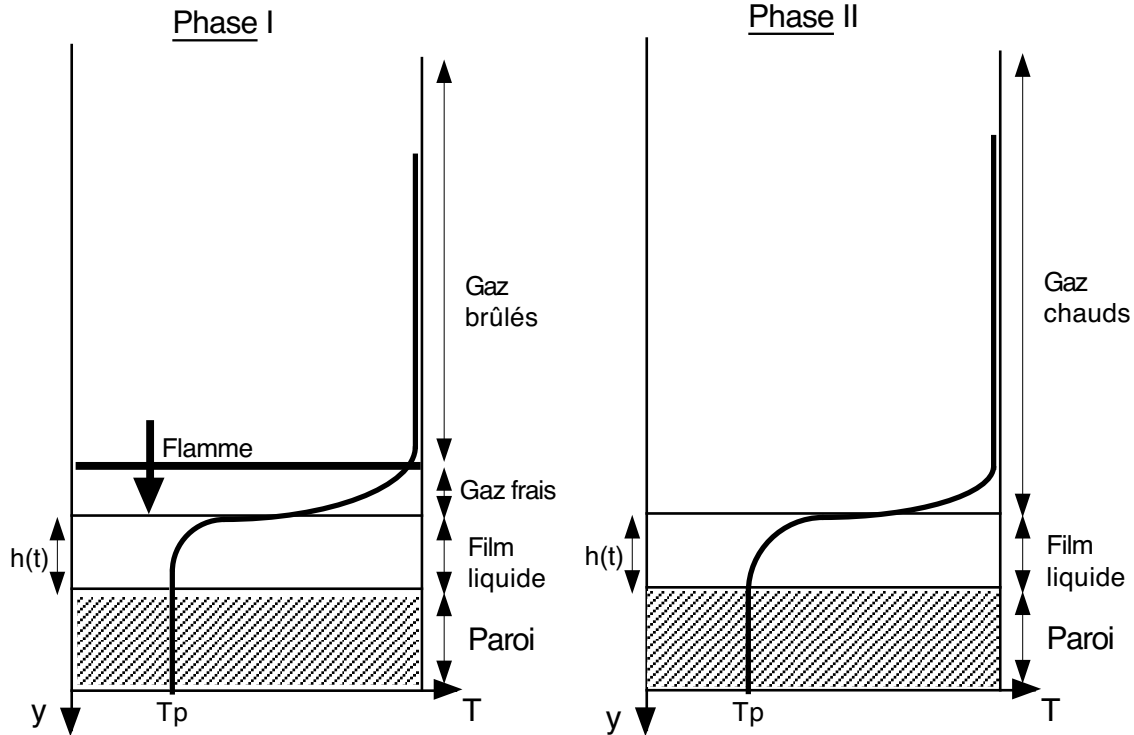


FIG. 2.2 – les deux phases de l'interaction flamme film liquide

Considérons tout d'abord différents temps caractéristiques :

– Temps caractéristique de pénétration de la chaleur dans le film liquide :

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

– Temps caractéristique de flamme :

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

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

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

Considérons maintenant l'aspect énergétique de l'interaction :

– Energie nécessaire pour vaporiser le film liquide :

$$E_{film} = Sh\rho L_v \text{ avec } \begin{cases} h \approx 20\mu\text{m} \\ L_v \approx 36,45 \cdot 10^4 \text{J} \cdot \text{K}_g^{-1} \end{cases} \implies \frac{E_{film}}{S} \approx 4,94 \text{KJ} \cdot \text{m}^{-2}$$

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

$$E_{flamme} = S\rho C_p \Delta T S_l t_f \text{ avec } \begin{cases} t_f \approx 2 \cdot 10^{-4} \text{s} \\ \rho C_p \Delta T S_l \approx 1400 \text{K}_J \cdot \text{m}^{-2} \cdot \text{s}^{-1} \end{cases} \implies \frac{E_{flamme}}{S} \approx 0,28 \text{KJ} \cdot \text{m}^{-2}$$

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

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

- Evaluation de l'énergie fournie au film par conduction thermique (film de $0,02 \text{ mm}$) : (en négligeant les pertes thermiques dans le gaz et surtout à travers la paroi)
Pour ce faire, il convient d'évaluer le flux thermique des gaz chauds vers le film liquide (phase II de l'interaction) sachant que la configuration au cours de cette phase se rapproche de la figure. 2.3 :

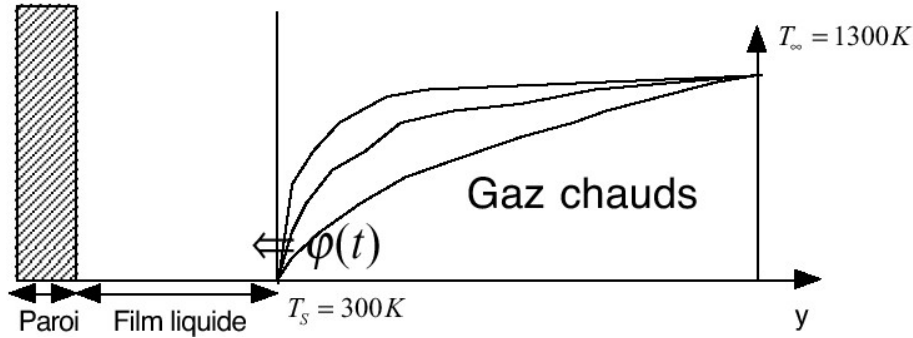


FIG. 2.3 – Flux thermique du gaz vers le liquide au cours de la phase II

D'après la littérature [11], le flux thermique au cours du temps pour une telle configuration peut être évalué par :

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

Et donc,

$$\frac{E_{cond}}{S} = \int_0^{t_{cond}} \varphi(t) dt = 5,25\sqrt{t_{cond}} \text{ avec } t_{cond} \leq t_{cycle} \leq 0,1s \text{ cad } \frac{E_{cond}}{S} \leq 1,66 KJ.m^{-2}$$

Par conséquent : $E_{cond} \approx E_{film}$

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

2.3 Modélisation du film liquide

2.3.1 Equations intervenant dans la phase liquide

Dans nos simulations, on ne cherche pas à résoudre la phase liquide puisque la seule chose qui nous intéresse est de simuler l'interaction flamme film liquide dans le gaz. En effet, cela

nécessite uniquement que le film liquide de carburant s'évapore correctement en fonction de la fraction massique de fuel (heptane dans nos simulations) et de la température à l'interface liquide-gaz. Dans NTMIX3D, le film liquide ne constitue qu'une condition limite pour le gaz au même titre qu'un mur isotherme.

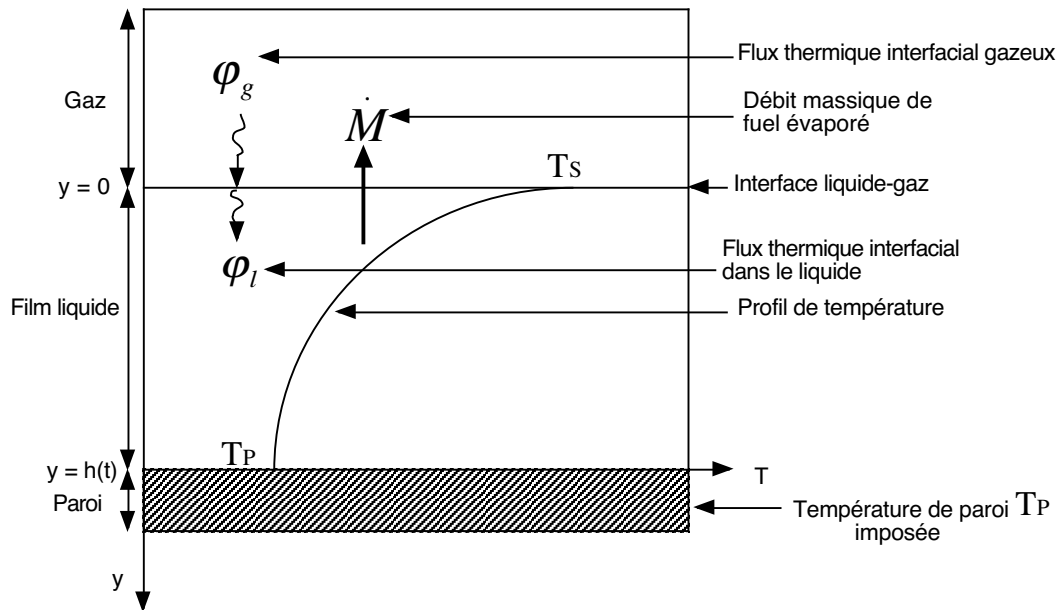


FIG. 2.4 – schéma représentatif de l'évaporation

Pour ce faire, on fait les hypothèses simplificatrices suivantes :

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

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

Conditions de saturation à la surface du film

Grâce à l'hypothèse de saturation, la continuité du flux de masse à travers l'interface liquide-gaz \dot{M} (évaporation) s'écrit [9] (S désigne l'interface liquide-gaz) :

$$\begin{aligned}
 \dot{M} &= \rho u \\
 &= \rho u (Y^F)_S - \rho D (\nabla Y^F)_S \\
 \dot{M} &= - \frac{\rho D (\nabla Y^F)_S}{1 - (Y^F)_S}
 \end{aligned} \tag{2.1}$$

Pour obtenir le débit massique de fuel évaporé \dot{M} , il faut donc connaître la fraction massique de fuel à l'interface liquide-gaz $(Y^F)_S$.

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

$$Y_F = \frac{\rho_F}{\rho} = \frac{n_F W_F}{n W} = \frac{P_F W_F}{P W} \quad (2.2)$$

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

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

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

$$(Y^F)_S = \frac{P_{ref} W_F}{P_S W} \exp \left[\frac{L_V}{R} \left(\frac{1}{T_{ref}} - \frac{1}{T_s} \right) \right] \quad (2.4)$$

Il suffit donc de calculer le profil de température instationnaire dans le film liquide pour que le modèle d'évaporation soit fermé.

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

Pour calculer le profil de température instationnaire dans le film liquide, on se propose d'utiliser une méthode intégrale [11] couplée avec l'équation de continuité des flux de chaleur à l'interface liquide gaz.

Le principe de la méthode intégrale est d'approximer la température dans le film par un polynôme dont l'ordre dépend du nombre de degrés de liberté du problème. Etant donné que l'équation différentielle de la chaleur est du premier ordre en temps et du deuxième ordre en espace, le problème possède 3 degrés de liberté. Par ailleurs, si on remplace le polynôme de température dans l'équation locale de la chaleur, on constate que les degrés pairs du polynôme sont tous nuls. Le polynôme est donc de la forme : $T(y) = a(t) + b(t)y + c(t)y^3$. On détermine ensuite les coefficients du polynôme grâce aux conditions limites et à l'équation intégrale. 2.5.

$$\int_0^{h(t)} \frac{\partial T}{\partial t} dy = D_{th} \int_0^{h(t)} \frac{\partial^2 T}{\partial y^2} dy \quad (2.5)$$

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

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

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

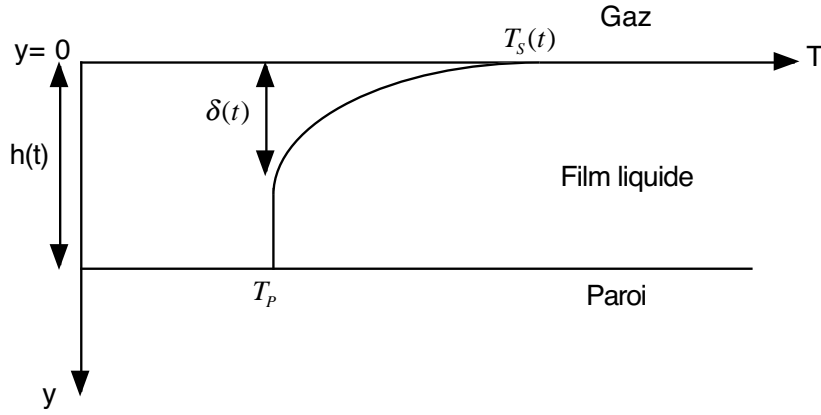


FIG. 2.5 – profil de température pour $\delta(t) < h(t)$

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

La configuration de ce cas est donnée par la figure. 2.5 :

Les conditions aux limites sont donc :

$$CL \begin{cases} T(\delta(t)) = T_p \\ \frac{\partial T}{\partial y} [y = \delta(t)] = 0 \\ -\lambda_l \frac{\partial T}{\partial y} [y = 0] = \phi_l(t) = \phi_g(t) + \dot{M}L_V \end{cases} \quad (2.6)$$

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

$$T(y) = T_p + \frac{2\phi_l(t)\delta(t)}{3\lambda_l} - \frac{\phi_l(t)y}{\lambda_l} + \frac{\phi_l(t)y^3}{3\lambda_l\delta^2(t)} \quad (2.7)$$

En remplaçant ce polynôme 2.7 dans l'équation intégrale 2.5, on obtient l'équation différentielle 2.8 qui ferme le problème :

$$\frac{d}{dt} [\phi_l(t)\delta^2(t)] = 4D_{th}\phi_l(t) \quad (2.8)$$

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

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

Les conditions aux limites sont donc :

$$CL \begin{cases} T(h(t)) = T_p \\ -\lambda_l \frac{\partial T}{\partial y} [y = 0] = \phi_l(t) = \phi_g(t) + \dot{M}L_V \end{cases} \quad (2.9)$$

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

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

$$T(y') = T_p - \left[\frac{3[T_p - T_S(t)]\lambda_l - h(t)\phi_l'(t)}{2h(t)\lambda_l} \right] y' + \left[\frac{[T_p - T_S(t)]\lambda_l - h(t)\phi_l'(t)}{2h(t)^3\lambda_l} \right] y'^3 \quad (2.10)$$

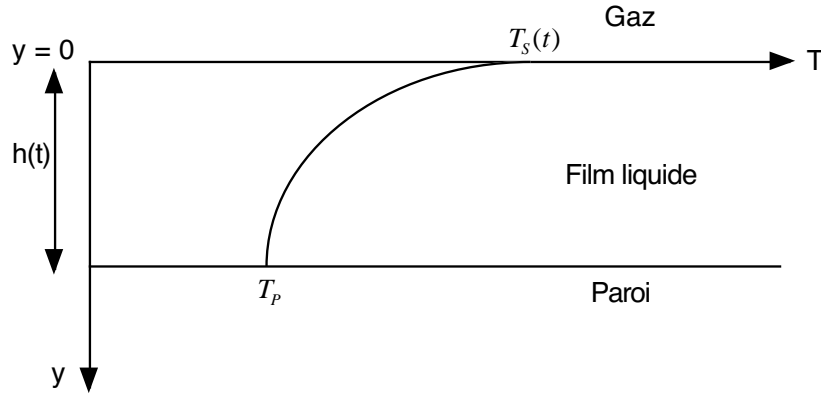


FIG. 2.6 – profil de température pour $\delta(t) = h(t)$

En remplaçant le polynôme 2.10 dans l'équation intégrale 2.5, et après avoir effectué le changement $\varphi_l'(t) = -\varphi_l(t)$, on obtient l'équation différentielle 2.11 qui ferme le problème :

$$\frac{h(t)^2 \lambda_l}{12D_{th}} \frac{d}{dt} \left(\frac{-h(t)\varphi_l(t)}{\lambda_l} + 5T_S(t) \right) = [T_P - T_S(t)] \lambda_l + h(t)\varphi_l(t) \quad (2.11)$$

Equation gouvernant l'épaisseur $h(t)$ du film liquide :

Comme nous l'avons dit, le calcul de l'épaisseur $h(t)$ du film liquide n'est pas couplé avec le calcul de la température de surface du film liquide T_S . La variation de $h(t)$ est donnée par l'équation 2.12 :

$$\frac{dh(t)}{dt} = -\frac{\dot{M}}{\rho_l} \quad (2.12)$$

2.3.2 Organigramme théorique des différentes étapes du modèle de film liquide

L'organigramme 2.7 indique de manière théorique, le séquençage des différentes phases du modèle de film liquide. t_W désigne le temps de pénétration de la chaleur dans le film liquide. Dans la pratique, nous verrons au chapitre suivant que les choses sont simplifiées, et même différentes dans le cas où la température de paroi T_P est supérieure à la température initiale T_0 des gaz frais et du film liquide.

Système d'équations couplées de la phase liquide :

Le système d'équations du tableau. 2.1 récapitule le modèle de film liquide.

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

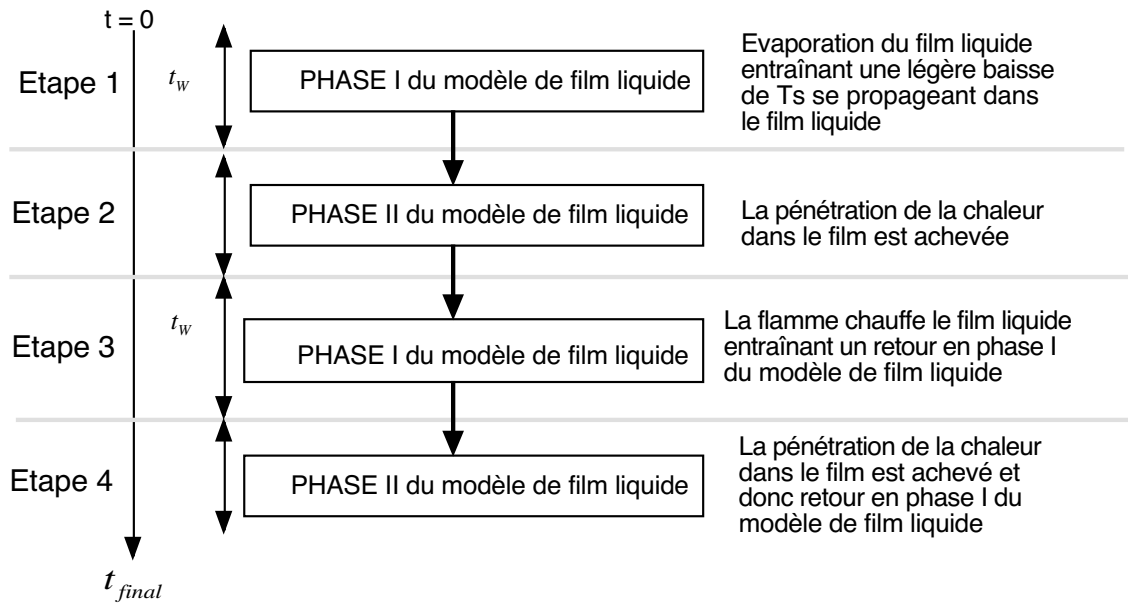


FIG. 2.7 – Organigramme décrivant le déroulement théorique du calcul d'interaction flamme paroi avec film liquide.

	$\delta(t) < h(t)$	$\delta(t) = h(t)$
couplées entre elles	$T_S(t) = T_P + \frac{2\phi_l(t)\delta(t)}{3\lambda_l}$	$\frac{h(t)^2\lambda_l}{12D_{th}} \frac{d}{dt} \left(\frac{-h(t)\phi_l(t)}{\lambda_l} + 5T_S(t) \right) = [T_P - T_S(t)]\lambda_l + h(t)\phi_l(t)$
	$\frac{d}{dt} [\phi_l(t)\delta^2(t)] = 4D_{th}\phi_l(t)$	$Y_S^F = \frac{P_{ref}W_F}{P_S W} \exp \left[\frac{L_V}{R} \left(\frac{1}{T_{ref}} - \frac{1}{T_S} \right) \right]$ $\phi_l(t) = \phi_g(t) + ML_V$ $\dot{M} = -\frac{\rho D \nabla Y_S^F}{1 - Y_S^F}$
indépendante		$\frac{dh(t)}{dt} = -\frac{\dot{M}}{\rho_l}$

TAB. 2.1 – Equations gouvernant le film liquide

2.3.3 Algorithme du modèle de film liquide codé dans NTMIX3D

L'algorithme 2.8 indique de manière schématique la façon dont est codé le modèle de film liquide dans NTMIX3D et son couplage avec la flamme.

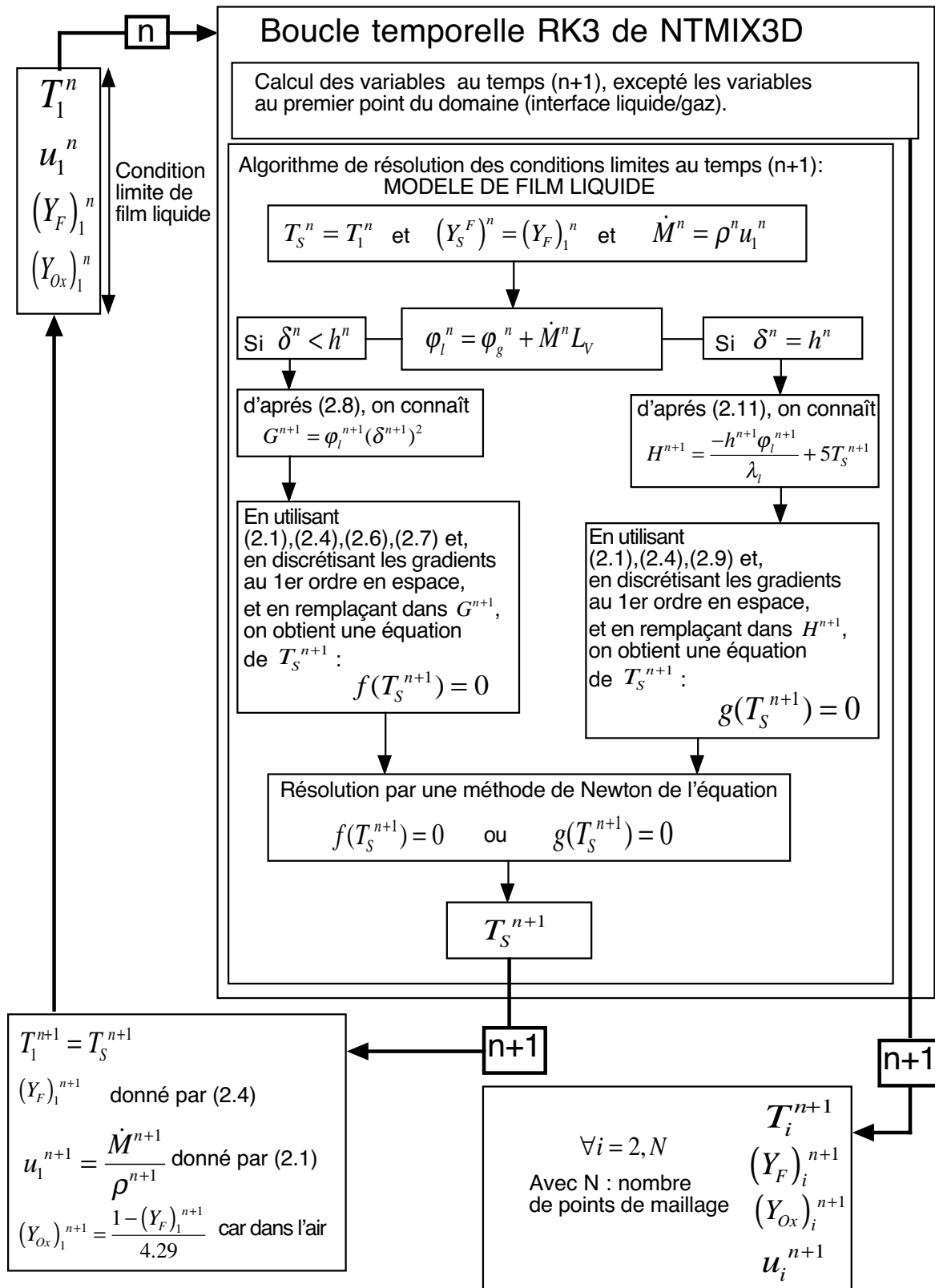


FIG. 2.8 – Algorithme schématique du modèle de film liquide codé dans NTMIX3D.

Chapitre 3

Résultats comparatifs

Nous allons maintenant comparer les résultats de l'interaction flamme-paroi avec film liquide obtenus à l'aide du code de calcul NTMIX3D dans lequel on a inclus notre modèle de film liquide sous forme d'une condition limite. Pour ce faire, nous allons tout d'abord effectuer un nouveau calcul d'interaction flamme-paroi sèche avec les mêmes paramètres que ceux utilisés pour les différents calculs d'interaction flamme film liquide. Ce calcul servira alors de référence pour les différents calculs d'interaction flamme film liquide, ce qui permettra de faire ressortir les différences entre les deux interactions. La simulation numérique de l'interaction flamme paroi avec film liquide sera réalisée pour quatre cas :

- Une température d'interface T_S constante et une température de paroi T_P de 300K
- Une température d'interface T_S variable et une température de paroi T_P de 300K afin de mesurer l'impact de la flamme sur la température d'interface T_S
- Une température d'interface T_S variable et une température de paroi T_P de 350K afin de mesurer l'impact de la température de paroi T_P sur la l'évaporation et la distance de coïncement δ_Q
- Une température d'interface T_S variable et une température de paroi T_P de 370K

3.1 Paramètres des différents calculs

3.1.1 Chimie

On utilise de l'heptane comme fuel pour les raisons déjà citées au chapitre précédent. On utilise un schéma cinétique à une étape et deux espèces (fuel et oxydant) pour permettre le calcul éventuel d'une flamme de diffusion qui peut apparaître en plus de la flamme de prémélange. Par ailleurs, comme un schéma cinétique à une étape ne permet pas de simuler le fait qu'une flamme s'éteint progressivement lorsque la richesse du mélange devient trop forte, on utilise un facteur préexponentiel qui dépend de la richesse. Ce facteur est choisi de telle manière que la vitesse de flamme de prémélange de l'heptane en fonction de la richesse corresponde aux mesures expérimentales. Ainsi, lorsque la flamme atteindra les forts gradients de richesse produits par le film qui s'évapore, elle gardera un comportement physique. La nouvelle cinétique est validée dans un nouveau calcul d'interaction flamme paroi sèche. Cependant un schéma cinétique multi-étapes (4 étapes Jones et Lindstedt) qui permet une meilleure courbe de vitesse de flamme en fonction de la richesse du mélange devra être envisagé dans la suite à donner à ce stage.

3.1.2 Maillage et domaine de calcul

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

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

Par ailleurs, on utilise un maillage monodimensionnel de 1201 points afin que la flamme soit bien résolue, puisque son épaisseur $\delta_L \approx 0.5mm$.

3.1.3 Conditions limites

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

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

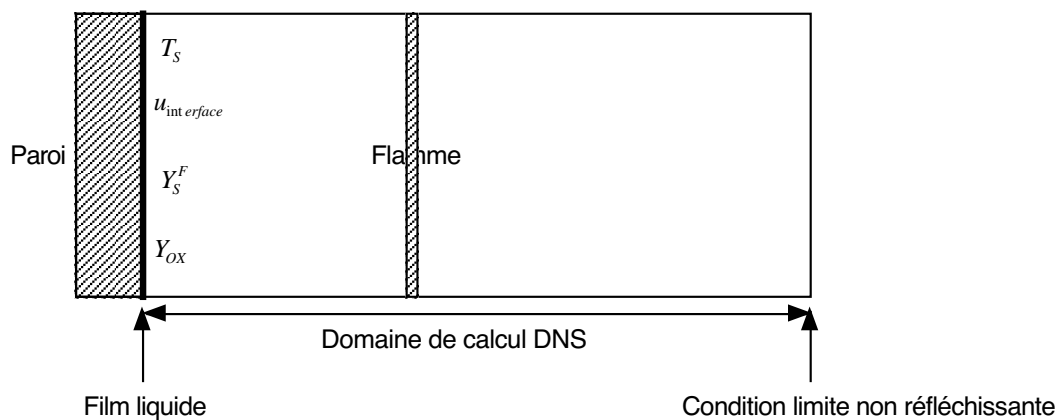


FIG. 3.1 – Conditions limites de l'interaction flamme film liquide

On peut résumer la condition limite de film liquide par :

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

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

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

$$Y_{OXinterface} = \frac{1 - Y_S^F}{4.29} \quad (3.4)$$

3.1.4 Condition initiale

Dans tous les cas de figure, il s'agit d'une flamme prémélangée instationnaire d'heptane calculée selon un profil Echekki Ferziger [12], et dont la richesse est $\phi = 0.8$ et les gaz frais sont à $T=300K$.

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

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

Les différents champs de la condition initiale sont donnés sur la figure. 3.2 :

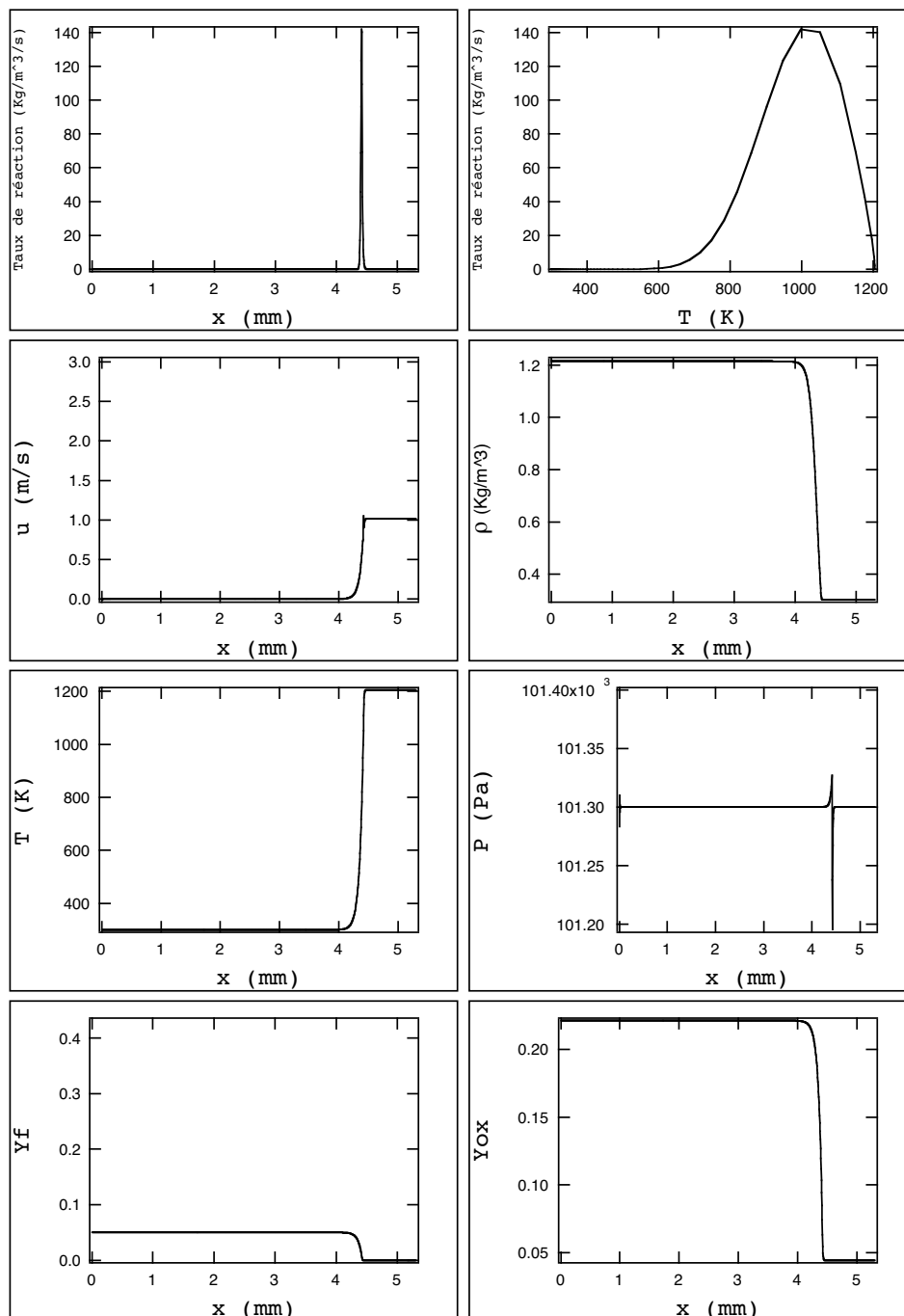


FIG. 3.2 – Condition initiale de l'interaction flamme film liquide

3.1.5 Déroulement pratique de l'interaction flamme paroi avec film liquide

Afin d'expliquer le déroulement pratique de l'interaction flamme paroi avec film liquide, un paramètre important à considérer est la température initiale des gaz frais et du film liquide T_0 . Dans toute la suite de notre étude $T_0 = 300K$. Le déroulement de nos simulations numériques diffère quelque peu de l'organigramme théorique 2.7 exposé à la page 21 du chapitre 2. En effet, nous avons suivi l'organigramme 3.3 et nous allons expliquer pourquoi.

- CAS A ($T_P = T_0$) : On ne fait que les étapes 1 et 2 de l'organigramme théorique 2.7 exposé à la page 21 du chapitre 2. En effet, nous verrons dans les résultats de nos simulations que le flux de chaleur interfacial du à la flamme est toujours très faible. Cela ne nécessite donc pas de tenir compte de la profondeur de pénétration de la chaleur dans le film liquide lorsque la flamme interagit avec le film.
- CAS B ($T_P > T_0$) : On remplace l'étape 1 de l'organigramme théorique 2.7 exposé à la page 21 du chapitre 2 par un modèle d'évaporation à T_S constante. En effet, nous verrons que c'est la température de paroi T_P qui influe de manière prépondérante sur la température d'interface T_S . Or, il faut un certain temps t_w à la chaleur provenant de la paroi pour pénétrer dans le film liquide et atteindre sa surface qui reste à température T_S constante pendant ce temps.

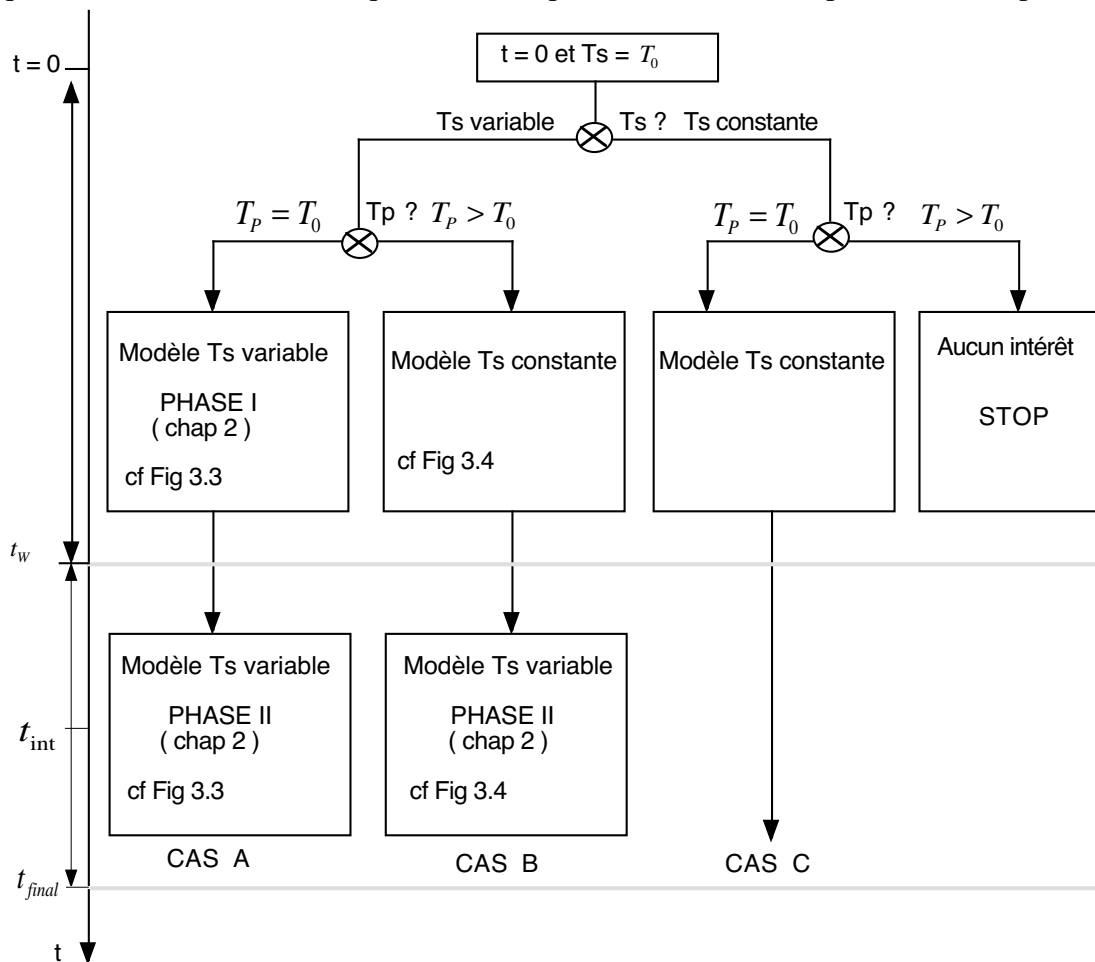


FIG. 3.3 – Déroulement pratique des différentes phases de calcul de T_S suivant les cas traités.

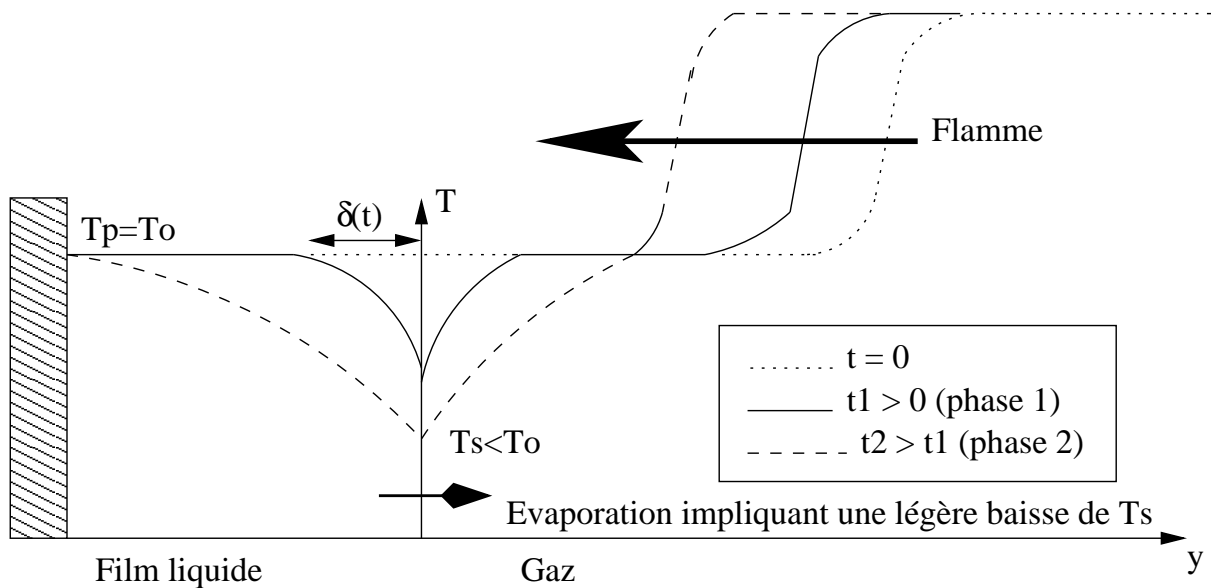


FIG. 3.4 – Profils de température pour le CAS A ($T_p = T_0$)

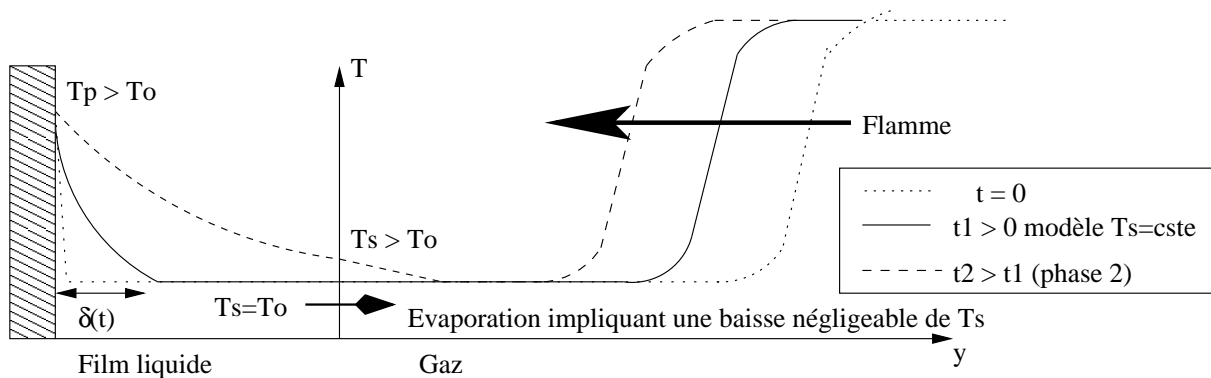


FIG. 3.5 – Profils de température pour le CAS B ($T_p > T_0$)

3.2 Résultats

3.2.1 Calcul de référence : Interaction flamme paroi sèche

D'après la figure 3.6, on constate que la distance de coincement (Pe_Q) ainsi que le flux de chaleur pariétal maximal sont quasiment identiques à ceux trouvés au chapitre 1. En effet, on a : $Pe_Q = 3,46$ et $\phi_{Q_{max}} = 0,40$. Ainsi, cela atteste que la nouvelle cinétique a été correctement codée et conforte le fait que l'interaction flamme paroi sèche est essentiellement contrôlée par la thermique. A noter que la flamme est initialement située au centre du domaine pour ce calcul contrairement aux calculs d'interaction flamme film liquide pour lesquels la flamme est initialement situé aux 5/6eme du domaine.

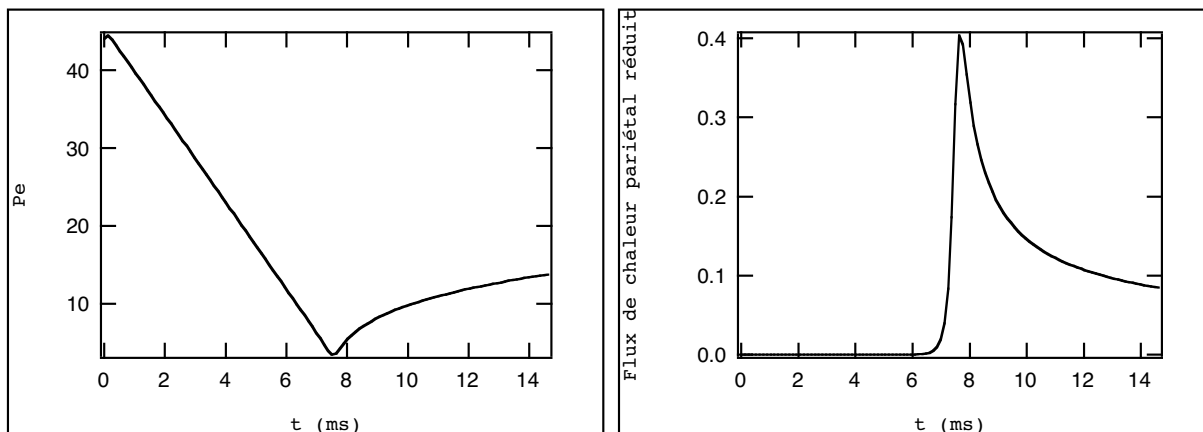


FIG. 3.6 – P_e et flux de chaleur pariétal réduit en fonction du temps pour l'interaction flamme paroi sèche

3.2.2 Interaction flamme film liquide à T_S constante

Afin de comprendre comment se déroule l'interaction flamme paroi en présence d'un film liquide, nous allons maintenant analyser les profils de température, taux de réaction et fraction massique de fuel et d'oxygène à différents moments de l'interaction dans le cas où T_S est constante.

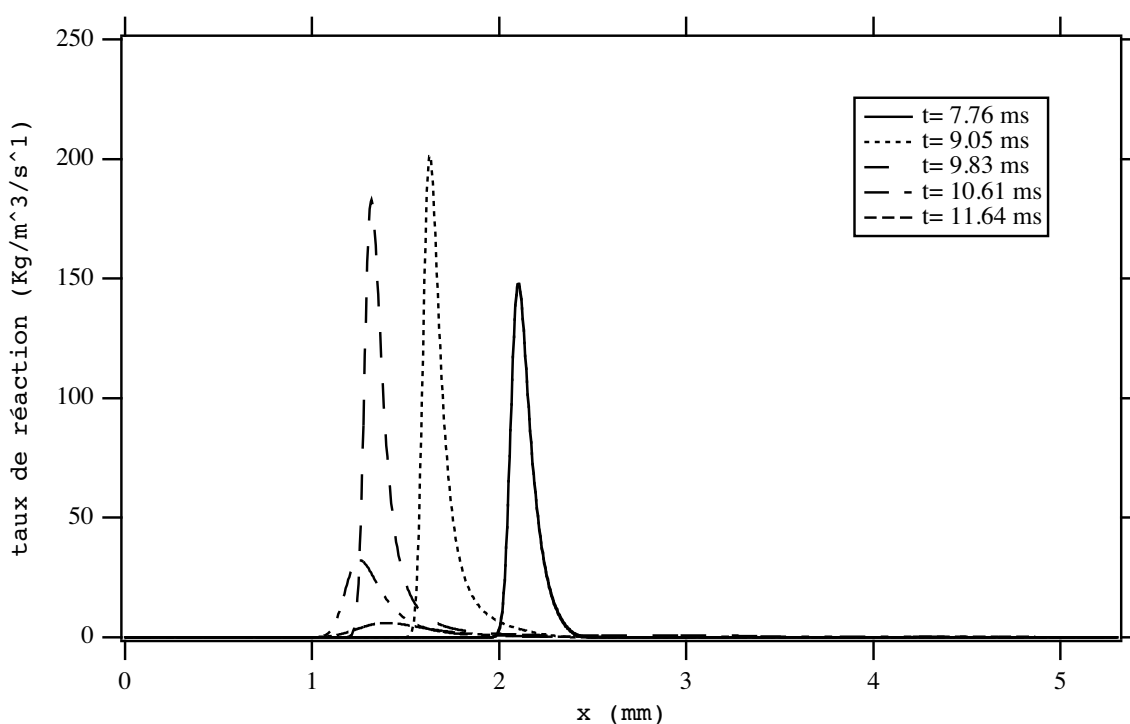


FIG. 3.7 – taux de réaction en fonction de x à différents moments de l'interaction.

D'après la figure 3.7, on constate que l'interaction flamme film liquide se déroule de manière analogue à l'interaction flamme-paroi sèche. En effet, il existe également une zone près du film liquide où le taux de réaction est toujours nul : après s'être presque éteinte la flamme recule et s'éloigne du film liquide.

Cependant, quelques différences majeures apparaissent. Tout d'abord, la figure 3.7 montre que le taux de réaction de la flamme augmente de façon significative avant de diminuer jusqu'à la

quasi-extinction de la flamme, alors que les figures 3.9 3.10 et 3.11 montrent que la richesse de la flamme augmente au cours de l'interaction. Ensuite, d'après la figure 3.8, on constate que les gradients de température près du film liquide semblent quasiment nul pendant l'interaction.

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

Ce résultat est très important puisqu'il signifie qu'il faudra absolument utiliser une chimie plus complexe dans la suite à donner à ce stage afin de confirmer ces premiers résultats et surtout obtenir des résultats quantitatifs vraiment fiables.

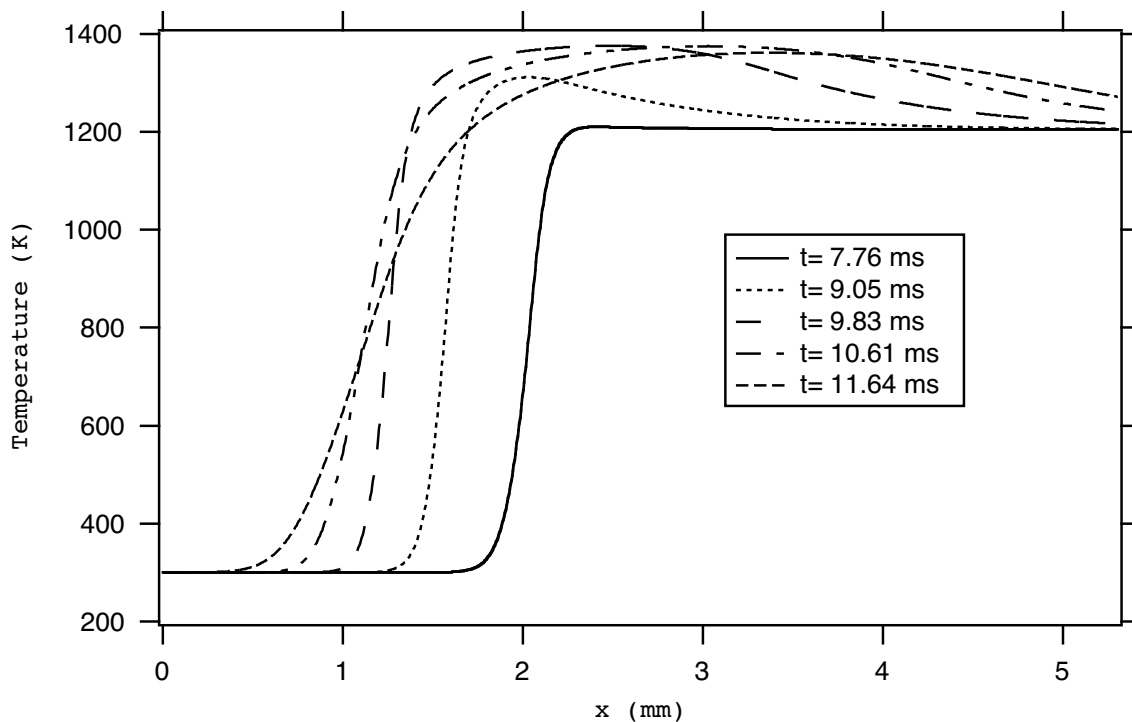


FIG. 3.8 – température en fonction de x à différents moments de l'interaction.

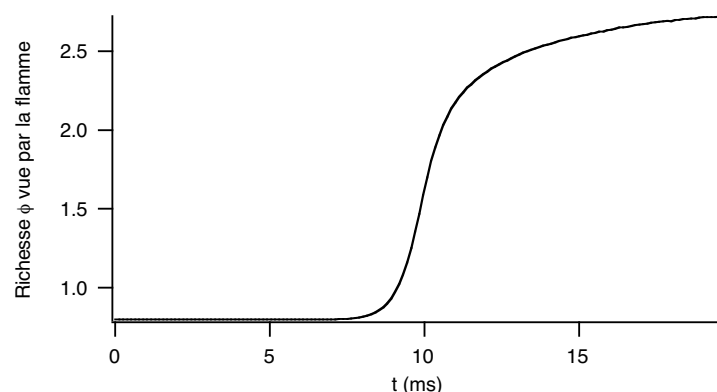


FIG. 3.9 – Richesse (calculée au point où le taux de réaction est maximal) vue par la flamme au cours du temps.

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

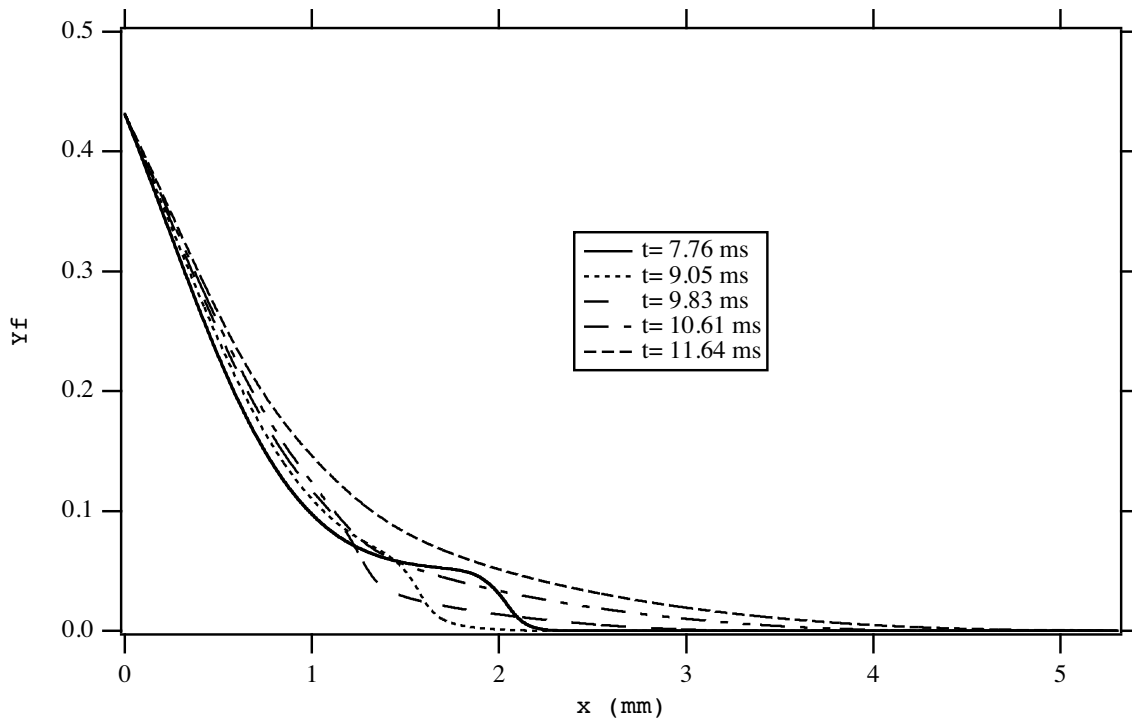


FIG. 3.10 – fraction massique de fuel en fonction de x à différents moments de l'interaction.

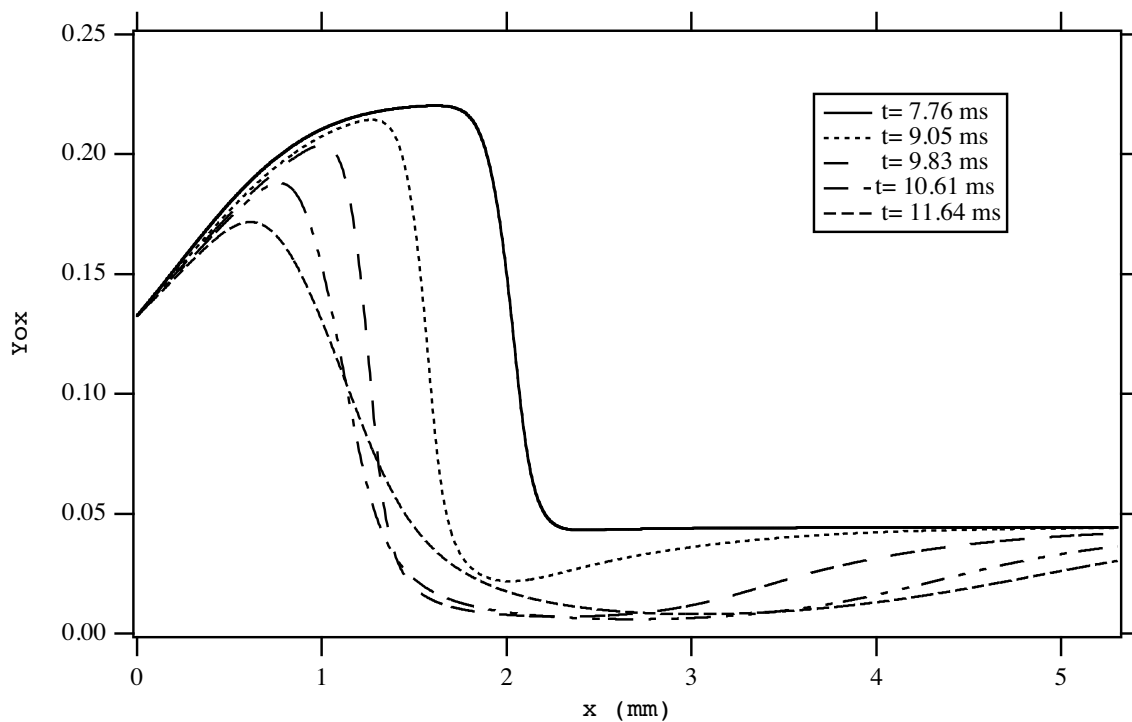


FIG. 3.11 – fraction massique d'oxygène en fonction de x à différents moments de l'interaction.

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

Afin de comparer ces différents cas d'interaction flamme-paroi, nous avons tracé le Peclet, la vitesse de flamme, le flux de chaleur pariétal, l'épaisseur du film liquide ainsi que la température interfaciale T_3 en fonction du temps.

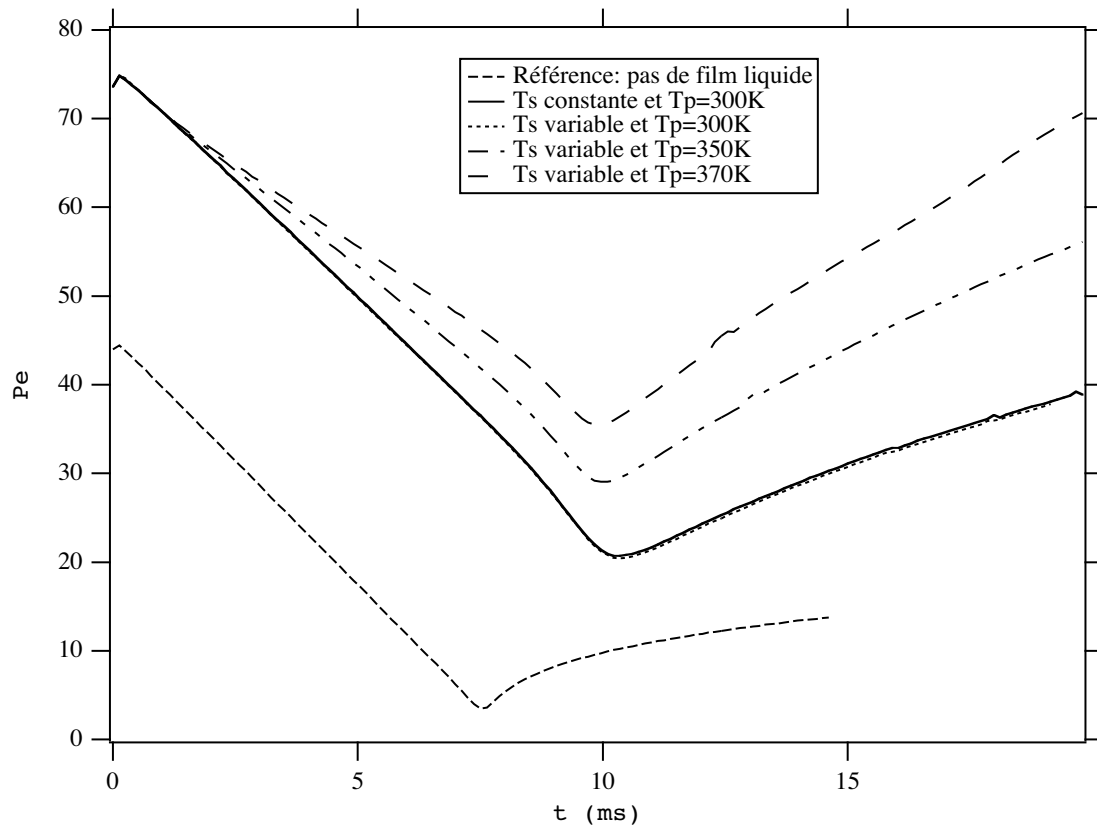


FIG. 3.12 – Peclet en fonction du temps pour différents cas d'interaction flamme paroi avec ou sans film liquide

D'après la figure 3.12, on peut extraire 3 résultats majeurs :

- La distance de coincement pour l'interaction flamme film liquide est beaucoup plus importante que pour l'interaction flamme paroi sèche, ce qui s'explique par le fait que la flamme s'étouffe lorsqu'elle atteint les fortes richesses occasionnées par l'évaporation du film liquide.
- Le modèle de température variable du film liquide n'a quasiment aucune influence sur la distance de coincement pour $T_p = 300K$. Ce résultat est logique puisque la flamme reste loin du film liquide. Par conséquent, le flux de chaleur interfacial maximal dans le gaz pour l'interaction flamme film liquide est très faible comparé à l'interaction flamme-paroi sèche, et surviendra longtemps après le coincement de la flamme comme en atteste la figure 3.14. En comparant les figures 3.14 et 3.6, on s'aperçoit plus précisément que l'augmentation du flux de chaleur interfacial est 100 fois plus lente avec film liquide que sans pour les mêmes températures de paroi T_p .
- La distance de coincement augmente de manière significative avec la température de paroi T_p , ce qui est logique au regard des données des figures 3.15 et 3.16. En effet, plus la température de paroi augmente, plus le film liquide chauffe comme en atteste la figure 3.15. Et plus la température de surface du film liquide T_s est élevée, plus le film liquide s'évapore comme en atteste la figure 3.16, occasionnant des gradients de richesse plus forts et plus éloignés du film liquide.

Au niveau thermique, c'est donc la température de paroi qui joue le rôle le plus important dans l'interaction flamme-paroi avec film liquide et non la température de la flamme.

Par ailleurs, les figures 3.13 et 3.9 confirment le fait que la flamme s'éteint à cause des fortes richesses près du film liquide. En effet, l'extinction de la flamme survient après que l'activité de la flamme ait augmenté et se fait de manière plus progressive en présence du film liquide. En outre, lorsque la température de paroi augmente, on constate que l'extinction de la flamme

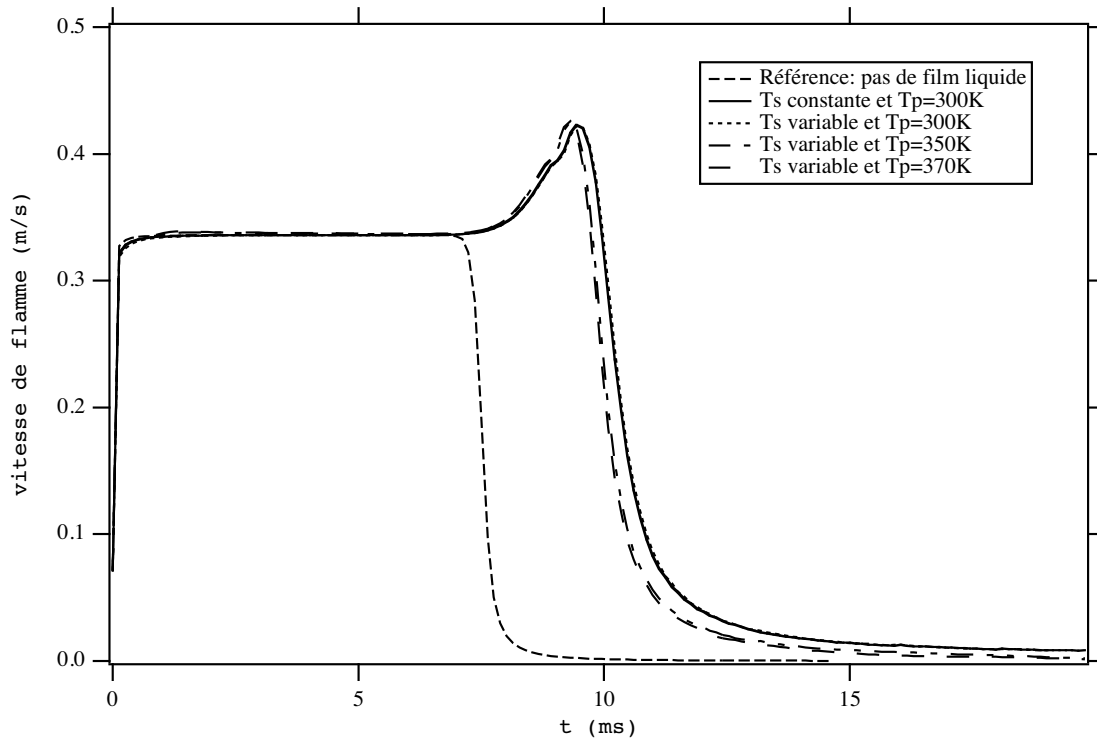


FIG. 3.13 – Vitesse de flamme en fonction du temps pour différents cas d’interaction flamme paroi avec ou sans film liquide

se fait de manière un peu plus brutale, attestant le fait que la flamme s’étouffe parce que les gradients de richesse deviennent plus forts.

Ainsi, l’interaction flamme paroi avec film liquide est contrôlée de manière directe par la chimie et de manière indirecte (via l’évaporation) par la thermique, c’est à dire la température de paroi T_P .

De manière plus quantitative et afin de se rendre compte de la différence entre l’interaction flamme paroi avec et sans film liquide, le tableau 3.2.3 donne les distances de coincement pour différentes interactions flamme paroi :

Paroi sèche	oui	non	non	non	non
Film liquide	non	oui	oui	oui	oui
T_S variable	non	non	oui	oui	oui
T_P	300K	300K	300K	350K	370K
Pe_Q	3,5	20,7	20,4	29,0	35,5

TAB. 3.1 – Pelet de coincement pour différents cas d’interaction flamme paroi

On constate ainsi que la présence d’un film liquide de carburant sur une paroi multiplie par environ un facteur 6 la distance de coincement par rapport à une paroi sèche. Par ailleurs, le passage de $T_P = 300K$ à $T_P = 350K$ entraîne une augmentation de 42 % de la distance de coincement alors que le passage de $T_P = 300K$ à $T_P = 370K$ entraîne une augmentation de 74 % de la distance de coincement. Les différences induites par la présence du film liquide, et dans une moindre mesure par l’augmentation de la température de paroi T_P , sont donc très importantes selon ces premiers résultats. Il conviendra cependant de valider ces résultats, et le cas échéant, de les affiner avec un schéma cinétique plus complexe (4 étapes Jones et Lindstedt

par exemple) dans la suite de ce stage.

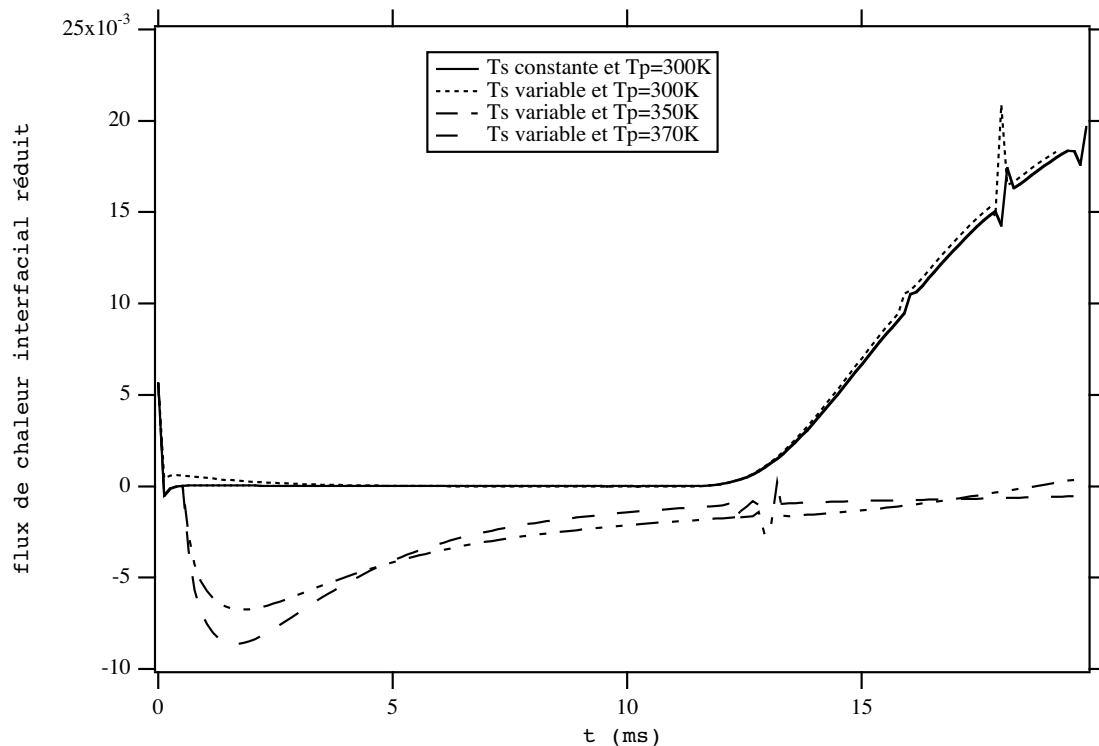


FIG. 3.14 – Flux de chaleur interfacial réduit dans le gaz en fonction du temps pour différents cas d'interaction flamme paroi avec film liquide

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

Remarques :

- D'après la figure. 3.16, on constate que le film liquide de carburant ne s'évapore que de 14 % au maximum pendant toute la simulation, ce qui valide à postèriori l'hypothèse faite selon laquelle le film liquide de carburant s'évapore lentement. Par ailleurs, l'ordre de grandeur d'évaporation du film liquide est conforme à la bibliographie [1] ce qui valide notre modèle d'évaporation de film liquide.
- Un calcul d'interaction flamme-paroi avec film liquide en utilisant un maillage 2 fois plus fin que celui utilisé pour les calculs précédents nous a donné les mêmes résultats à 10^{-3} près. Cela signifie que notre modèle de film liquide est indépendant du maillage et que le maillage utilisé pour nos calculs jusqu'alors, est suffisamment fin pour résoudre notre problème.

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

3.2.4 Influence du temps d'existence du film liquide avant l'interaction.

Afin d'effectuer cette étude, nous avons effectué une simulation identique à celle réalisée précédemment avec T_S variable et $T_P = 300K$ mais en initialisant le calcul avec la flamme au centre du domaine ($x=2,65mm$). Ainsi, le temps d'existence du film liquide avant interaction est de 3,75 ms dans ce cas.

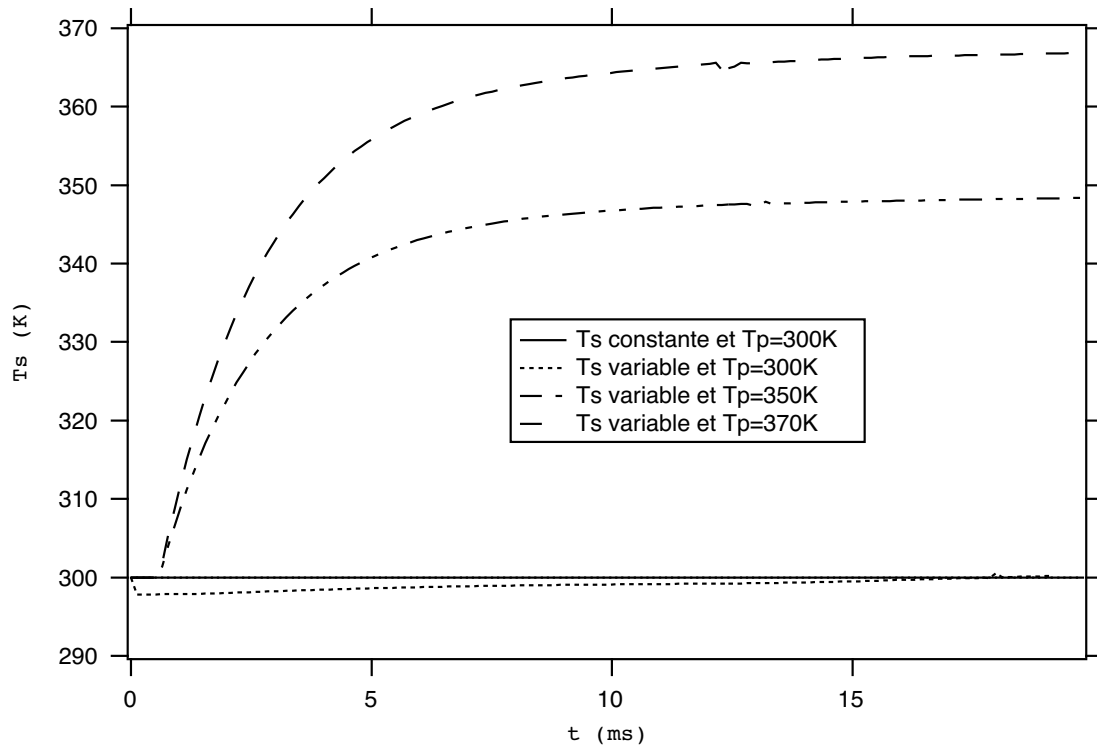


FIG. 3.15 – Température interfaciale T_s en fonction du temps pour différents cas d'interaction flamme paroi avec ou sans film liquide

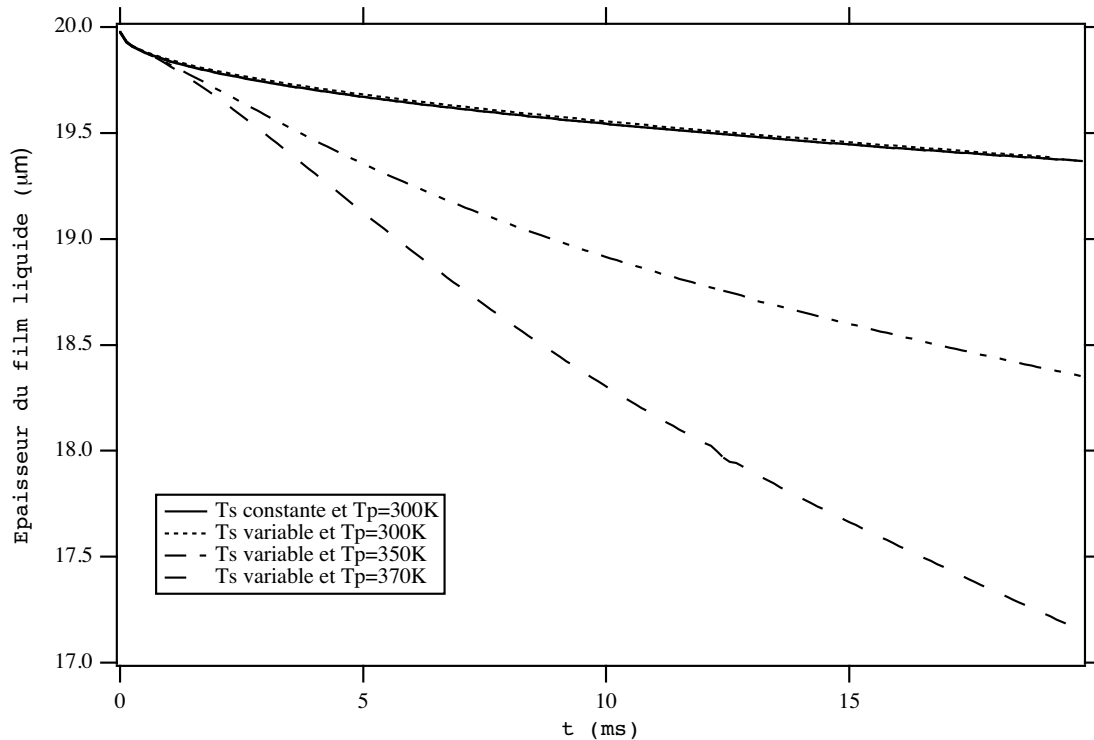


FIG. 3.16 – Epaisseur du film liquide en fonction du temps pour différents cas d'interaction flamme paroi avec film liquide

La figure 3.17 permet de comparer les distances de coincement obtenues pour les 2 cas d'interaction flamme film liquide (avec T_s variable et $T_p = 300K$). On y a également indiqué le calcul d'interaction flamme-paroi sèche comme référence.

On constate que la distance de coincement est plus petite lorsqu'on diminue le temps d'existence du film liquide avant interaction. En effet, on obtient $Pe = 15,8$ pour un temps d'existence du film liquide avant interaction de 3,75 ms, soit une diminution de 23% du Peclet lorsque l'on divise par 2 le temps d'existence du film avant interaction. Cette diminution de la distance de coincement est logique dans la mesure où c'est l'évaporation du film liquide qui provoque l'extinction de la flamme. Donc, plus le film a le temps de s'évaporer, moins la flamme peut s'approcher de celui-ci.

On remarque également que malgré cette diminution de la distance de coincement, celle-ci reste plus de 4 fois plus élevée que pour l'interaction flamme-paroi sèche.

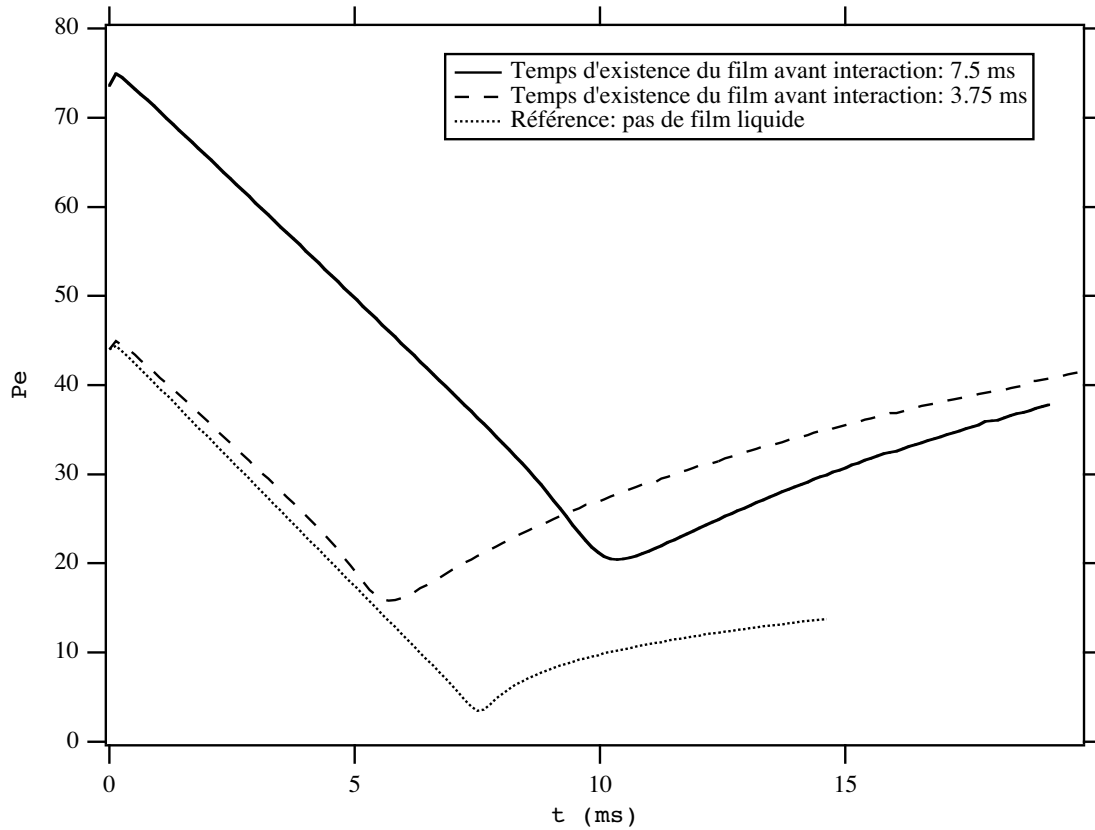


FIG. 3.17 – Peclet en fonction du temps pour différents temps d'existence du film liquide avant interaction (T_S variable et $T_P = 300K$).

Conclusion et Perspectives

Conclusion

Au cours de ce stage, nous avons établi, codé et validé un modèle de film liquide ainsi qu'une nouvelle cinétique chimique dans le code NTMIX3D. Grâce à ce travail, nous avons pu mettre en évidence les résultats suivants :

- L'interaction flamme-paroi avec film liquide est gouvernée par la chimie contrairement à l'interaction flamme-paroi sèche qui est gouvernée par la thermique. En effet, la flamme s'éteint à cause des richesses trop élevées que rencontre la flamme et non pas à cause des pertes thermiques puisque la flamme ne s'approche pas assez près du film liquide.
- Les distances de coïncement sont beaucoup plus grandes que pour l'interaction flamme paroi sèche et le flux de chaleur maximal dans le mur est beaucoup plus faible.
- Les deux paramètres les plus influents de l'interaction sont la température de paroi T_p et le temps d'existence du film liquide avant interaction ce qui correspond sans doute au régime dans un moteur à piston.
- Une zone de combustion secondaire faible non homogène apparaît : flamme de diffusion ?

Perspectives

Afin d'améliorer ou de valider les résultats obtenus et les étendre à des cas plus réalistes, on envisage d'explorer les voies suivantes :

- Passage en chimie complexe avec un schéma 4 étapes Jones et Lindstedt (en cours de réalisation).
- Prise en compte des effets de paroi lorsque la température de paroi T_p dépasse la température d'ébullition du liquide.
- Passage en 2D et 3D.
- Prise en compte de la turbulence en n'ajoutant qu'un vortex dans un premier temps.

Bibliographie

1. A. Ammar. Développement d'un modèle d'évaporation de film de carburants multicomposants dans le code multidimensionnel kiva-mb. Rapport IFP Rapport 56 748, Institut français du pétrole, 2002.
2. J. Armendariz and M. Matalon. Evaporation and combustion of thin films of liquid fuels. *Journal of Fluid Mechanics*, 435 :351–376, 2001.
3. G. Bruneaux. *Etude asymptotique, simulation numérique directe et modélisation de l'interaction flamme turbulente prémélangée-paroi*. PhD thesis, IFP et Ecole Centrale Paris, 1996.
4. B. Cuenot. *NTMIX3D User'Guide*. CERFACS, 1997.
5. Stanton D.W. and C.J. Rutland. Modeling fuel film formation and wall interaction in diesel engines. *Society of Automotive Engineers*, (960628) :808–824, 2003.
6. H. Foucart. *Modélisation tridimensionnelle des films liquides pariétaux dans les moteurs à combustion interne*. PhD thesis, IFP et Université de Rouen, 1999.
7. F.P Incropera. *Fundamentals of Heat and Mass Transfer*. Wiley, 4th edition edition, 1996.
8. W.P. Jones and R.P. Lindstedt. Global reaction schemes for hydrocarbon combustion. *Combustion And Flame*, 73 :233–249, 1988.
9. K. Kuan-yun Kuo. *Principles of Combustion*. John-Wiley & Sons, 1986.
10. J.D. Ott, E.S. ORAN, and J.D. Anderson. A mechanism for flame acceleration in narrow tubes. *AIAA Journal*, 41(7) :1391–1396, 2003.
11. T. Poinso. PhD thesis, Michelin et Ecole Centrale Paris, 1983.
12. T. Poinso and D. Veynante. *Theoretical and Numerical Combustion*. Edwards, 2001.
13. P. Popp. *Simulation of homogeneous/heterogeneous reaction mechanisms, heat transfer and pollutant formation during flame wall interaction*. PhD thesis, Cerfacs, 1996.

Table des matières

Introduction	4
0.1 Le CERFACS	4
0.2 Contexte d'études	4
0.3 Objectifs du stage	5
1 Bases de l'interaction flamme paroi	6
1.1 Introduction	6
1.2 Calcul monodimensionnel laminaire	8
1.2.1 Présentation du code de calcul NTMIX3D	8
1.2.2 Configuration et paramètres du calcul	8
1.2.3 Résultats et mécanisme de l'interaction flamme paroi	8
Résultats : profils	8
Résultats : évolutions temporelles	11
1.3 Approche de l'interaction flamme-paroi en régime turbulent	12
2 Aspects théoriques de l'interaction flamme film liquide	13
2.1 Configuration et hypothèses	13
2.2 Approche qualitative de l'interaction flamme film liquide	14
2.2.1 Scénario envisagé	14
2.2.2 Analyse des grandeurs caractéristiques mises en jeu	14
2.3 Modélisation du film liquide	16
2.3.1 Equations intervenant dans la phase liquide	16
Conditions de saturation à la surface du film	17
Résolution de l'équation de la chaleur dans le film liquide	18
Equation gouvernant l'épaisseur $h(t)$ du film liquide :	20
2.3.2 Organigramme théorique des différentes étapes du modèle de film liquide	20
Système d'équations couplées de la phase liquide :	20
2.3.3 Algorithme du modèle de film liquide codé dans NTMIX3D	21
3 Résultats comparatifs	23
3.1 Paramètres des différents calculs	23
3.1.1 Chimie	23
3.1.2 Maillage et domaine de calcul	24
3.1.3 Conditions limites	24

3.1.4	Condition initiale	25
3.1.5	Déroulement pratique de l'interaction flamme paroi avec film liquide .	26
3.2	Résultats	27
3.2.1	Calcul de référence : Interaction flamme paroi sèche	27
3.2.2	Interaction flamme film liquide à T_S constante	28
3.2.3	Comparaison de l'interaction flamme-paroi sèche et de l'interaction flamme-paroi avec film liquide pour différentes températures de paroi T_p .	30
3.2.4	Influence du temps d'existence du film liquide avant l'interaction. . . .	33
	Conclusion et Perspectives	36
	Bibliographie	37