Modélisation de l'interaction entre un spray de gouttelettes d'eau et la combustion turbulente : Application au procédé d'extinction d'un foyer incendie par brouillards d'eau

Avner Fartouk

▶ **To cite this version:**

Avner Fartouk. Modélisation de l'interaction entre un spray de gouttelettes d'eau et la combustion turbulente : Application au procédé d'extinction d'un foyer incendie par brouillards d'eau. Autre. Ecole Nationale Supérieure de Mécanique et d'Aérotechnique - Poitiers, 2013. Français. NNT : 2013ESMA0002 . tel-00802164

HAL Id: tel-00802164
https://theses.hal.science/tel-00802164

Submitted on 19 Mar 2013

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

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

THESE

pour l'obtention du Grade de
L'ECOLE NATIONALE SUPERIEURE DE MECANIQUE ET D'AEROTECHNIQUE
(Faculté des Sciences Fondamentales et Appliquées, Diplôme National - Arrêté du 7 août 2006)

Ecole Doctorale : SI MMEA- Sciences en Ingénierie
en Matériaux, Energétique et Aéronautique

Secteur de Recherche : Energétique, Thermique, Combustion
Présentée par :

AVNER FARTOUK

****

Modélisation de l'interaction entre un spray de gouttelettes d'eau et la combustion turbulente :

Application au procédé d'extinction d'un foyer incendie par brouillards d'eau.

****

Directeur de Thèse : Arnaud Mura
Co-encadrant de Thèse : Vincent Robin

****

Soutenue le 15 Janvier 2013

devant la Commission d'Examen

****

JURY

M. J. P. GARO	Professeur à l'Université de Poitiers	Président
M. D. MORVAN	Professeur à l'Université d'Aix - Marseille	Rapporteur
M. J. REVEILLON	Professeur au CORIA, Rouen	Rapporteur
M. V. ROBIN	Maître de Conférences à l'Université de Poitiers	Examinateur
M. P. PLION	Ingénieur Chercheur, EDF	Examinateur
M. A. MURA	Chargé de Recherche, Poitiers	Examinateur

« הגמול של הלמידה, הוא ההבנה »
« La récompense de l'étude, c'est de comprendre.»

Berachoth - V^e siècle.

« We had succeeded with things impossible,
but had not been so successful with things that are possible. »

Yitzhak Rabin

Remerciements

Il serait possible de remercier cet homme pour l'ensemble de l'aide et des connaissances qu'il a pu me transmettre et aussi par ses grandes contributions scientifiques et techniques. Sa présence aura été décisive dans les choix stratégiques de ma thèse. Cependant, je remercierai ici Pierre Plion, ingénieur chercheur à EDF R&D, avec grand respect et beaucoup de reconnaissance, pour l'ensemble des qualités humaines qu'il a su m'apporter lors de cette étape importante de ma carrière.

J'exprime ma gratitude à Monsieur Laurent Gay, ingénieur de recherche incendie à EDF R&D et responsable industriel de thèse, m'ayant encadré à EDF durant ces trois ans. Il a su entretenir rigueur et encouragements jusqu'à la fin pour contribuer à l'aboutissement de ce projet. Merci pour m'avoir orienté vers ce sujet, lorsque j'entreprenais mon stage de Master.

Je tiens à exprimer ma reconnaissance à M^{lle} Fatiah Nmira, ingénieur chercheur à EDF R&D, pour m'avoir co-encadré pendant la thèse en intervenant de manière constructive tout en me permettant d'orienter mes axes de recherche et développer mes idées personnelles de manière autonome.

Un grand remerciement à Monsieur Arnaud Mura, chercheur au laboratoire Pprime de l'ENSMA, l'Ecole Nationale Supérieure de Mécanique et d'Aérotechnique de Poitiers, pour avoir accepté de diriger ces travaux, dans le cadre particulier d'un encadrement à distance. Une profonde reconnaissance pour ses qualités de partage et d'apprentissage durant cette thèse en m'ayant transmis un bagage important de connaissances qui sans nul doute ont servi pour le développement de mes recherches.

Je remercie sincèrement Monsieur Vincent Robin, chercheur au laboratoire Pprime de l'ENSMA, m'ayant encadré avec Arnaud Mura. Il a su me donner une entière disponibilité pour l'ensemble des problèmes que j'ai pus rencontrer afin de les surpasser et de concrétiser ce projet.

Je souhaite exprimer ma reconnaissance et ma gratitude à Monsieur Dominique Morvan et Monsieur Julien Réveillon qui ont bien voulu prendre de leur temps pour être rapporteurs de cette thèse. Je remercie également Monsieur Jean-Pierre Garo qui a accepté de participer à l'évaluation de mon travail et faire partie du jury de thèse.

Merci à l'ensemble des collègues pour l'ambiance conviviale toujours chaleureuse et très appréciable. Je remercie Messieurs Bertrand Sapa, Mathieu Guingo, Jérôme Lavieville, Namane Mechitoua, Stéphane Mimouni, Cyril Baudry ainsi que Alexandre Douce, ingénieurs de recherche du département MFEE de EDF R&D, pour leur grande disponibilité et leur grande implication lors de mes diverses sollicitations aussi bien dans le domaine du numérique que dans le domaine de la physique. Ils ont été tout aussi précieux pour l'avancé de mon projet que pour les autres doctorants, Romain Denefle, Clara Martineau, Khaled Saleh, Katerina Dorogan, Sana Khelifi et Frank Ngohang, que je remercie également pour avoir contribué énormément à cette convivialité.

Je tiens à saluer particulièrement Christophe Henry, mon collègue de bureau, qui a apporté de la convivialité dans notre salle en particulier avec ses jeux de mots parfois « incompressibles » pour l'ensemble de la « masse » car souvent formulés dans un schéma implicite et instable mais toujours aussi « mabouléen » pour moi.

Je souhaite témoigner une profonde reconnaissance à Monsieur Jean Pierre Minier, pour avoir fait évoluer ma façon de voir et comprendre le monde qui m'entoure. Cette rencontre a été particulièrement importante pour moi. Je ne cherche plus à savoir ce que je pourrais être, je veux savoir si les expériences qui ont été les miennes, bonnes ou mauvaises, m'auront aidé à apprécier la personne que je suis devenu. Merci.

Merci à Pedro Martinez, Romain Buttay, Sylvain Serra et Laurent Gomet, en Thèse ou en Post doc au département Combustion de Pprime, pour l'aide apportée dans le cadre de mon travail. Toujours accueillants, ils ont rendu mes venues très productives avec un quotidien très chaleureux.

Finalement, je tiens à remercier ma famille pour l'ensemble de leurs soutiens. Ils auront été indispensables pendant ces trois années.

Résumé

Dans le cadre de la sécurité incendie, et de la prévention de départ d'un feu en environnement confiné, un objectif majeur consiste en l'amélioration des procédés d'extinction et plus précisément de la pulvérisation de brouillards d'eau qui est un moyen de lutte largement utilisé. Les simulations numériques doivent prévoir l'efficacité des brouillards en évaluant précisément l'évolution spatio-temporelle des caractéristiques du foyer incendie en présence d'un champ pulvérisé de gouttelettes. Pour déterminer les fractions massiques d'eau sous forme liquide ou vapeur, les concentrations des produits formés ainsi que les niveaux de températures en tout point du local, nous présentons ici le développement d'un modèle apte à décrire un milieu réactif dans lequel la stabilité de la flamme est altérée par la présence de gouttelettes d'eau. Un formalisme diphasique eulérien-eulérien est utilisé pour modéliser le transport des gouttelettes qui interagissent avec le milieu réactif en le refroidissant et en le diluant via l'introduction de vapeur d'eau issue du processus d'évaporation. Le modèle sous-jacent est une approche de combustion à multi-fractions de mélange avec un diagramme de reconstitution des espèces mettant en compétition un domaine inflammable et un domaine non inflammable. Les modèles finalement obtenus ont été implantés dans Code_Saturne, un logiciel de mécanique des fluides qui a récemment été adapté à l'étude des incendies. La validation de ces modèles a été effectuée à partir de données expérimentales issues de la littérature, et sur des cas test d'échelle intégrale.

Mots-clef : incendie, combustion, extinction, diphasique, brouillard d'eau, simulations CFD.

Abstract

In the context of fire safety and to fight against the development of a fire in a confined building, a major objective is to improve the processes of extinction and one which is widely known: spray of water mist. Numerical simulations should be able to predict the efficiency of water mist by evaluating precisely the spatio-temporal evolution of fire characteristics in the vicinity of water droplets sprayed on. In order to determine liquid or vapor mass fraction of water, the combustion products concentration as well as temperature levels everywhere in the local, we introduce here the development of a model able to describe reactive gas where the flame stability is more or less affected by the water mist. An eulerian-eulerian two-phase flow formalism is used to describe water droplets which interact with the reactive gas by cooling and diluting it with water vapor coming from evaporation process. The underlying combustion model is the multi-fraction mixing approach with species determination diagram involving a competitive flammable and non-flammable domain. The final models have been implemented in Code_Saturne, a computational fluid dynamics software recently modified for fire studies. The validation of these models is performed from experimental of literature, and full scale cases.

Keywords: fire, combustion, extinction, two-phase flow, water mist, CFD simulations.

Table des matières

Liste des symboles **13**

Liste des figures **21**

Liste des tableaux **27**

INTRODUCTION **29**

Objectifs de la thèse **31**

I. CONTEXTE PRATIQUE ET SCIENTIFIQUE **33**

I.1. Description des incendies en milieu confiné **35**

I.1.1. Généralités 35
a. Trois facteurs importants caractérisant un incendie 36
b. Etapes d'un incendie 37

I.1.2. Travaux réalisés 38
a. Etudes expérimentales 38
b. Etudes numériques 38

I.2. Lutte contre l'incendie par brouillard d'eau **40**

I.2.1. Passage des halons aux pulvérisations de gouttes d'eau 40

I.2.2. Nomenclature des sprays : Norme NFPA 40

I.2.3. Formation des sprays de gouttes d'eau 43

I.2.4. Les brouillards d'eau 44

I.2.5. Mécanismes d'extinction 45

I.2.6. Travaux réalisés 47
a. Etudes expérimentales 47
b. Etudes numériques 48

I.3. État de l'art des modèles décrivant l'interaction entre un foyer et un brouillard d'eau **49**

I.3.1. Les modèles associés à l'écoulement diphasique turbulent 49
a. Description du spray 49
b. Aspects turbulents 51

I.3.2. Modèles associés à la description de la flamme 54
a. Le mélange des espèces 54

II. PHENOMENOLOGIES 59

II.1. Introduction à la combustion turbulente 61

II.1.1. La combustion et les flammes 61
a. Notion de réaction de combustion 61
b. Caractéristiques des flammes 62
c. Flammes en milieu dilué 71

II.2. Les milieux diphasiques turbulents 78

II.2.1. Echange de masse (évaporation) et de chaleur 78

II.2.2. Echange de quantité de mouvement : le glissement 81
a. Notions de vitesse de chute et temps de relaxation d'une particule 81
b. Glissement d'une goutte en cours d'évaporation 86

II.3. Transfert radiatif dans les milieux chargés en gouttes. 87

II.3.1. Le rayonnement thermique 87

II.3.2. Les propriétés radiatives 87
a. Propriété radiative du gaz 87
b. Propriété radiative du liquide 88

II.3.3. Les conséquences sur l'interaction feu-brouillard 88
a. Conséquence sur les gouttelettes 88
b. Conséquence sur la combustion gaz 88

III. ETABLISSEMENT DU MODELE 89

III.1. Modélisation de la combustion turbulente en milieu dilué 91

III.1.1. Description d'un modèle à multi-fractions de mélange 91
a. Hypothèses liées aux flammes de diffusion 91
b. Equations de transport instantanées 92
c. Etablissement des fractions de mélange 92
d. Détermination de l'enthalpie massique du mélange 94
e. Reconstitution des fractions massiques instantanées des espèces 94
f. Détermination de la température 99
g. Détermination du volume massique 99

III.1.2. Modélisation d'une flamme de diffusion turbulente en milieu dilué 100
a. Définition des moyennes statistiques 100
b. PDF présumée pour un modèle à multi-fractions de mélange 101
c. Utilisation des lois instantanées CLI pour déterminer les champs moyens 107
d. Un schéma ne respectant pas un avancement global croissant 107
e. Mise en place du modèle irréversible CLI_{irr} 109
f. Reconstitution des fractions massiques moyennes des espèces 111
g. Détermination de la température et du volume massique 112

III.1.3. Dégénérescence du modèle le support réduit de la PDF 113
a. Position de l'étude dans un souci de simplification lié aux incendies 113
b. Simplification des lois de reconstitution des fractions massiques 114
c. Utilisation des lois instantanées CLI pour déterminer les champs moyens 114
d. Simplification du domaine d'inflammabilité et du modèle CLI_{irr} 116

III.2. Un formalisme eulérien-eulérien homogène avec glissement 119

III.2.1. Equations locales instantanées 119
a. Forme générale des équations locales instantanées 119
b. Fermeture des flux diffusifs 120
c. Détermination de nombres caractéristiques 121
d. Récapitulatif 122

III.2.2. Lois d'état 122
a. Loi d'état pour les gaz 122
b. Loi d'état pour l'eau liquide 122

III.2.3. Utilisation de l'opérateur moyenne phasique 123
a. Opérateur « moyenne » 123
b. Définition de la « moyenne phasique » 123
c. Quelques propriétés de l'opérateur « moyenne phasique » 124
d. Moyenne phasique des équations locales instantanées 124

III.2.4. Etablissement des équations de transport 127
a. Définition de la masse volumique et de la vitesse moyenne du mélange gaz + liquide 127
b. Décomposition des vitesses de chaque phase 127
c. Homogénéisation des phases pour le calcul de la vitesse moyenne du mélange 128
d. Etablissement des équations de transports des fractions massiques X_1 et X_2 . 129
e. Transport moyen d'une quantité ψ 129

III.2.5. Fermeture des flux de glissement 129
a. Les flux de glissement liés à la dispersion des phases 129
b. Les flux de glissement liés à la pesanteur 130

III.2.6. Fermeture des flux turbulents 130
a. Présentation du modèle usuel (à ce jour utilisé) pour la description des flux turbulents 130
b. Présentation d'un modèle amélioré prenant compte de l'expansion thermique dans le transport turbulent dans les écoulements réactifs non prémélangés ... 132

III.2.7. Fermeture des termes sources liés aux échanges interfaciaux 140
a. Les termes sources interfaciaux pour les fractions massiques 140
b. Les termes sources interfaciaux pour les fractions de mélange 141
c. Les termes sources interfaciaux pour les variances 141
d. Les termes sources interfaciaux pour les enthalpies 143

III.2.8. Récapitulatif des variables transportées 143

IV. RESULTATS 147

IV.1. Cas tests unitaires de validation des physiques introduites..... 149

IV.1.1. Evaluation du modèle de combustion à limite d'inflammabilité 149
a. Présentation des cas tests 149
b. Comportement du modèle..... 150
c. Conclusion sur le modèle de combustion 158

IV.1.2. Evaluation du modèle de description du spray..... 159
a. Phénomène de glissement..... 159
b. Echanges thermiques et massiques des gouttes 161

IV.2. Validation quantitative du modèle par la comparaison des résultats et des mesures expérimentales dans une flamme jet co-courant 166

IV.2.1. Présentation du dispositif 166

IV.2.2. Résultats 167
a. Cas de dilution du comburant 167
b. Cas de l'air chargé en gouttes 169

IV.3. Réponse du modèle sur un cas test représentatif d'une pulvérisation d'un brouillard descendant 170

IV.3.1. Présentation de la configuration..... 170

IV.3.2. Résultats 171

CONCLUSIONS ET PERSPECTIVES 173

Annexe A..... 175

Annexe B..... 177

Annexe C..... 181

REFERENCE 183

Liste des symboles

Lettres latines :

A_b	Paramètre de normalisation de la fonction béta
A	Facteur cinétique chimique d'une réaction ($m^3.mol^{-1}.s^{-1}$)
$A_{ext}^{\psi}, A_{\text{int}}^{\psi}, A_{chim}^{\psi}$	Termes de production d'un scalaire quelconque ψ
A_{Sp}	Surface projetée d'une particule (m^2)
b_1, b_2	Paramètres de la fonction béta
B_M	Coefficient massique de Spalding
B_T	Coefficient thermique de Spalding
c	Avancement de la réaction
c_f	Coefficient pour le modèle de fermeture de la dissipation de la variance de f
C	Chaleur spécifique ($J.kg^{-1}.K^{-1}$)
C_μ	Constante de Launder et Spalding
$C_\varepsilon^1, C_\varepsilon^2, C_\varepsilon^3$	Constantes du modèle turbulent (taux de dissipation ε)
C_{mag}	Constante de Magnussen
Cor_{nl}	Corrélation entre les fractions de mélange β_n et β_l
Cd	Coefficient de trainée
CO_2	Dioxyde de carbone
CH_4	Méthane
D	Diamètre (m)
D_S	Diamètre de Sauter (m)
D_R	Diamètre caractéristique de la distribution de Rosin-Rammler (m)
D_p	Diamètre d'une particule (m)
D_{Vxx}	Diamètre cumulé en volume (m)
D	Diluant
D_0, D_1	Amplitudes des pics de Dirac de la fonction « rectangle et pics de Dirac »
D_ψ	Coefficient de diffusion laminaire du scalaire ψ ($m^2.s^{-1}$)
$D_{\psi t}$	Coefficient de diffusion turbulente du scalaire ψ ($m^2.s^{-1}$)
Da	Nombre de Damköhler

Da_q	Valeur du nombre de Damköhler critique avant Quenching
Da_c	Valeur du nombre de Damköhler critique avant couplage lié aux microstructures
E_Q , E_S	Somme des variances et somme des carrés des fractions de mélange moyennes.
f	Fraction de mélange
$\widetilde{f''^2_{\max}}$	Valeur de la variance maximale (au sens de Favre)
f_s	Fraction de mélange stœchiométrique
F	Forces volumiques sur une particule (N)
F	Volume massique 1/ρ ($m^3.kg^{-1}$)
F_P , F_Π	Poids (N), Force d'Archimède (N)
F_f	Force de trainée (N)
$FL(\ )$	Fonction caractéristique du domaine inflammable
F	Carburant
g	Accélération de la pesanteur ($m.s^{-2}$)
h	Hauteur du rectangle de la fonction rectangle et pics de Dirac
h, h_S	Enthalpie, enthalpie sensible ($m^2\ s^{-2}$)
$H(\ )$	Fonction Heaviside
HRR	Puissance d'un foyer (W)
H_2O	Eau
H^k	Terme de création/destruction de la turbulence lié au gradient de pression ($m^2.s^{-3}$)
i, j, k	Indices liés aux coordonnées cartésiennes de l'espace
$I_{i\phi}$	Terme d'échange moyen de la quantité de mouvement à l'interface ($J.m^{-3}.s^{-1}$)
J_j^{ψ}	Flux de diffusion laminaire d'un scalaire ψ ($[\psi]\ kg.m^{-2}.s^{-1}$)
$J_{t,j}^{\psi}$	Flux de diffusion turbulent d'un scalaire ψ ($[\psi]\ kg.m^{-2}.s^{-1}$)
k	Coefficient de frottement ($kg.s^{-1}$)
k	Énergie cinétique de la turbulence ($m^2\ s^{-2}$)
Ka	Nombre de Karlovitz
K_B, K_C	Constantes de réaction
l_t	Longueur caractéristique de l'échelle intégrale (m)

l_k	Longueur caractéristique liée à l'échelle de Kolmogorov (m)
l_r	Epaisseur de la zone de réaction (m)
l_d	Epaisseur des couches diffusives de la fraction de mélange (m)
LII, LSI	Limites d'inflammabilité du mélange
L_{vap}	Chaleur latente d'évaporation ($J.kg^{-1}$)
Le	Nombre de Lewis
m	Paramètre pour la fermeture des fractions de mélange en couche limite
$\dot{m}_{foy}$	Débit massique surfacique de fuel à la surface du foyer ($kg.m^{-2}.s^{-1}$)
$\dot{m}_{vap}$	Débit d'évaporation sortant d'une goutte ($kg.s^{-1}$)
m_p	Masse d'une particule (kg)
$\left(n_f, t_1, t_2\right)$	Repère lié à la fraction de mélange f
$n_{\phi,j}$	j^{ieme} composante du vecteur normal sortant de la phase ϕ
Nu	Nombre de Nusselt
N_p	Nombre de particules par kilogramme de mélange (kg^{-1})
O_2	Dioxygène
O	Comburant
p, p_K	Pression du fluide et pression partielle de l'espèce K (Pa)
p_{sat}^{vap}	Pression de vapeur saturante (Pa)
p_0	Pression atmosphérique (Pa)
$p_{(xi,t)}, \overline{p}(\ ), \tilde{p}(\ )$	Fonction de répartition de la fraction de mélange au sens de Reynolds et au sens de Favre
P	Produit
Pr	Nombre de Prandtl
PCI	Pouvoir Calorifique Inférieur ($J.kg^{-1}$)
P^D, P^S, P^V	Distribution d'un spectre de goutte en fonction du diamètre, de la surface ou du volume des gouttes
P^k	Terme de production de la turbulence
q_R	Paramètre d'étalement de la distribution de Rosin-Rammler
q_j	Flux de diffusion laminaire de l'énergie
q, r	Paramètres : correction du coefficient de trainée avec évaporation
$\dot{Q}_p$	Flux d'énergie thermique arrivant sur la goutte (W)

$\dot{Q}_l$	Flux d'énergie thermique servant à échauffer la goutte (W)
R_P	Rayon d'une goutte (m)
R_1	Rayon extérieur du film de diffusion massique (m)
R_2	Rayon extérieur du film de diffusion thermique (m)
Re	Nombre de Reynolds d'un écoulement
Re_P	Nombre de Reynolds particulaire
Re_t	Nombre Reynolds lié à l'échelle intégrale
Re_k	Nombre Reynolds lié à l'échelle de Kolmogorov
Re_b	Nombre Reynolds d'évaporation de la particule
s	Coefficient stœchiométrique massique
s_n^g	Ségrégation de la fraction de mélange β_n
s_R	Terme source de rayonnement de l'enthalpie
Sc_ψ	Nombre de Schmidt laminaire du scalaire ψ
$Sc_{\psi t}$	Nombre de Schmidt turbulent du scalaire ψ
Sh	Nombre de Sherwood
S_{foy}	Surface du foyer (Surface de pyrolyse) (m^2)
S_L	Célérité de propagation du front de flamme ($m.s^{-1}$)
t	Temps (s)
T	Température (K)
T_S	Température à la surface de la goutte (K)
T_∞	Température loin d'une goutte isolée (K)
T_A, T_B	Température d'activation (K)
T_p	Température de la goutte (K)
T^{cross}	Température de cross-over (K)
T_{ebu}	Température d'ébullition (K)
u_j	j^{ieme} composante de la vitesse ($m.s^{-1}$)
u_f	Vitesse instantanée du fluide ($m.s^{-1}$)
u_p	Vitesse instantanée d'une particule ($m.s^{-1}$)
u_k	Vitesse caractéristique des fluctuations des microstructures ($m.s^{-1}$) (liée à l'échelle de Kolmogorov)

u_r	Vitesse relative fluide-gouttes (m.s^{-1})
u_t	Vitesse caractéristique des fluctuations des grosses structures (m.s^{-1}) (liée à l'échelle intégrale)
$u_{s\,j}$	j^{ieme} composante de la vitesse de l'interface (m.s^{-1})
$u_{\phi,j}$	j^{ieme} composante de la vitesse de la phase ϕ (m.s^{-1})
u_∞	Vitesse limite de glissement fluide-gouttes (m.s^{-1})
$U_{i,1}^g, U_{i,1}^d$	Déviation liée à la pesanteur et à la dispersion par rapport à la vitesse moyenne du mélange (m.s^{-1})
$V_i^{\,d}, V_i^{\,g}$	Vitesses de glissement dues à la dispersion et à l'apesanteur (m.s^{-1})
V_p	Volume d'une goutte (m^3)
$V_C(D)$	Répartition en volume cumulé (Cumulated distribution function, CDF)
W	Masse molaire (kg.mole^{-1})
X	Fraction massique de diluant dans le mélange Comburant-Diluant
$X_{\max}$	Fraction massique de diluant maximale dans le mélange Comburant-Diluant avant extinction
X_ϕ	Fraction massique de la phase ϕ
y_K	Fraction massique d'une espèce K
y_{vap}^{sat}	Fraction massique de vapeur saturante
y_{vap}^{∞}	Fraction massique de vapeur loin d'une goutte isolée
Z_l	Variables de Schvab-Zel'dovich
Z	Espèces intermédiaires (radicaux)

Lettres grecques :

ρ	Masse volumique (kg.m^{-3})
τ_t	Temps caractéristique de l'échelle intégrale (s)
τ_r	Temps de relaxation de formation des produits jusqu'aux produits prédits (s)
τ_k	Temps caractéristique lié à l'échelle de Kolmogorov (s)
τ_c	Temps caractéristique de la cinétique chimique (s)
τ_χ	Temps de transfert par diffusion (s)
τ_p	Temps caractéristique de la particule (s)
τ_f, τ_f^k, τ_f^m	Temps caractéristiques de l'écoulement fluide (s)
χ_f	Taux de dissipation scalaire de f (s^{-1})

$\chi_{\widetilde{f''^2}}$	Taux de dissipation de la variance (s^{-1})
χ	Paramètre de taille de la particule pour le rayonnement
χ_ϕ	Fonction de présence de la phase ϕ
α_ϕ	Taux de présence de la phase ϕ
α_s	Facteur chimique de ségrégation des réactifs
λ_f	Conductivité thermique du gaz ($W.m^{-1}.K^{-1}$)
$\dot{\omega}_K$	Terme source de production massique de l'espèce K ($kg.m^{-3}.s^{-1}$)
$\dot{\omega}_h$	Terme source de production de l'enthalpie sensible ($J.m^{-3}.s^{-1}$)
ρ_g	Masse volumique de la goutte ($kg.m^{-3}$)
$\delta l_m, \delta l_t\ \delta_{ft}$	Epaisseur des films de diffusion massique et thermique (m)
δ	Distribution de Dirac
δ_L	Epaisseur de la flamme (m)
$\nu_f\ \ \mu_f$	Viscosités cinématique (m^2s^{-1}) et dynamique (Pa.s) du fluide
ψ	Variable quelconque
κ_1 , κ_2	Fraction massique de diluant dans l'entrée combustible et l'entrée oxydant
λ	Longueur d'onde (m)
β_{1LI} , β_{1LS}	Limite d'inflammabilité en β_1
β_n	Fraction de mélange (modèle à multi-fractions de mélange)
$\beta_{\Gamma n}$	Constante pour la fermeture des flux interfaciaux des fractions de mélange
β_n^{cl}	Valeur de la fraction de mélange β_n sur l'interface.
ϕ	Numéro de la phase
ε	Taux de dissipation de l'énergie turbulente ($m^2\ s^{-3}$)
$\gamma_{\psi\phi}$	Terme source local lié aux échanges interfaciaux
$\Gamma_{\psi\phi}$	Terme d'échange moyen de la quantité ψ à l'interface
Π_ϕ	Terme d'échange moyen de l'enthalpie à l'interface ($kg.m^{-1}.s^{-2}$)
Γ_ϕ	Terme d'échange de masse de la phase ϕ à l'interface ($kg.m^{-3}.s^{-1}$)
σ_{ij}, τ_{ij}	Tenseur des contraintes et tenseur des contraintes visqueuses
$\Gamma_{prod}, \Gamma_{diss}$	Termes de production et de dissipation de la variance

Opérateurs

$\langle \psi \rangle_S$	Moyenne statistique
$\langle \psi \rangle_V$	Moyenne volumique
$\sum$	Somme
$\bar{\psi}$	Moyenne de Reynolds
$\tilde{\psi}$	Moyenne de Favre
Δ	Variation
∇	Gradient
$\partial \psi / \partial t$	Dérivée partielle par rapport au temps
$\partial \psi / \partial x_j$	Dérivée partielle par rapport à la j^{ieme} coordonnée spatiale

Liste des figures

Fig.0.1 - Photographies de cas d'incendie dans un tunnel [w1] 29

Fig.0.2 - Schématisation de l'objectif souhaité pour faire interagir le modèle de combustion et la présence d'eau liquide 31

Fig.1.1 - Classification des feux suivant les normes européennes EN2 35

Fig.1.2 - Illustration d'un mécanisme d'alimentation d'un feu 36

Fig.1.3 - Courbe d'évolution de la puissance thermique dégagée par un feu compartimenté en fonction du temps 37

Fig.1.4 - (a) Schématisation de la partition d'un domaine pour le modèle à zones, (b) Champ de température d'un compartiment en feu résolu avec un modèle à champs 39

Fig.1.5 - Nomenclature des différents types de jets de gouttes dépendant de leur taille caractéristique 40

Fig.1.6 - Images laser de la pulvérisation d'un spray polydispersé, *Lueptow* [87] 41

Fig.1.7 - Distribution granulométrique de deux sprays de gouttes : l'un caractéristique des pulvérisations de sprinklers conventionnels et l'autre caractéristique des brouillards d'eau 41

Fig.1.8 - Schématisation et photo de l'atomisation d'un jet d'eau, Faeth [39] 43

Fig.1.9 - Schématisation de deux types de buse avec (b) ou sans (a) chambre de mélange 43

Fig.1.10 - Classification des brouillards d'eau en fonction du $D_{v90,}$ Grant [48] 44

Fig.1.11 - Trois actions sur le triangle du feu 45

Fig.1.12 - Nombre de gouttes et surface d'échange de 1 kg d'eau en fonction du diamètre représentatif, [48] 46

Fig.1.13 - Schématisation d'une expérience contre-courant *a* et co-courant *b* d'une flamme de diffusion s'établissant entre de l'air chargé en gouttelettes et du carburant 48

Fig.1.14 - Schématisation de la méthode "Sampling" (gauche) et la méthode des sections (droite) pour la description eulérienne du brouillard 50

Fig.1.15 - Schématisation des méthodes LES et semi-déterministe avec une séparation du spectre en une partie modélisée et une partie résolue 52

Fig.1.17 - Schéma associé à la formulation de reconstitution des espèces du tableau 1.1 56

Fig.1.18 - Evolution d'une fonction de densité de probabilité - (a) béta - (b) rectangle et pic de Dirac - dont la moyenne vaut 0.4 et dont la ségrégation (Vd : variance adimensionnée) varie..... 57

Fig.2.1 - Evolution de l'énergie interne pendant une transformation chimique, Peters [111] 61

Fig.2.2 - Schématisation d'une flamme de prémélange de bec Bunsen 62

Fig.2.3 - Schéma de principe expliquant l'importance de la comparaison des échelles caractéristiques intégrale, de turbulence et de la cinétique chimique pour les flammes de prémélange 63

Fig.2.4 - Classification des flammes de prémélange turbulente 64

Fig.2.5 - Schématisation d'une flamme de diffusion 65

Fig.2.6 - Schéma explicatif des mouvements aléatoires de la zone de réaction des flammes de diffusion dans un écoulement turbulent 65

Fig.2.7 - Notion de structure de flamme dans le repère de la fraction de mélange 67

Fig.2.8 - Schéma expliquant l'importance de la comparaison des échelles caractéristiques intégrale, de turbulence, et de la cinétique chimique et de diffusion pour les flammes de diffusion 69

Fig.2.9 - Schématisation du mélange à faible et forte ségrégation 69

Fig.2.10 - Régime de combustion turbulente non-prémélangé 70

Fig.2.11 - Configuration d'un mélange avec diluant prémélangé 71

Fig.2.12 - Configuration d'un mélange à trois entrées distinctes (a) et d'une dilution par changement de phase (b) 72

Fig.2.13 - Visualisation du domaine d'inflammabilité de mélange. (a) effet de la température initiale, (b) effet de la dilution 74

Fig.2.14 - Importance de la nature du diluant pour définir le domaine inflammable, d'après Drysdale [36] 74

Fig.2.15 - Température de croisement en fonction de la richesse 77

Fig.2.16 - Chaleur nécessaire à l'élévation d'un kilogramme d'eau 78

Fig.2.17 - Schématisation de l'évaporation d'une goutte 79

Fig.2.18 - Schématisation de l'intégration des fluctuations des vitesses du gaz lors du transport de particules dont le temps caractéristique de réponse est beaucoup plus grand que le temps caractéristique des fluctuations 83

Fig.2.19 - Evolution du coefficient de traînée en fonction du nombre de Reynolds de glissement pour des particules avec plusieurs profiles 83

Fig.2.20 - Schéma explicatif de définition du temps caractéristique des vitesses moyennes du fluide 85

Fig.3.1 - Reconstitution des fractions massiques des espèces dans le cas de chimie figée 95

Fig.3.2 - Reconstitution des fractions massiques des espèces dans le cas de chimie infiniment rapide et totale 96

Fig.3.3 - Reconstitution des fractions massiques des espèces dans le cas d'une chimie paramétrée par un avancement constant 98

Fig.3.4 - Visualisation du domaine d'inflammabilité dans le diagramme des fractions de mélange 98

Fig.3.5 - Visualisation des évolutions de la fraction de mélange avec et sans la prise en compte des micro-fluctuations 100

Fig.3.6 - Visualisation de deux types de fonction de densité de probabilité présumée utilisant différentes hypothèses de mélange : a) PDF beta généralisée ; b) PDF à support réduit 103

Fig.3.7 - Représentation d'un exemple de mélange avec un temps de coexistence air-vapeur important avant la rencontre avec le fuel 103

Fig.3.8 - Evolution des ségrégations des trois fractions de mélange dans le cadre d'une fraction massique d'eau s'évaporant près du front de flamme : estimation de l'erreur faite par la PDF à support réduit..... 105

Fig.3.9 - Schématisation du cas test de simulation 2D 105

Fig.3.10 - Evolution au cours du temps des champs de fractions massique d'eau, de vapeur et de température 106

Fig.3.11 - Les champs des corrélations entre les trois couples de fractions de mélange..... 106

Fig.3.12 - Visualisation de l'évolution des produits moyens lors du mélange intime en prenant ou pas en compte les limites d'inflammabilité lorsque le mélange est introduit dans des proportions inflammables (a) ou non inflammables (b) 108

Fig.3.13 - Visualisation de la formation irréversible des produits moyens dans le cas du modèle CLIirr 110

Fig.3.14 - Schéma explicatif de la dégénérescence des lois de reconstruction sur le support de PDF réduit. Exemple donné pour la reconstitution des espèces en chimie infiniment rapide : $c_{\beta_1} = 1$ 114

Fig.3.15 - Evolution de la fraction de mélange stœchiométrique en fonction du taux de dilution X ... 115

Fig.3.16 - Schématisation de la dégénérescence du domaine d'inflammabilité à un intervalle d'inflammabilité 116

Fig.3.17 - Reconstruction des fractions massiques du comburant, du combustible, des produits et du diluant dans le schéma simplifié..... 117

Fig.3.18 - Répartition de l'énergie du gaz dans le cadre des échanges thermiques entre la phase liquide et le mélange air-vapeur 118

Fig.3.19 - Visualisation d'un champ à deux phases séparées par une interface..... 119

Fig.3.20 - Schématisation unidirectionnelle des flux turbulents de la fraction de mélange - (a) fermeture du flux turbulent par une loi gradient usuel. (b, c) fermeture tenant compte de l'expansion thermique avec ou sans inversion du sens des flux..... 135

Fig.3.21 - Visualisation des flux turbulents de la fraction de mélange avec un modèle de fermeture usuel de gradient (flèches rouges) et avec le nouveau modèle de fermeture proposé (flèches noires) pour une configuration de flamme jet 136

Fig.3.22 - Modèle de transport turbulent dans les flammes non prémélangées 139

Fig.3.23 - Schéma représentatif du modèle global décrivant l'interaction entre la phase liquide et le modèle de combustion 145

Fig.4.1 - Schématisation des cas test unitaires de flamme de diffusion en configuration « co-courant » et « contre-courant » 149

Fig.4.2 - Résultats numériques de la composante verticale de la vitesse aux altitudes 0.1 m, 0.2 m et 0.3 m d'une flamme de diffusion en configuration co-courante (avec raffinement de maillage) 151

Fig.4.3 - Résultat numérique de la ségrégation de la fraction de mélange combustible aux altitudes 0.1 m, 0.2 m et 0.3 m d'une flamme de diffusion en configuration co-courante (avec raffinement de maillage) 151

Fig.4.4 - Cartographies des champs de température d'une flamme de diffusion à contre-courant avec des vitesses d'injection des réactifs de 0.05 m/s (a), de 0.5 m/s (b), de 1.5 m/s (c) et de 5 m/s (d) .. 152

Fig.4.5 - Comparaison des profils de température le long du plan de combustion pour les cas d'injection à 0.05 m/s, 0.5 m/s, 1,5 m/s et 5 m/s 153

Fig.4.6 - Profil (le long d'un axe vertical situé à 50 cm de l'axe de symétrie d'une flamme de diffusion à contre courant) de la fraction de mélange et de la ségrégation du combustible dans les cas d'injection à 0.05 m/s (a), 0.5 m/s (b), 1.5 m/s (c) et 5 m/s (d)..... 153

Fig.4.7 - Profil (le long d'un axe vertical situé à 50 cm de l'axe de symétrie d'une flamme de diffusion à contre courant) des fractions massiques de produit prédites (2) et transportées (3) par le modèle CLIirr en comparaison avec le profil de la fraction massique des produits calculées via le schéma de chimie infiniment rapide (1) dans les cas d'injection à 0.05 m/s (a), 0.5 m/s (b), 1.5 m/s (c) et 5 m/s (d)..... 154

Fig.4.8 - Visualisation de la température maximale dans la flamme de diffusion en configuration co-courante pour un taux de dilution croissant du comburant en vapeur d'eau - Comparaison entre le modèle CLIirr et le modèle à chimie infiniment rapide 156

Fig.4.9 - Evolution des limites d'inflammabilité β_{1LI} et β_{1LI} avec un taux de dilution (X) croissant en vapeur d'eau dans l'entrée comburante 157

Fig.4.10 - Comparaison de l'évolution des limites d'inflammabilité β_{1LI} et β_{1LI} en fonction du taux de dilution (X) de l'air pour la dilution en vapeur d'eau et en azote 158

Fig.4.11 - Evolution du domaine d'inflammabilité pour des températures d'injection de 300 K, 500 K, 700 K et 900 K dans le cas de dilution par la vapeur d'eau 158

Fig.4.12 - Représentation de la décantation d'eau liquide dans un écoulement de canal plan pour des injections de gouttes de taille 50 µm, 70 µm, 100 µm et 150 µm..... 160

Fig.4.13 - Comparaison des vitesses de décantation du front d'eau de glissement des gouttes d'eau 161

Fig.4.14 - Schématisation du cas test unitaires d'une pulvérisation de deux jets « co-courants » ou « contre courant », l'un étant de l'air sec à 800 K et l'autre étant de l'air chargé en gouttes à 300 K.162
Fig.4.15 - Comparaison des échanges interfaciaux entre les deux phases à différentes altitudes (5 cm, 15 cm, 30 cm, 50 cm) dans la configuration « co-courants » pour des tailles de gouttes injectées de 50 µm et 250 µm 163

Fig.4.16 - Représentation de la pénétration d'un jet de gouttes (air chargé à 2% de fraction massique de goutte à 300K) dans un jet d'air sec et chaud (800K) pour différents diamètres de goutte (50µm, 100 µm, 200 µm, 250 µm, 300 µm) 164

Fig.4.17 - Profil (le long d'un axe vertical situé à 6 cm de l'axe de symétrie) des fractions massiques d'eau liquide et de la vitesse de glissement pour des injections de gouttes de diamètre initial de 50µm, 100 µm, 200 µm, 250 µm et 300 µm 165

Fig.4.18 - Profil (le long d'un axe vertical situé à 6 cm de l'axe de symétrie) de la température du gaz et de l'eau des injections de gouttes de diamètre initial de 50µm, 100 µm, 200µm, 250 µm et 300 µm 165

Fig.4.19 - Schématisation du dispositif expérimental du brûleur modifié Wolfhard & Parker 166

Fig.4.20 - Champs et profils de température moyenne au sein d'une flamme de diffusion comparés à l'expérience de Prasad dans le cadre d'un mélange combustible avec de l'air pur (a), avec de l'air dilué à 3% d'azote (b), ou de l'air dilué à 3% de vapeur d'eau (c) 168

Fig.4.21 - Comparaison du profil de température sur un plan horizontal situé à 10 mm d'altitude dans le cas d'une flamme de diffusion de l'air, de l'air dilué à 3% de vapeur et de l'air chargé à 3% d'eau liquide (taille des gouttes de 50 µm) 169

Fig.4.22 - Evolution des champs de températures moyennes du gaz pour des fractions volumiques de gouttes (taille fixée à 50µm) croissantes dans le courant de comburant 170

Fig.4.23 - Visualisation des iso-températures (K) superposées aux champs de fractions massique d'eau liquide 171

Fig.4.24 - Visualisation des iso-fraction massique de diluant (vapeur) superposées aux champs du taux de combustible imbrûlé 172

Liste des tableaux

Tab.2.1 - Limites d'inflammabilité, et température d'auto-inflammation de différents combustibles dans les conditions ambiantes (tiré de [5]) 73

Tab.3.1 - Conditions limite des variables de Zeldovich 93

Tab.3.2 - Conditions limite pour l'enthalpie massique 94

Tab.3.3 - Récapitulatif des termes introduits dans les équations locales 120

Tab.3.4 - Récapitulatifs des termes introduits pour les équations locales après la modélisation des flux laminaires 122

Tab.3.5 - Valeurs des constantes du modèle k-ε 132

Tab.3.6 - Récapitulatifs des termes introduits pour les équations locales après la modélisation des flux laminaires 144

Tab.4.1 - Caractéristiques de l'ensemble des cas liés à l'étude de convergence en maillage 150

Tab.4.2 - Caractéristiques de l'ensemble des cas de flammes à jets contre courants 152

Tab.4.3 - Caractéristiques de l'ensemble des cas représentant une flamme jets co-courants progressivement diluée en vapeur d'eau 155

Tab.4.4 - Caractéristiques de l'ensemble des cas de pulvérisation horizontale d'un jet liquide 160

Tab.4.5 - Caractéristiques de l'ensemble des cas représentant la configuration (a) de la figure 4.14 162

Tab.4.6 - Caractéristiques de l'ensemble des cas représentant la configuration (b) de la figure 4.14 164

Tab.4.7 - Caractéristiques des simulations numériques reproduisant les cas expérimentaux 167

Tab.4.8 - Caractéristiques des deux cas de pulvérisation d'un brouillard d'eau à proximité d'un foyer 171

INTRODUCTION

La sécurité incendie est une problématique majeure de notre société. Le coût en vies humaines et en dégradations matérielles peut être conséquent voire désastreux. Les développements des moyens pour la lutte incendie diminuent considérablement les risques et amoindrissent les lourdes conséquences économiques, environnementales, et en vies humaines. On peut citer l'exemple de l'incendie du 7 avril 1989 du Komsomolets, sous-marin nucléaire soviétique, dont le naufrage dans les eaux norvégiennes a provoqué la mort de 42 sous-mariniers et des risques de contaminations radioactives. D'autres incendies ont aussi été désastreux comme par exemple l'événement du tunnel du Mont Blanc (Fig.0.1) en France ou l'incendie de la centrale de Fukushima au Japon. Dans le cadre du milieu industriel, sans compter les dommages collatéraux liés aux ralentissements de l'activité consécutifs aux pertes d'infrastructures, on peut parler parfois de frais colossaux pour la reconstruction et les dédommagements des sinistrés.

Fig.0.1 - Photographies de cas d'incendie dans un tunnel [w1]

L'importance économique et sociale de la sécurité incendie prend son sens dès que l'on visualise les chiffres : Le Service Départementaux d'Incendie et de Secours (SDIS) annonce entre 300 et 400 décès et 10 000 victimes par an avec un nombre annuel d'incendies en France avoisinant la centaine de milliers (un incendie domestique toutes les 2 minutes). Le coût annuel des incendies domestiques s'élèvent à 1,3 milliards d'euros, soit 30% de plus que celui des dégâts des eaux et le coût total des dégâts incendie dans les pays développés est d'environ 1% du PIB. Bien que la lutte contre l'incendie relève généralement du domaine des sapeurs-pompiers, des systèmes de lutte sont de plus en plus utilisés pour prévenir et combattre les départs de feux. Ces diverses techniques utilisées pour la sécurité incendie font l'objet de recherches et d'études afin d'évaluer l'efficacité des processus et faire les choix adéquats d'installation.

La sécurité incendie passe par la compréhension des flammes non-contrôlées sujettes à des phénomènes multiples et très divers dont l'étude est généralement très spécifique de la nature du feu. Le contexte d'apparition (combustible, environnement, ventilation etc.) joue un rôle sur la puissance du foyer, les caractéristiques des flammes, et les autres phénoménologies qui régiront l'incendie suivant divers scénarios.

Différents modèles physiques sont utilisés pour décrire ces différentes phénoménologies. Dans le cadre de cette étude, l'objectif principal est de comprendre comment modéliser l'introduction d'un spray pulvérisé de gouttelettes afin de combattre l'incendie.

Objectifs de la thèse

Description du brouillard d'eau.

L'objectif principal se focalise ici sur la représentation fine de l'interaction entre le brouillard et la flamme. Notre étude s'intéresse principalement aux mécanismes d'extinction par les effets de refroidissement et de dilution. Une évaluation satisfaisante de la trajectoire des gouttes reste, dans une certaine mesure, nécessaire pour évaluer correctement les fractions massiques d'eau liquide induisant les transferts de masse (évaporation des gouttes) et de chaleur (refroidissement par diffusion thermique et changement de phase). S'il existe un grand nombre de descriptions diphasiques, nous nous focaliserons sur une description dont le degré de finesse sera suffisant pour évaluer de manière pertinente la présence des gouttes lors de simulations de pulvérisation dans des configurations industrielles à grandes échelles. Le modèle retenu résultera donc d'un compromis entre la finesse des représentations physiques et le coût associé à la simulation de géométries représentatives.

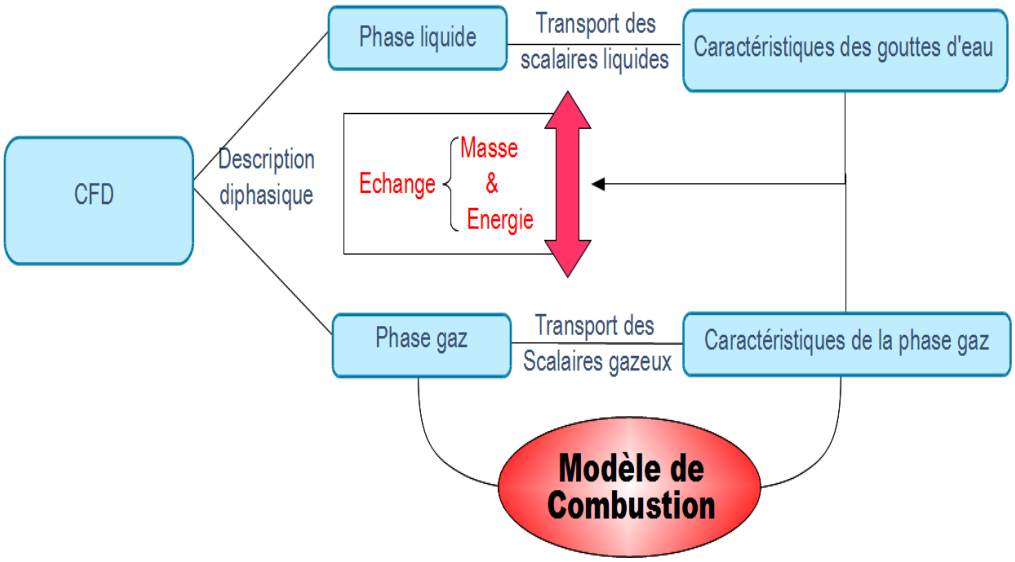


Fig.0.2 - Schématisation de l'objectif souhaité pour faire interagir le modèle de combustion et la présence d'eau liquide

Description d'un modèle de combustion adapté à l'extinction en milieu diphasique.

Suite au développement d'un modèle diphasique adéquat, notre intérêt portera sur l'élaboration d'un modèle de combustion affecté par les flux de masse et de chaleur entre les phases. Cet objectif se décline suivant deux axes principaux :

- Décrire la flamme avec le modèle le mieux approprié pour tenir compte de l'aspect diphasique et de la dilution. Les modèles de reconstitution des compositions et de la température ainsi que les modèles de fermeture des flux de transport constitueront de ce point de vue des choix d'importance pour le développement du modèle.

- Introduire une chimie de réaction influencée par ces échanges de masse et de chaleur entre les deux phases. Nous tenterons de définir un modèle permettant de donner de bons résultats pour les flammes se développant dans un environnement turbulent et dilué.

Nous parlons ici d'interaction car cette combustion, influencée par l'évaporation et le refroidissement, modifie les caractéristiques du gaz et par conséquent, les échanges entre les deux phases.

Mise en œuvre du modèle dans un code CFD

Pour des raisons pratiques, le logiciel *Code_Saturne* [4] a été retenu pour être le code support des développements réalisés durant la thèse. En effet, le libre accès aux sources et la proximité de l'équipe de développement constituent un environnement favorable à la mise en œuvre de nouveaux modèles dans *Code_Saturne*. De plus, ce code a été le support de développement de modèles physiques (combustion gaz, transport de particules charbon) qui favorisent la mise en place du modèle d'interaction entre un foyer et un brouillard d'eau.

Validation du modèle

Une fois l'ensemble des développements mis en place, les différentes phases de validation se sont succédées sur des cas élémentaires permettant de vérifier le bon comportement des modèles (i.e. la pertinence des principales hypothèses) aux cas plus représentatifs des configurations d'intérêt industriel (grand volume, interaction, etc.).

I. CONTEXTE PRATIQUE ET SCIENTIFIQUE

I.1. Description des incendies en milieu confiné

Cette première partie présente quelques généralités sur les feux compartimentés ainsi que les différents niveaux de description d'un incendie. Cela permettra de bien replacer dans leur contexte les différents aspects de la problématique considérée.

I.1.1. Généralités

Dans le cadre des milieux confinés (tunnel, locaux), il existe plusieurs phénomènes qui régissent le comportement de l'incendie. On peut citer par exemple la forte influence des effets de ventilation et de confinement (apport de l'oxygène nécessaire) sur le développement de l'incendie. De plus, le comportement thermique des locaux donne des caractéristiques spécifiques aux feux en milieu confiné où les flux de chaleur rayonnée jouent un rôle plus conséquent.

On répertorie les feux suivant différentes classes en fonction de la nature du feu et du type de combustible qui brûle (norme européenne EN2 : Fig1.1). Les feux «secs» lié à la pyrolyse de matériaux formant des braises tel le bois ou les tissus sont des feux de classe A. Les feux « gras », feux de liquides inflammables (huiles, essences) constituent la classe B. Les feux de classe C sont les feux de gaz inflammables (méthane, propane). Il existe d'autres types de feux comme la classe D incluant les feux de métaux et la classe E regroupant les feux causés par des agents électriques. En fonction de la classe d'appartenance d'un incendie, différentes méthodes de lutte sont mises en œuvre. Chacune est plus ou moins adéquate à combattre certains types de feux.

APPAREILS EXTINCTEURS	A SOLIDES	B LIQUIDES Hydrocar-bures	B LIQUIDES Solvant Polaire	C GAZ	D METAUX	E EQUIPEMENTS ELECTRIQUES SOUS TENTION
LIQUIDE						
Lances, RIA, extincteurs à eau jet plein	++	-	-	-	--	--
Lances, RIA, extincteurs à eau jet pulvérisé	+	+/-	+/-	-	--	+/-
Lances et extincteurs à additif A.F.F.F	+	++	++	+/-	--	-
Lances et extincteurs à mousse	+	++	+/-	+/-	--	-
SOLIDE						
Extincteurs à poudre B.C	+/-	++	++	++	--	+
Extincteurs à poudre A.B.C (Sel métallique ou sulfaté)	+	+	+	+	--	+/-
Extincteurs à poudre D	-	-	-	-	++	-
GAZ						
Extincteurs à halons	+/-	+	+	+	+/-	+/-
Extincteurs à CO2	-	+	+	+/-	--	++
AUTRE						
Sable	++	++	++	++	++	++
Couverture	++	++	++	++	++	++

++ convient très bien + convient +/- convient partiellement - ne convient pas -- dangereux

Fig.1.1 - Classification des feux suivant les normes européennes EN2

Les foyers incendie peuvent balayer une grande gamme de puissance. Cette puissance évolue au cours de l'incendie en fonction de son développement. On peut aller de quelques dizaines de watts pour un feu de bougie jusqu'à la dizaine de mégawatts pour l'embrasement généralisé d'un immeuble. La puissance « potentielle » (Heat Release Rate : HRR) libérée lors d'un incendie est liée au débit de

pyrolyse des matériaux et à la nature du gaz combustible. En effet, la puissance d'un foyer (HRR) est évaluée en fonction du Pouvoir Calorifique Inférieur (PCI) du matériau, de la surface du foyer (S_{foy}) et du débit massique surfacique ($\dot{m}_{foy}$) (Eq.1.1).

$$HRR = S_{foy}\ \dot{m}_{foy}\ PCI \qquad (1.1)$$

Lors d'un incendie, divers scénarios sont susceptibles de se produire comme par exemple le backdraft qui est un phénomène courant de réinflammation instantanée des gaz imbrûlés. En effet, si l'apport en oxygène devient trop faible, les gaz combustibles en excès ne brûlent pas complètement. L'introduction soudaine d'une source d'air (ouverture d'une porte ou d'une fenêtre) entraîne le réembrasement fulgurant des gaz préchauffés (voir partiellement convertis) du domaine. La difficulté des études « incendie » se présente comme l'analyse de tous les scénarios possibles utiles à une meilleure compréhension des phénomènes mis en jeu menant à l'amélioration, aux développements, et à la préoccupation majeure des industriels au dimensionnement des systèmes de lutte.

a. Trois facteurs importants caractérisant un incendie

L'évolution et l'entretien d'un incendie, s'analysent par les rôles des différents facteurs du triangle du feu qui alimentent le processus (Fig.1.2) **:** Les 3 agents nécessaires à la création puis au maintien d'une flamme sont :

- Le combustible (hydrocarbure, bois, métaux etc.)
- Le comburant contenant l'oxygène nécessaire à la combustion,
- L'énergie nécessaire au processus d'activation de la réaction et à l'étape de pyrolyse de matériaux combustibles.

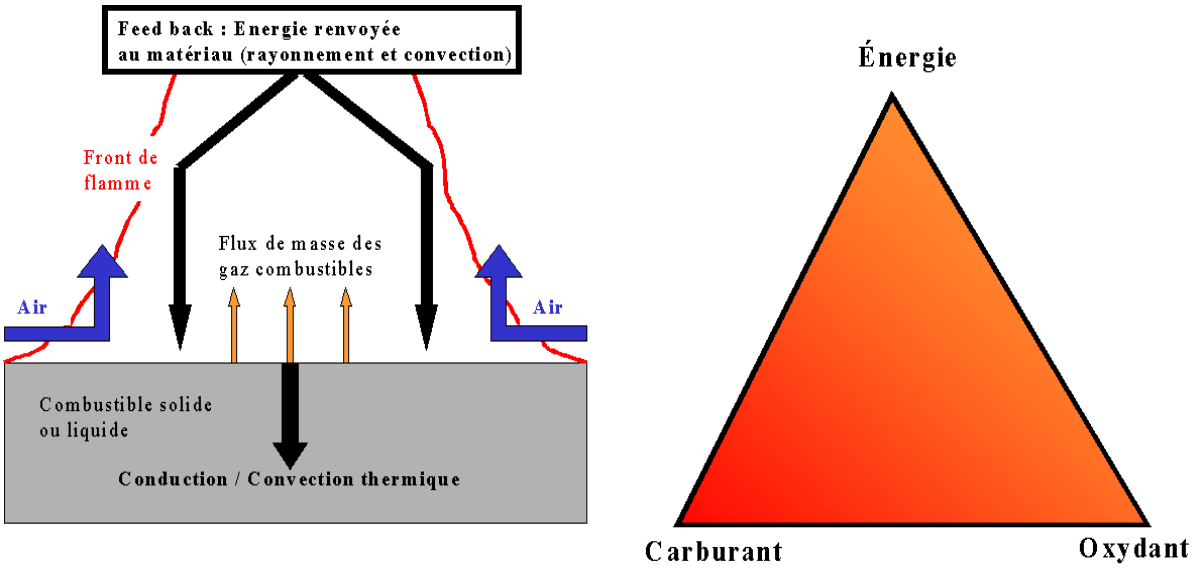


Fig.1.2 - Illustration d'un mécanisme d'alimentation d'un feu

Ces trois agents interagissent fortement lors d'un incendie. La combustion permet de fournir l'énergie nécessaire à la gazéification des solides et donc la production de vapeurs combustibles qui réagissent avec l'arrivée d'oxydant (généralement de l'air). Ce cycle nous permet de comprendre comment un feu est entretenu et, priver l'incendie de l'un de ses 3 composants permet donc l'extinction. Ainsi, la lutte contre les incendies relève le plus souvent d'un procédé modifiant fortement l'approvisionnement de ces éléments. Par exemple, mettre de la peinture anti-feu sur un matériau solide permet de limiter la pyrolyse du matériau et de réduire la gazéification du solide. Diluer l'arrivée d'air contenant l'oxygène par un gaz inerte permet de réduire la teneur du comburant et d'étouffer la flamme.

b. Etapes d'un incendie

Dans un local compartimenté, un incendie suit une succession d'étapes pouvant, pour chacune d'elles, être avortée en fonction de l'environnement où l'incendie se propage.

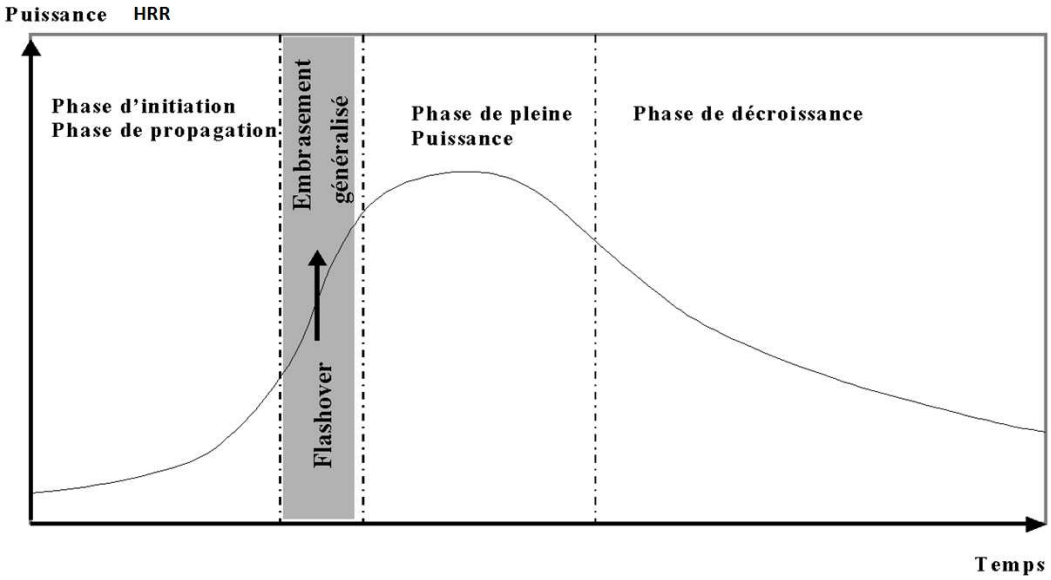


Fig.1.3 - Courbe d'évolution de la puissance thermique dégagée par un feu compartimenté en fonction du temps

L'ensemble du scénario, exhaustivement décrit par Grant [48], peut se décomposer en 4 étapes caractéristiques du développement d'un feu (Fig.1.3) :

- La phase initiale : suite au départ de l'incendie (causé par l'apport ponctuel d'une source de chaleur), le feu reste localisé pendant une durée variable. Durant cette période, il est très aisé de maîtriser l'incendie car la température n'est pas encore très élevée et le dégagement des fumées reste limité. L'étape de propagation correspond au développement du feu. Des foyers secondaires se forment par contamination de proche en proche. Elle se traduit par une augmentation sensible de la température moyenne de la pièce. L'agencement des matériaux susceptibles de jouer le rôle de combustible est donc très important. Effectivement, si les foyers secondaires sont trop éloignés, il est possible que la propagation soit avortée produisant l'extinction anticipée de l'incendie par défaut de combustible.

- Le flashover : lors du développent du feu, les fumées impactant le plafond s'accumulent pour former une zone chaude située dans la partie supérieure du local alors que les gaz à température moins élevée restent dans la partie inférieure du local. C'est le processus de stratification. Les fumées rayonnent sur le foyer ; ce qui augmente exponentiellement le débit de pyrolyse et donc la puissance du feu. Lorsque le feu est suffisamment nourri en oxygène, l'incendie poursuit sa progression pour donner lieu à un embrasement généralisé. La température dans le local peut dépasser les 500°C. Le flashover se produit plus difficilement si la pièce est sous ventilée (taux d'oxygène inférieur à 12%) ou si le combustible vient à manquer.

- La phase de pleine puissance de l'incendie peut durer plusieurs heures en fonction de la quantité de combustible disponible. Elle suppose que l'apport d'air frais est suffisant pour ne pas étouffer l'incendie.

- L'extinction est la phase finale du processus. Sans considérer les extinctions forcées, la cause principale d'extinction est l'épuisement du combustible.

I.1.2. Travaux réalisés

La compréhension des phénomènes régissant la propagation d'un feu et des gaz chauds lors d'un incendie est indispensable à l'évaluation des risques et à la mise en œuvre de protections appropriées. Le développement de nouveaux procédés ainsi que l'amélioration des moyens de lutte contre les incendies ont suscité de nombreux travaux de recherche sur l'analyse des phénomènes ayant un rôle sensible sur les caractéristiques d'un feu.

a. Etudes expérimentales

Cette meilleure compréhension des incendies passe dans un premier temps par des études expérimentales. Sans être exhaustif, on peut citer les travaux de Huang et al. [55] qui ont étudié le comportement des incendies en tunnel sous ventilation forcée. Ils ont observé l'effet de cette ventilation qui attise le foyer lorsqu'elle est faible mais qui, à plus fort débit, dilue les gaz combustibles précipitant l'extinction. Une autre étude, Mahmoud et al. [90], analyse les caractéristiques d'un panache en fonction de l'altitude du foyer et montre qu'une source surélevée conditionne le redressement vertical du profil de vitesse et limite l'extension latérale du panache. Blanchat [13] s'est focalisée sur la quantification de la part d'énergie rayonnée sur l'ensemble des flux de chaleur. Yang [144] a étudié les domaines de stabilité des stratifications des fumées en fonction du taux de cisaillement entre les gaz frais et les gaz brûlés lors de la ventilation latérale en tunnel. D'autres caractéristiques ont été étudiées, comme par exemple la formation des suies jouant sur la visibilité ou les effets de réémission de chaleur par le rayonnement des parois.

b. Etudes numériques

Le comportement d'un incendie peut aussi être évalué par des approches de modélisation et des simulations numériques. Différents phénomènes peuvent être décrits comme les modèles de pyrolyse (Suuberg, [134], Novozhilov [107]) ou de Rayonnement [32] par exemple. L'ensemble des modèles peuvent s'inscrire dans deux types de méthodes pour quantifier numériquement l'évolution d'un feu : les modèles à zones (Code 0-D) ou les modèles à champs (dites simulations CFD - Computational Fluid Dynamics).

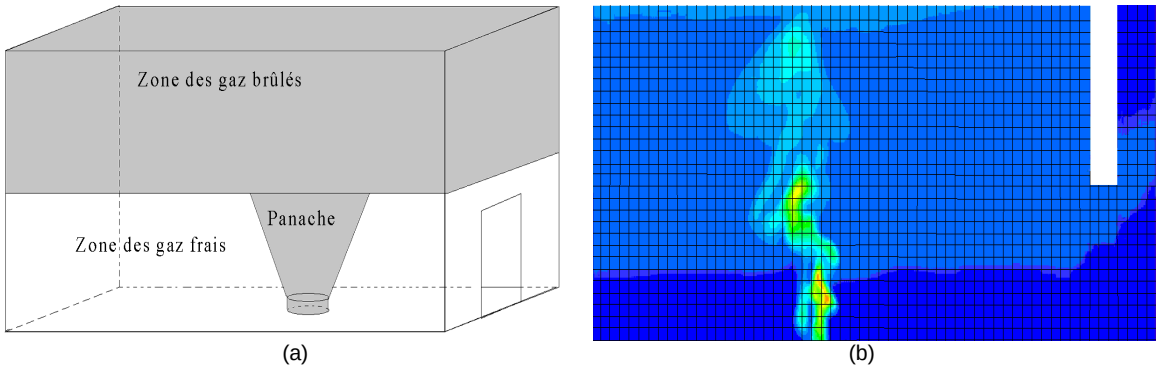
- **Méthodes à zones**

Les méthodes d'analyse dites « à zones », telles que celle déployée dans le logiciel MAGIC, ont été largement utilisées pour prédire les effets du feu et des fumées dans des compartiments fermés. Le domaine est généralement divisé en deux zones ou plus (une zone de température élevée supérieure, une zone d'entraînement d'air frais, la zone du panache, etc. Fig.1.4.a).

Les modèles à zones résolvent des systèmes d'équations homogènes comportant des termes d'échanges empiriques basés sur l'expérience (flux transférés entre les zones, température, dimension, composition). Ces équations souvent ajustées pour prédire au mieux les caractéristiques d'un incendie octroient aux modèles à zones une certaine fiabilité mais ne précisent pas les profils de vitesse et les champs des grandeurs dans chacune des zones.

Ces modèles, matures, sont appliqués pour la simulation des incendies de bâtiments avec des géométries simples. Les équations de conservation de masse et de l'énergie sont résolues à chaque pas de temps pour chacune des zones. L'équation de conservation de quantité de mouvement n'est pas explicitement appliquée, mais on considère des informations importantes comme les vitesses et les pressions à travers les ouvertures par le biais d'expressions analytiques venant d'un certain nombre d'hypothèses restrictives (Carlson [21]).

Les limites de ces méthodes sont bien détaillées dans l'ouvrage de Cox [28].



(a) (b)

Fig.1.4 - (a) Schématisation de la partition d'un domaine pour le modèle à zones, (b) Champ de température d'un compartiment en feu résolu avec un modèle à champs

- **Méthodes à champs**

La nécessité de prédire plus précisément des incendies, sans hypothèses restrictives de stratification ou de géométrie simple, a orienté les choix vers les méthodes CFD qui ont connu un grand succès dans de nombreuses applications concernant les écoulements. La résolution numérique des équations aux dérivées partielles de la dynamique des fluides permet de décrire le mouvement, les transferts de chaleur et le transport des espèces. Ces équations non linéaires ne possèdent généralement pas de solutions analytiques mais une discrétisation du domaine et du temps permet de fournir une approximation numérique de la solution sous forme de champs spatio-temporels tels que le champ de température (Fig.1.4.b) ou les profils de vitesse. Les méthodes à champs se décomposent en trois étapes fondamentales :

- La division du domaine en petits volumes de contrôle (maillage) et la définition des conditions aux limites.
- La résolution des équations de conservation.
- Le post-traitement de la solution pour obtenir des résultats globaux tels que le taux de dégagement de chaleur [93].

Cette approche implique une description de la chimie, de l'écoulement turbulent et du rayonnement thermique par des modèles de fermeture appropriés qui introduiront de forts couplages entre ces physiques. Par exemple, les effets liés à la turbulence ont des implications importantes lors du transport et du mélange des espèces avant réaction.

Moyennant la disponibilité d'une certaine puissance de calcul, il devient possible de résoudre de tels systèmes d'équations et c'est pourquoi les codes numériques modélisant les incendies par les méthodes CFD (Code Saturne, Openfoam, Fluent, FDS, etc.) ont pu se développer durant ces dernières années suite à l'accroissement important des ressources informatiques dans la décennie passée.

Le développement de ces méthodes a permis de mieux comprendre certains phénomènes comme l'influence de la combustion turbulente [138], du confinement, de la ventilation et du rayonnement sur l'évolution d'un incendie. Par exemple, Novozhilov [106] s'est interrogé sur la vitesse de dégradation des solides en pyrolyse produisant un combustible alimentant une flamme. D'autre part, un grand nombre d'étude de flammes ([11], [108], [109], [127]) a permis de mieux comprendre leur comportement lors des incendies [143].

I.2. Lutte contre l'incendie par brouillard d'eau

Deux enquêtes récentes menées au Royaume-Uni et dans l'Union Européenne ont montré que dans près de 80% des incendies, des extincteurs ont été utilisés pour éteindre les feux dans leur phase initiale [45]. Les feux ont été traités efficacement via l'utilisation d'extincteurs empêchant leur développement. L'un des procédés connus est la pulvérisation de brouillard d'eau. Cette partie vise à caractériser plus précisément les moyens de lutte par brouillard d'eau.

I.2.1. Passage des halons aux pulvérisations de gouttes d'eau

Les processus d'extinction par les agents chimiques actifs (les halons) ont été longtemps utilisés pour leur grande capacité inhibitrice. Cependant, un accord international (1995) a banni cette méthode d'extinction pour ses effets toxiques et polluants (gaz à effet de serre). Depuis, de nombreuses autres techniques ont fait l'objet de développement pour améliorer leurs effets sur les incendies. On peut faire référence à plusieurs catégories de système d'extinction en fonction de la nature de l'agent extincteur pouvant se présenter sous forme de gaz (argon, azote, dioxyde de carbone, etc.), de mousses, de poudres, ou d'eau. Chacun est plus ou moins capable d'éteindre une catégorie de foyer incendie. Les études de risque évaluent les types de feux les plus probables pour intervenir au mieux avec les agents extincteurs appropriés (Fig.1.1).

Les extincteurs à mousse (AFFF), sont efficaces sur les feux de classe A et B. Toutefois, ils sont de moins en moins utilisés en raison de préoccupations environnementales [27]. Un extincteur à poudre est principalement utilisé contre les incendies de classe B et C. L'extinction par un gaz consiste à envoyer un gaz inerte dans les milieux confinés pour asphyxier la flamme. Cette technique est efficace mais limite son domaine d'application à un environnement où les ouvertures (portes et fenêtres) avec l'extérieur sont limitées. De plus, cette technique peut présenter des dangers d'asphyxie pour les personnes à proximité et doit donc s'opérer dans des locaux préalablement évacués, ce qui réduit son champ d'application. Par exemple, le dioxyde de carbone est un inhibiteur souvent utilisé lors des incendies à risques électriques sous tension, mais n'est pas utilisé pour éteindre les feux de classe A. Les extinctions à l'eau sont aussi très efficaces. Il existe plusieurs types d'extincteur : extincteur types jet plein (lance) et les extincteurs à jet pulvérisé (sprinklers conventionnels et pulvérisateurs brouillard d'eau). Les extinctions à eau sont souvent retenues pour leurs actions multiples sur l'incendie. Nous verrons que ce procédé agit sur les trois sources du triangle du feu. De plus, la présence de vapeur d'eau permettant l'agglomération des particules de fumée et réduisant ainsi les dommages causés par celle-ci, rend ce système de protection extrêmement efficace.

I.2.2. Nomenclature des sprays : Norme NFPA

La figure 1.5, reprise d'après la caractérisation de Grant [48], présente la nomenclature adoptée pour qualifier les jets issus de systèmes d'aspersion d'eau suivant la taille des gouttes.

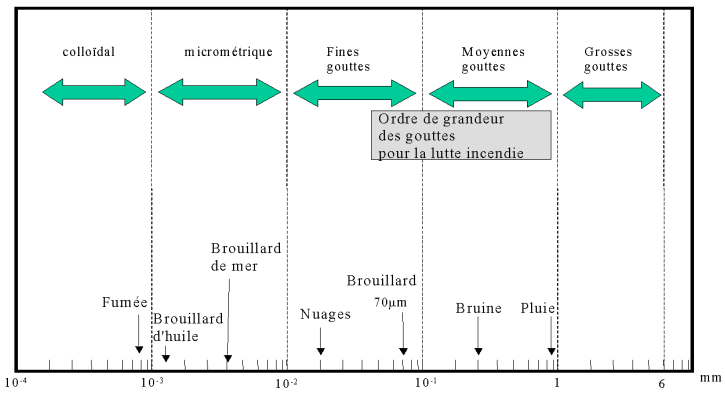


Fig.1.5 - Nomenclature des différents types de jets de gouttes dépendant de leur taille caractéristique

Ces brouillards ne sont pas monodisperses et possèdent généralement un étalement de leur spectre en taille. On peut visualiser par exemple la photographie de Lueptow ([87], Fig.1.6) qui rend bien compte de ce caractère polydisperse du brouillard.

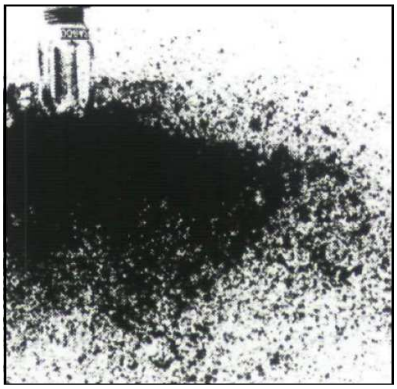


Fig.1.6 - Images laser de la pulvérisation d'un spray polydispersé, *Lueptow* [87]

Pour caractériser un spray, il est donc nécessaire de définir la notion de diamètre caractéristique. Le plus souvent, on utilise des diamètres cumulés en volume (Dv_{XX}). Cette notation signifie que XX% du volume liquide contient des gouttes dont le diamètre est inférieur à Dv_{XX}. D'après les normes initialement adoptées (NFPA 750 [99]), un brouillard d'eau est caractérisé par un Dv_{95} inférieur à 1000 µm alors que les sprinklers conventionnels génèrent plus généralement des sprays dont le Dv_{95} est de l'ordre de 5000 µm.

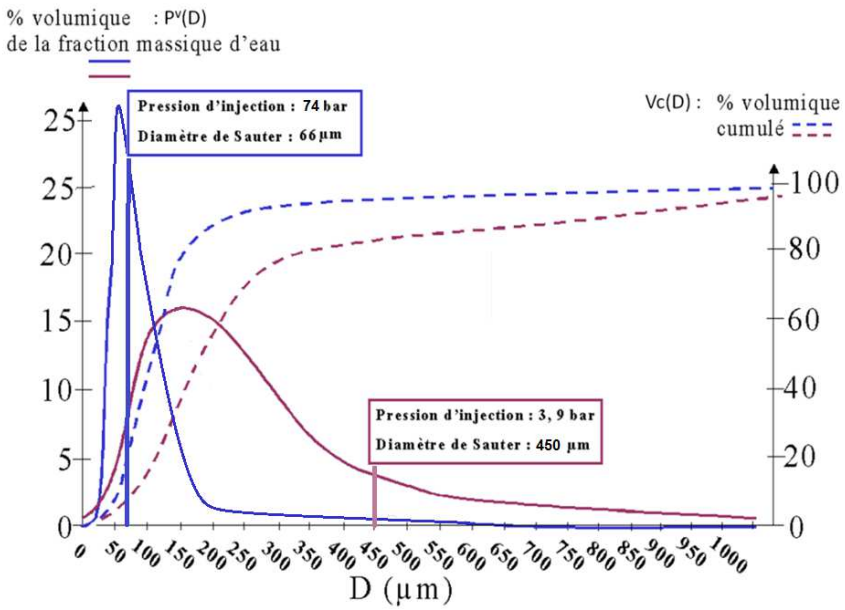


Fig.1.7 - Distribution granulométrique de deux sprays de gouttes : l'un caractéristique des pulvérisations de sprinklers conventionnels et l'autre caractéristique des brouillards d'eau

Il est possible de définir une distribution en taille avec une fonction de probabilité (Fig.1.7) qui dépend des caractéristiques de la granulométrie. Cette fonction de probabilité s'exprime généralement en pourcentage volumique et se distribue en fonction du diamètre P^D, de la surface P^S ou du volume P^V des gouttes (la fonction de distribution volumique sera retenue par la suite).

L'expression de ces distributions doit respecter la conservation des probabilités, ce qui les relie par la condition suivante :

$$P^D dD = P^S dS = P^V dV \qquad (1.2)$$

Sous l'hypothèse de gouttes supposées sphériques, cette condition se simplifie pour donner la relation suivante :

$$P^D = 2\pi D P^S = \frac{1}{2}\pi D^2 P^V \tag{1.3}$$

Plusieurs études se sont focalisées sur la caractérisation de ces spectres et plusieurs formes prédéfinies ont été suggérées pour approcher ces distributions. Par exemple, la distribution en diamètre peut être présumée par une loi de Rosin-Rammler (Eq.1.4).

$$P^V(D) = \left(\frac{q_R}{D_R{}^q}\right) D^{q_R - 1} \exp\left[-\left(\frac{D}{D_R}\right)^{q_R}\right] \tag{1.4}$$

Cette PDF est associée à une répartition en volume cumulé (Cumulated distribution function, CDF), de la forme :

$$V_C(D) = 1 - \exp\left[-\left(\frac{D}{D_R}\right)^{q_R}\right] \tag{1.5}$$

Dans ces expressions, D_R représente un diamètre caractéristique équivalent au diamètre cumulé en volume D_{V63}, ce qui signifie que 63% du liquide est contenu dans des gouttes de diamètre inférieur à D_R. L'exposant q_R est un paramètre permettant de caractériser la dispersion (l'étalement).

Une connaissance explicite de la forme de la distribution n'est pas toujours nécessaire. Pour un certain degré de finesse de description, il est possible de se restreindre à connaître quelques grandeurs caractéristiques comme certains moments M_n de la distribution (Eq.1.6) ou diamètres caractéristiques D_{nl} (Eq.1.7) :

$$M_n = \int_D D^n P^V(D)\, dD \tag{1.6}$$

$$(D_{nl})^{n-l} = \frac{\int_D D^n P^V(D)\, dD}{\int_D D^l P^V(D)\, dD} = \frac{M_n}{M_l} \tag{1.7}$$

Par exemple un diamètre caractéristique souvent retenu pour évaluer correctement les échanges interfaciaux, est le diamètre de Sauter (D_S) correspondant au rapport du volume du spray par sa surface :

$$D_S = D_{32} \tag{1.8}$$

Souvent, le diamètre cumulé n'est pas suffisant pour connaître précisément l'ordre de grandeur des diamètres des gouttes. A défaut de posséder la granulométrie du brouillard, les diamètres caractéristiques sont plus significatifs comme par exemple le diamètre moyen de Sauter D_S (Eq.1.8) caractéristiquement plus faible pour les brouillards (<200µm, Ndubizu [97]) que pour les sprinklers conventionnels (>400µm) – Fig.1.7.

I.2.3. Formation des sprays de gouttes d'eau

La formation des gouttes est le résultat d'un processus d'atomisation (Fig.1.8) se produisant à l'éjection de la phase liquide et conditionné par la pression et le débit d'injection qui jouent un rôle clé sur la granulométrie résultante (diamètre de Sauter, étalement du spectre etc.) du spray (Fig.1.7).

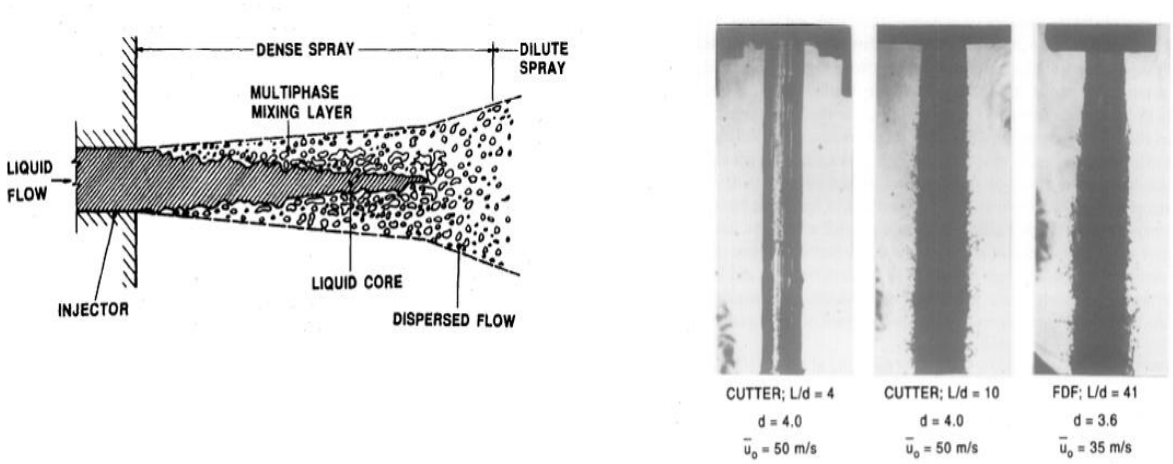


Fig.1.8 - Schématisation et photo de l'atomisation d'un jet d'eau, Faeth [39]

Les caractéristiques des buses sont propres aux fabricants et aux types de besoin. Les buses sont capables de pulvériser un spray de gouttes sous forme d'un cône plein ou creux avec un angle d'éjection donné (Fig.1.9). Les vitesses de pulvérisation peuvent atteindre la vingtaine de mètres par seconde. Dans le cadre des asperseurs installés dans les enceintes des réacteurs, les buses (fournisseur : SPRACO) pulvérisent des cônes creux (angle 60°) de gouttes de diamètre de Sauter de 700 µm à une vitesse de l'ordre de 13 à 17 m/s.

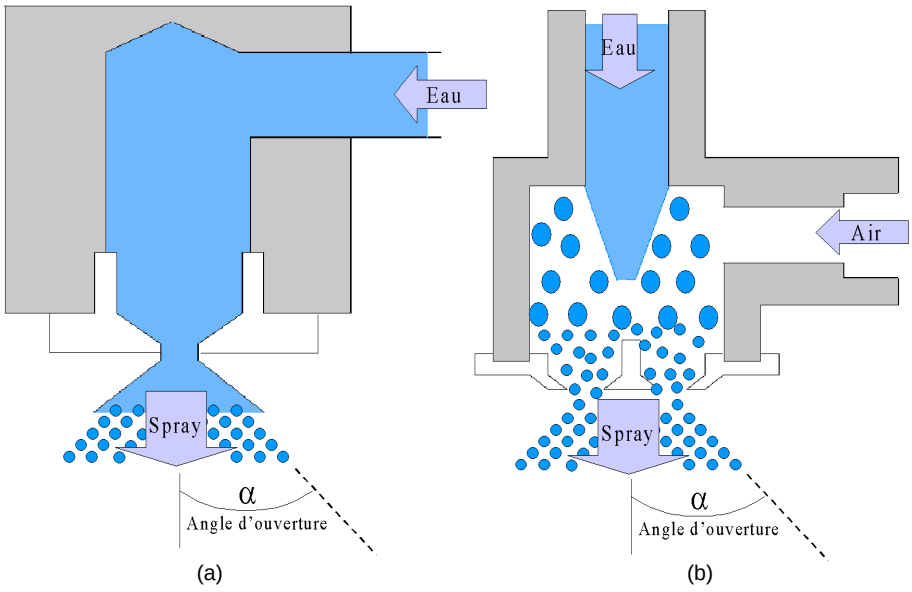


Fig.1.9 - Schématisation de deux types de buse avec (b) ou sans (a) chambre de mélange

I.2.4. Les brouillards d'eau

Un brouillard d'eau qui se compose de petites gouttelettes d'eau est non-toxique et écologique d'autant plus qu'il dégrade faiblement les locaux pendant le processus d'extinction. Bien que les principes d'extinction aient été identifiés, les caractéristiques requises d'un brouillard pour éteindre une certaine catégorie d'incendies sont encore mal connues. Ces procédés se sont, de ce fait, développés de manière limitée mais sont, de nos jours, de plus en plus retenus dans les technologies d'extinction. Ainsi, la compréhension de l'interaction entre les brouillards d'eau et les foyers incendie est devenue un challenge important tant dans le domaine de la recherche que dans celui de l'industrie.

Pour générer de fines gouttelettes, les systèmes de pulvérisation de brouillards d'eau, appelés plus généralement brumisateurs, ont des pressions d'injection allant jusqu'à la centaine de bars. Effectivement, l'accroissement de la pression d'éjection diminue la taille des gouttelettes et crée un phénomène de brumisation qui se déploie sur une surface élargie. Plus cette surface de couverture est importante, plus le système est efficace pour réduire la température et l'oxygène dans le local. L'intérêt majeur des brumisateurs est la possibilité de couvrir une large surface avec des débits en eau très faibles (de l'ordre du 1 litre par minute). Il existe un grand nombre de brouillards dont les caractéristiques dépendent fortement du type de foyer qu'ils sont censés combattre ou contenir. Ces pulvérisateurs de gouttes sont répertoriés en fonction de leurs caractéristiques qui sont :

- la pression de pulvérisation [10 – 100 bars],
- le diamètre de Sauter des sprays [10 - 200 µm]
- le débit d'eau pulvérisé [1 – 10 litres/min].

Grant [48], quant à lui, choisi une classification en 3 sous-catégories des brouillards d'eau (réglementation américaine) caractérisées par le diamètre cumulé Dv_{90} (Fig.1.10).

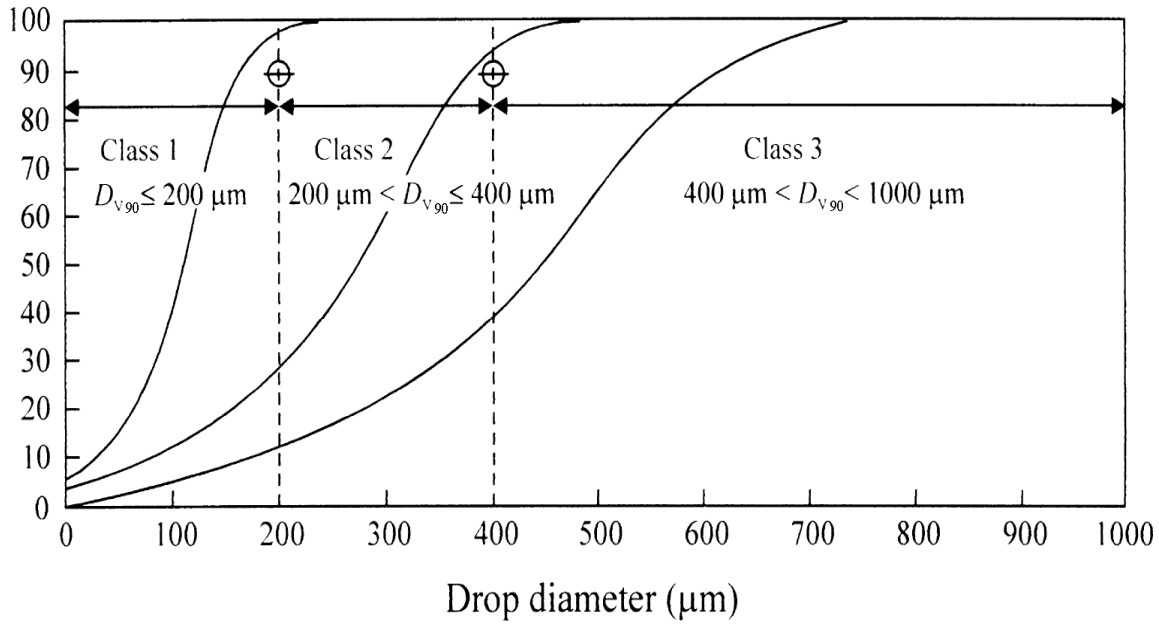


Fig.1.10 - Classification des brouillards d'eau en fonction du $D_{v90,}$ Grant [48]

L'avantage certain de ce type de brumisateur est son aptitude à utiliser un minimum d'eau avec un débit diminué par dix par rapport à un sprinkler conventionnel. La surface d'échange thermique plus

importante (Fig.1.12) permet d'accroître les échanges de chaleur en faveur de refroidissement des gaz avoisinants. A contrario, ces petites gouttelettes suivent bien mieux l'écoulement gazeux ; ce qui limite l'interaction directe entre le brouillard et la surface pyrolytique du matériau.

Finalement, les brumisateurs et les sprinklers conventionnels ont des caractéristiques leur permettant d'assurer différents rôles dans l'extinction. L'intérêt du brumisateur est le refroidissement du milieu environnant permettant l'évacuation du personnel, le confinement du feu pour éviter la propagation de l'incendie, et l'extinction dans la limite du possible. Les sprinklers conventionnels ont surtout l'objectif d'attaquer directement la surface du foyer en réduisant directement le débit de pyrolyse. L'utilisation de l'un ou de l'autre de ces procédés dépend fortement de la nature du feu et de l'environnement dans lequel il se développe. Par exemple, les feux de nappe liquide de combustible réagissent très mal à la pulvérisation de grosses gouttes susceptibles d'impacter et pénétrer dans le combustible fluide. La vaporisation rapide des gouttes d'eau aura tendance à projeter le combustible et propager l'incendie. Les fines gouttelettes sont aussi privilégiées lorsque la quantité importante d'eau déversée par les sprinklers conventionnels est susceptible de dégrader (court-circuit - corrosion) le matériel et les machines avoisinantes (câbles, moniteurs de contrôle, ordinateurs etc.).

Dans certaines circonstances, les fines gouttelettes sont plus adaptées que les sprinklers conventionnels. L'utilisation croissante des sprays à fines gouttes témoigne bien l'avantage que représente ce type de spray dans certaines configurations incendie.

I.2.5. Mécanismes d'extinction

Plusieurs phénomènes interviennent lors de l'introduction d'un spray à proximité d'une flamme. Tous les effets n'ont pas une interaction directe avec le comportement du feu. Ceci rend difficile la compréhension des conséquences sur l'extinction. Si l'on cite, par exemple l'introduction de gouttes susceptibles de refroidir le foyer, cela s'accompagnera d'un aspect d'entraînement de l'air par convection sous l'action de la chute des gouttes. On permet ainsi au foyer d'être alimenté avec une plus grande quantité d'oxygène. Un autre exemple serait celui de l'évaporation des gouttes qui provoque la dilution des réactifs, mais conditionne aussi l'expansion volumique. La taille de la flamme s'en retrouve augmentée, ce qui peut influencer l'éloignement des gaz chauds qui rayonnent moins sur le foyer mais qui peuvent provoquer l'inflammation d'un foyer secondaire.

On retient principalement les effets liés au refroidissement et à l'extinction. L'eau introduite permet de lutter contre le feu par une triple action (Fig.1.11) sur les facteurs alimentant l'incendie.

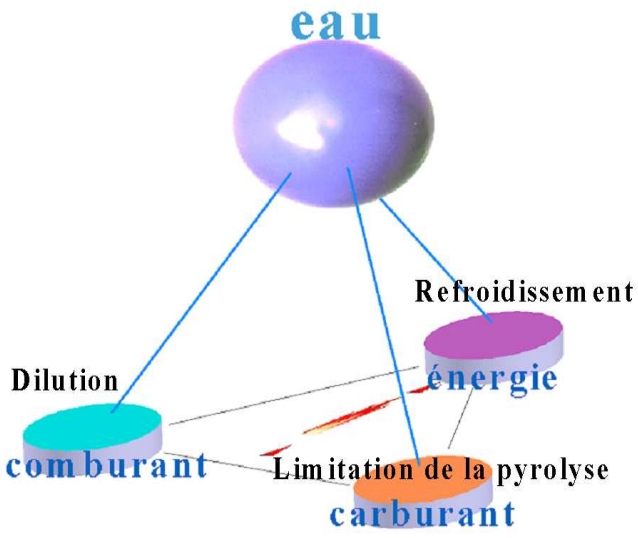


Fig.1.11 - Trois actions sur le triangle du feu

Les études et la description des principes fondamentaux de l'extinction des feux de combustible liquide et solide avec un brouillard d'eau peuvent être retracés depuis le milieu des années 1950 [82]. Au cours des deux dernières décennies, il a été démontré que le brouillard d'eau est très adapté pour les extinctions de feux de classe A (bureaux, immeubles résidentiels), de classe B (huile de cuisson [82]) et de classe E (matériel informatique et électronique). Trois types d'injection peuvent être mis en avant :

- Application à la totalité du compartiment (TCA).
- Application locale (AL).
- Application par zones (ZA) [83].

Pour un système TCA, l'eau est déchargée par l'ensemble des buses réparties dans tout le compartiment. Un grand feu clos peut être éteint par un système de TCA avec une réduction rapide de la concentration en oxygène dans le compartiment (consommation par le feu et déplacement par la vapeur d'eau). Les systèmes AL et ZA sont disposés pour introduire l'eau à un endroit ou une zone précise (milieu fermé, semi-ouvert ou ouvert) pour agir principalement par refroidissement de la flamme et par refroidissement de la surface du foyer.

Les mécanismes d'extinction par brouillard d'eau dépendent essentiellement de caractéristiques des gouttes (taille) et des conditions de pulvérisation (densité du flux d'eau, débit et couverture de pulvérisation). Le brouillard contenant des gouttelettes de différentes tailles est susceptible de jouer plusieurs rôles dans les mécanismes d'extinction. Les très fines gouttes resteront en suspension pour refroidir directement les fumées alors que les plus grosses gouttes impacteront le foyer pour refroidir directement la surface en pyrolyse. Les mécanismes d'extinction d'un feu sont bien connus et ont été mis en évidence par un grand nombre d'études théoriques et expérimentales. Ces mécanismes sont :

- **Le refroidissement de la phase gazeuse par le processus d'évaporation.**
  L'eau ayant une forte capacité calorifique et une forte chaleur latente, l'échauffement et l'évaporation des gouttes nécessitent l'absorption d'une grande quantité d'énergie. Cette perte d'énergie influe directement sur les profils de température d'un feu. On peut remarquer l'importance de la présence de très fines gouttes dans un brouillard d'eau qui, à même débit, démultiplie la surface d'échange entre la phase liquide et la phase gazeuse (Fig.1.12), et accentue les transferts d'énergie des produits de combustion chauds vers la phase liquide.

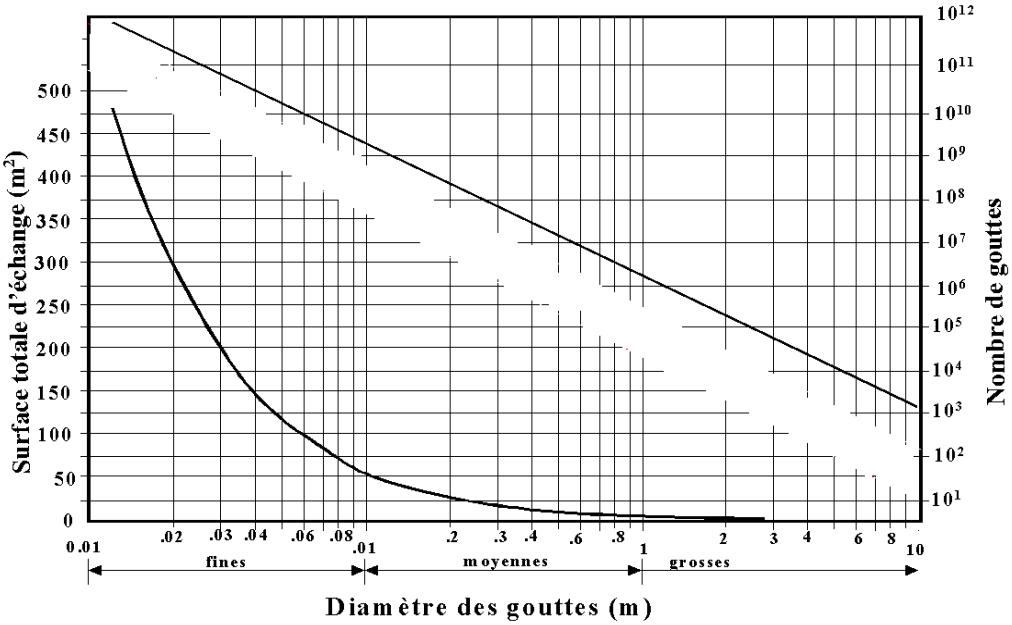


Fig.1.12 - Nombre de gouttes et surface d'échange de 1 kg d'eau en fonction du diamètre représentatif, [48]

- **Le déplacement de l'oxygène par la forte production en vapeur d'eau.**
  La vapeur d'eau prenant environs 1500 fois plus de place que l'eau liquide, cela permet tout d'abord de diminuer les concentrations des réactifs (l'oxygène) et d'étouffer la flamme. La cinétique de la réaction de combustion est aussi affectée par ce fort taux de dilution. Le fait de constater principalement la dilution du comburant plutôt que du carburant orientera notre choix sur les hypothèses envisagées (Cf. III.1.3.a). Pour les cas de dilution du combustible, cela provoque de la même manière l'altération du processus de combustion mais cette situation est rencontrée beaucoup plus rarement dans les configurations de pulvérisation de brouillard d'eau.

- **Le refroidissement de la surface du combustible.**
  La surface du foyer est souvent caractérisée par un taux de production du combustible par gazéification ou pyrolyse d'un matériau liquide ou solide. Les gouttes capables d'atteindre la surface pyrolytique peuvent refroidir directement le matériau en question et diminuer considérablement la formation du combustible. Il convient cependant de souligner à nouveau le risque des nappes de combustibles liquides, qui, lors de la pénétration et l'évaporation des gouttes d'eau, sont projetés, favorisant ainsi la propagation de l'incendie.

- **L'atténuation du rayonnement thermique.**
  Lors d'un incendie, 30% de l'énergie est transmise par rayonnement. L'introduction d'un spray permet d'atténuer le flux d'énergie rayonnée à la surface et contribue donc à la réduction du débit de combustible. De plus, cela limite l'échauffement des cibles susceptibles de s'enflammer.

- **Diminution des suies.**
  La présence de faibles quantités de vapeur d'eau peut catalyser l'oxydation (notamment du CO) en permettant la formation de radicaux OH et limiter la formation des suies (modification de la couleur de la flamme)

I.2.6. Travaux réalisés

a. Etudes expérimentales

Un grand nombre de travaux ont pu mettre en évidence, les rôles précédemment cités du brouillard d'eau lors de l'extinction. Cependant, il reste encore difficile de quantifier leurs contributions respectives, car les mécanismes d'extinction sont plus ou moins efficaces en fonction des caractéristiques du brouillard, du type de feu (Rasbash [118], Kim [66]), et du scénario qu'il décrit (facteurs liés à l'environnement extérieur).

Liu et al. ([84], [85]) ont étudié l'influence d'un brouillard d'eau sur l'efficacité et le délai d'extinction sur différents types de feux. Des expériences à échelle réduite ont été réalisées par L. Chen et al. [23] concernant l'extinction par brouillard d'eau dans les tunnels sous des conditions de ventilation longitudinale. Ils montrent qu'il est possible d'optimiser le couplage des systèmes de pulvérisation et de ventilation pour améliorer l'efficacité d'extinction.

D'autres études expérimentales ont davantage ciblé la description des mécanismes d'extinction (prépondérance et efficacité). Back et al. [6] ont démontré l'importance du mécanisme de dilution par la vapeur d'eau lors de l'extinction de grand feu confiné où l'oxygène qui est consommé par le feu et dilué par la vapeur d'eau, voit sa concentration diminuer fortement. Cependant, l'efficacité des mécanismes est affectée par les caractéristiques de confinement. Pour des volumes de confinement trop importants par rapport à la taille de la flamme, l'efficacité du brouillard d'eau est réduite car le phénomène de dilution ne joue pas un rôle significatif [12] contrairement au scénario se déroulant dans des volumes de confinement inférieur à 400 m^3. Ceci illustre bien la difficulté d'utilisation des brouillards d'eau pour éteindre des feux en grand volume alors que les espaces compartimentés en

petit/moyen volumes peuvent être sécurisés par des procédés d'extinction par brouillard d'eau d'efficacité notable en fonction des caractéristiques optimisées du brouillard.

L'analyse plus fine des flammes en présence de gouttelettes passe aussi par des procédés expérimentaux à échelle réduite. On peut citer ici les configurations de flammes stationnaires en jets co-courant (Prassad [115], Ndubizu [97], Lazzarini [74], Fig.1.13.b) ou en jets contre-courant (Mesli [92], Zegers [148], Fig.1.13.a)

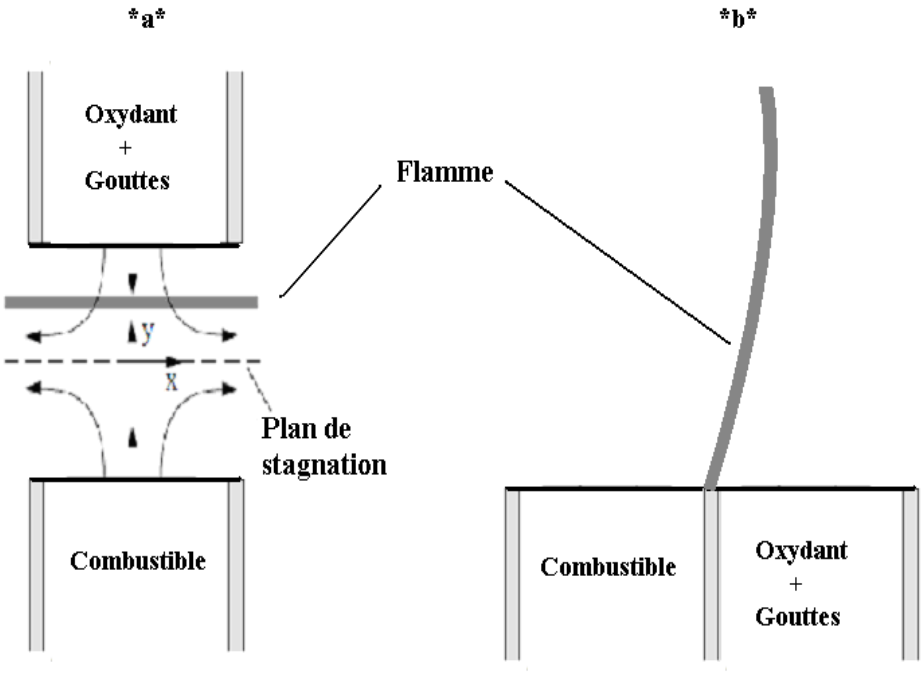


Fig.1.13 - Schématisation d'une expérience contre-courant *a* et co-courant *b* d'une flamme de diffusion s'établissant entre de l'air chargé en gouttelettes et du carburant

b. Etudes numériques

Plusieurs modèles ont été développés pour étudier le comportement d'un spray sur un incendie. Il existe de la même manière des codes à zones pouvant décrire l'introduction d'un spray (Yao [145]) mais nous nous concentrerons ici aux études CFD. Novozhilov [105], a étudié numériquement le comportement d'un spray sur un feu en fonction de l'angle d'inclinaison de l'aspersion et de l'angle d'ouverture du spray. Ananth [3] propose l'étude numérique de l'influence d'un spray sur une flamme 'jet'. Il cherche à évaluer l'efficacité d'extinction dans cette configuration co-courant. Les résultats montrent un taux de réaction qui se réduit significativement avec la concentration en gouttes injectées jusqu'à une valeur critique (la concentration d'extinction) pour laquelle le nombre de Damkhöler devient trop faible pour que la flamme puisse se maintenir. La taille des gouttes peut être optimisée car il existe des effets compétitifs entre les grosses gouttes à fort taux de pénétration et les fines gouttes dont le taux d'évaporation est plus important. Prasad [114] analyse le même type de configuration de flamme 'jet' et compare les résultats de son modèle à l'expérience. Lentati [75] simule numériquement une flamme en contre-courant avec un flux oxydant chargé en gouttes de diamètre caractéristique compris entre 5 à 50 μm et montre que les gouttes les plus efficaces pour l'extinction sont de diamètre égal à 15μm. En ce qui concerne les études sur les effets du rayonnement, Collin [24] s'est intéressé à la modélisation de l'atténuation du rayonnement par pulvérisation d'eau sur une configuration d'un spray conique descendant. Des études numériques à grande échelle ont aussi été conduites : Prasad [116] étudie l'efficacité d'extinction d'un brouillard d'eau dans un enclos par rapport à la position du spray, à la taille, aux vitesses et à la densité des gouttes à l'injection.

I.3. État de l'art des modèles décrivant l'interaction entre un foyer et un brouillard d'eau

I.3.1. Les modèles associés à l'écoulement diphasique turbulent

a. Description du spray

Les descriptions Eulériennes et Lagrangiennes permettent d'aborder plus confortablement des phénomènes différents (interaction entre particules, loi de choc, dispersion granulométrique, dispersion, interaction entre les phases). La pertinence du choix de la méthode dépend, avant tout, de l'intérêt que l'on porte à la description de ces divers phénomènes. Le taux de présence (volumique) des particules est un premier critère pour estimer l'importance relative des interactions entre particules vs. celles avec la phase porteuse (Drew [34]). La description des chocs (coalescence, rupture secondaire, etc.) est possible mais très délicate en Lagrangien (le nombre de trajectoires résolues étant toujours faible par rapport au nombre de particules réelles), l'écriture d'une équation pour la pression interne à la phase dispersée permet de représenter globalement l'effet des chocs, par exemple dans un lit fluidisé. Comparer les libres parcours moyens entre les chocs, les distances d'interaction gaz-inclusion, les dimensions caractéristiques des volumes de contrôle et du domaine, constitue donc un premier critère pour choisir la description du nuage de goutte.

La méthode Lagrangienne ([25], [96]) consiste à résoudre les équations permettant de reconstituer la trajectoire d'un échantillon de particules dans l'espace géométrique, mais aussi dans celui des phases (évolution en température, composition, etc.). En comparant les temps caractéristiques de la particule et de l'écoulement, on pourra opter soit pour un échange entre particule et champ moyen (si la particule réagit lentement et intègre l'effet des fluctuations turbulentes), c'est à dire une équation différentielle ordinaire, soit pour une reconstitution du champ turbulent instantanément vu par la particule, c'est à dire une équation différentielle stochastique. Les termes sources intervenant dans les équations du fluide (traînée, échange thermique, flux de masse), résultent d'une convergence statistique, puisqu'ils sont obtenus après qu'un grand nombre de trajectoires aient traversé chaque volume de contrôle. Cette convergence statistique devient une gageure pour la description des configurations instationnaires : en effet, suffisamment de particules doivent traverser chaque cellule à chaque pas de temps pour en tirer des statistiques représentatives. Des méthodes probabilistes montrent que la convergence (l'entrée dans un intervalle de confiance resserré) est d'autant plus lente que le terme source concerne des moments d'ordre élevé (ex : terme source de variance). Certaines études on cherché à mettre en évidence l'importance de ce couplage retour comme les travaux de Zimmer [150] qui introduit l'influence de la présence de particule discrète (rideau d'eau) sur la turbulence.

L'approche dite « Eulérienne / Eulérienne » ([34], [63], [41]), décrit chacune des phases via le point de vue eulérien avec deux systèmes d'équations couplés par des termes sources modélisant l'interaction entre les phases. Le nombre d'équations n'est plus dépendant du nombre de particules, ce qui réduit le coût numérique. Par contre, elle requiert des hypothèses importantes afin de fermer le système et les résultats obtenus seront plus ou moins proches de la solution physique en fonction des choix d'hypothèses et de modèles de fermetures utilisés [29]. De plus, l'interaction entre le brouillard et la phase porteuse (échange de chaleur, de quantité de mouvement) dépend fortement de la taille des gouttes. Il est possible de considérer le diamètre caractéristique pour calculer les termes d'échanges mais la finesse de description peut nécessiter la pleine prise en compte de la nature polydisperse du brouillard. Il est possible d'utiliser plusieurs méthodes [139] dont les suivantes :

- La méthode des moments [128], [72], [8], [100], [101].

Elle consiste à déterminer les paramètres utilisés pour décrire la fonction de répartition de taille présumée en transportant ses moments comme par exemple l'ordre 1 (diamètre moyen), l'ordre 2 (aire interfaciale) ou l'ordre 3 (volume de la phase dispersée). Il est possible d'utiliser des moments d'ordre plus élevé mais la fermeture des termes sources des équations de transport de ces moments se complexifie avec la montée en ordre. Les effets tels que le glissement entre les phases et l'interaction entre les gouttes peuvent être également modélisés par des termes sources lors du transport des moments. Cette méthode réduit le nombre de scalaires transportés pour obtenir la

distribution. En règle générale, la fonction présumée est une loi gaussienne (log-normale, Yoon [146], Rossin-Ramler, etc.) intégrable pour calculer les termes d'échange. Sa détermination ne dépend que de la moyenne et de la variance mais son utilisation interdit les représentations plus complexes comme, par exemple, un spectre de taille bimodale généré par la rencontre de deux sprays de différentes tailles caractéristiques. En revanche, rien n'interdit de représenter une distribution réelle par la somme de plusieurs fonctions présumées (c'est même classique pour les aérosols atmosphériques). Cependant, certaines limites sont à mettre en évidence : (i) la fermeture des termes d'interaction entre gouttes peut devenir délicate dans ce cas et (ii) il faudra considérer la résolution de deux scalaires par distribution pour toutes les déterminer. D'autre part, La fermeture des termes sources pour les moments d'ordre élevé n'est pas triviale. Par exemple, quel est l'effet du terme source d'évaporation sur la variance et la forme présumée de la distribution choisie résiste-elle aux effets non linéaires de ce flux d'évaporation ? Effectivement, le flux d'évaporation étant proportionnel à l'aire interfaciale, une petite goutte aura tendance à plus vite s'évaporer qu'une grosse. On peut se demander si les lois – Rossin-Ramler, log-normale, etc. (distribution en nombre ou en volume) – permettent de décrire correctement la polydispersion jusqu'à l'évaporation totale. De plus, les particules appartenant à une même distribution étalée n'auront probablement pas la même température (les plus fines se mettant plus rapidement à l'équilibre que les grosses). Il faut alors formuler des équations non seulement pour l'enthalpie massique de l'ensemble des particules contenues dans la distribution mais aussi pour des moments spécifiques (produits enthalpie massique – diamètre). En règle générale, pour éviter ce genre de complexité du problème, on suppose que l'ensemble des gouttes sont de taille suffisamment petite pour que la température de chacune d'elle se stabilise rapidement à celle du gaz et ainsi considérer une homogénéisation de la température sur tous les diamètres. Dans notre cadre où nous privilégions l'échange de chaleur entre le gaz et les gouttes mais aussi les flux d'évaporation qui dépendent directement de la température, il sera important de distinguer la température des gouttes de différents diamètres pour bien évaluer leurs influences respectives sur le feu.

- La méthode des classes ou méthode sectionnelle [73]

La distribution (continue) des gouttes en nombre ou en masse selon le diamètre est représentée par un histogramme à limites fixes (Fig.1.14). Il peut sembler légitime de considérer les mêmes caractéristiques (température, vitesse etc.) pour les particules de même taille. Ainsi, sous cette hypothèse d'homogénéisation, on peut développer un modèle où chaque classe est régie par un système d'équations avec des termes de transfert liés aux gouttes susceptibles de changer de classe (interaction entre gouttes et évaporation). Cette méthode est adaptée pour la description des interactions entre les gouttes mais la représentation du spectre nécessite souvent un nombre important de classes. De plus, les termes de fermeture modélisant les échanges thermiques et massiques sont aussi discrétisés par rapport au diamètre qui diminue progressivement lorsque les gouttes s'évaporent. Ceci impose donc un raffinement de la discrétisation pour les tailles proches de zéro même si à l'injection on ne trouve pas de si petites gouttes.

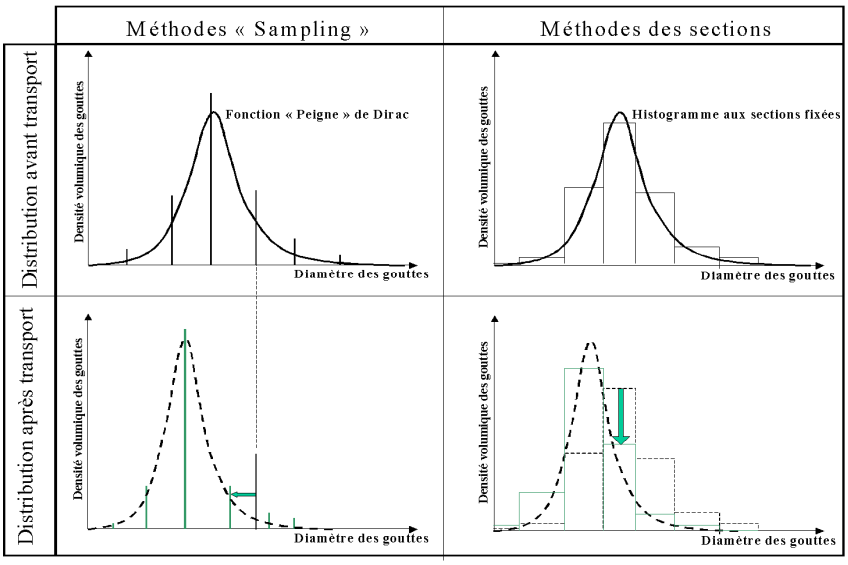


Fig.1.14 - Schématisation de la méthode "Sampling" (gauche) et la méthode des sections (droite) pour la description eulérienne du brouillard

- La méthode de « Sampling » [73]

Cette méthode consiste à discrétiser le spectre à l'injection suivant les caractéristiques initiales des particules (diamètre, vitesse, nombre, température). La distribution est ici représentée par un peigne de Dirac (Fig.1.14). La polydispersion est donc caractérisée localement par un nombre fixé de pics de Diracs, décrivant chacun un nombre de particules ayant une fraction massique et éventuellement une enthalpie massique (voire une composition dans le cas de grains de charbon pulvérisés). La reconstruction des caractéristiques locales (diamètre, aire interfaciale) est aisée et permet simplement de reconstruire les termes d'échange entre une de ces classes et le gaz. Cet ensemble de Dirac est donc une distribution plus simple à transporter (seuls les moments d'ordre 1 caractérisent les pics de Dirac) mais nécessite un certain nombre de pics pour décrire correctement la distribution. Cette méthode a le mérite de proposer une température pour chaque diamètre de goutte ce qui permet de montrer l'influence et la contribution de chaque taille caractéristique lors de l'extinction (pénétration des gouttes dans la flamme, taux d'évaporation etc.). Par contre, la représentation des interactions entre les inclusions est assez délicate à mettre en œuvre avec cette description. Ce modèle se traduit plus simplement comme plusieurs brouillards monodisperses n'interagissant pas directement entre eux mais indirectement via leurs échanges respectifs avec le gaz. Le diamètre évolutif de chaque classe permettra directement de calculer les transferts de masse et de chaleur de la classe considérée avec le gaz jusqu'à l'évaporation totale de la goutte.

Les termes d 'échange ne dépendent pas uniquement des caractéristiques des gouttes mais aussi de celles du gaz. Le traitement statistique des équations amène à s'interroger sur la validité de calculer les termes de transferts en fonction des caractéristiques moyennes du gaz alors que les particules voient les champs instantanés. L'hypothèse consistant à décrire les échanges en ne considérant que la valeur moyenne du gaz est légitime pour les lois linéaires et valides pour les particules dont le temps caractéristique leur permet d'intégrer les fluctuations turbulentes. Nous vérifierons que les particules trop fines pour entrer dans le domaine de validité ne constituent qu'une fraction négligeable du liquide.

b. Aspects turbulents

A cause de la très large gamme d'échelles, il devient difficile d'appréhender les détails de la turbulence et d'en prévoir l'évolution instantanée et locale sans raffiner le maillage à une échelle très petite. C'est pourquoi, dans le cadre d'un écoulement turbulent (nombre de Reynolds relativement grand), il est difficile, voire impossible de procéder à un calcul direct (Direct Numerical Simulation - DNS).

Avant de préciser les choix faits pour modéliser la turbulence, nous nous proposons de colliger dans ce paragraphe les différentes approches possibles quant à la prédiction numérique d'écoulements turbulents :

La modélisation RANS (Reynolds Averaged Navier Stokes) décompose les variables en deux contributions (moyenne statistique et fluctuation autour de cette moyenne). Le mouvement moyen est considéré stationnaire et la totalité du mouvement fluctuant est considérée aléatoire. Cette approche statistique était basée sur une moyenne temporelle associée à un temps caractéristique suffisamment grand pour obtenir un résultat indépendant du temps (moyenne stationnaire). La « moyenne » des équations instantanées et l'introduction de cette décomposition conduit à un système d'équations pour les champs moyens dans lequel apparaissent des termes de corrélations (tenseur de Reynolds, flux turbulent d'un scalaire) qui nécessitent des fermetures appropriées. Parmi les fermetures les plus utilisées, on peut citer :

- Les modèles du premier ordre qui relient algébriquement ces corrélations au mouvement moyen. Le tenseur des contraintes turbulentes est relié linéairement au tenseur des taux de déformation moyenne, via une viscosité turbulente qui est déterminée à partir d'une échelle de vitesse et d'une échelle de longueur turbulente.

- Les modèles du second ordre transportent directement ces corrélations.

Remarque : Il existe des modèles de turbulence intermédiaires qui adoptent une fermeture non-linéaire du tenseur de Reynolds en fonction du tenseur de déformation et de rotation pour capter de la turbulence anisotrope (ex : proche - paroi), non pris en compte par les modèles linéaires.

L'hypothèse d'un écoulement turbulent défini comme la superposition d'un mouvement moyen statistique et d'une agitation turbulente, indépendante des conditions limites et des conditions initiales est rapidement mise à défaut par la présence de structures cohérentes dans l'agitation turbulente. Ces structures cohérentes sont difficiles à caractériser, mais regroupent des propriétés communes :

- Une structure cohérente est une organisation à grande échelle.
- Dans un plan normal à la structure, les lignes de champs présentent un motif circulaire ou en spirale, quand on les représente dans un repère attaché à la structure.
- Une structure cohérente se localise sur domaine de l'espace correspondant à une concentration de vorticité.
- Les structures cohérentes pourraient correspondre au mode propre le plus énergétique du tenseur des corrélations spatio-temporelles.

La présence des instationnarités et de structures organisées dans les écoulements turbulents conduit à remettre considérablement en question la décomposition simple des champs en une moyenne stationnaire et une fluctuation. Ceci a suscité l'élaboration de nouvelles méthodes instationnaires telles que la LES (Large Eddy Simulation) et les méthodes semi-déterministes. Sagaut [126] et Perrin [112] propose une comparaison des modèles ainsi qu'une interprétation de leur finesse de description.

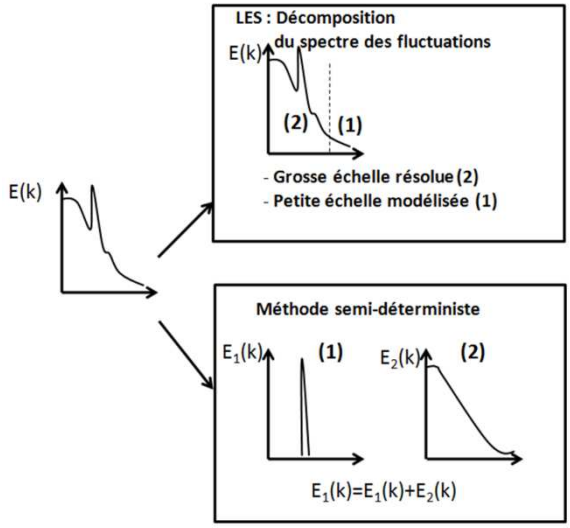


Fig.1.15 - Schématisation des méthodes LES et semi-déterministe avec une séparation du spectre en une partie modélisée et une partie résolue

Dans la modélisation LES, les grandes échelles de l'écoulement sont calculées explicitement et les petites échelles sont modélisées. Sur le plan spectral, l'approche LES consiste en une séparation du spectre en deux parties, la première (turbulence résolue) regroupant l'ensemble des structures, organisées ou aléatoires, de taille supérieure à la limite fixée par la coupure du filtre (Fig.1.15) et la seconde partie (turbulence à modéliser) regroupant les structures de taille plus petites. Les variables se décomposent en :

- Une moyenne statistique $\langle \psi \rangle_S$.
- Une fluctuation aux grandes échelles ψ'_{GE} .
- Une fluctuation aux petites échelles ψ'_{PE} .

$$\psi = \langle \psi \rangle_S + \psi'_{GE} + \psi'_{PE} = \langle \psi \rangle_{Filtre} + \psi'_{PE} \qquad (1.9)$$

La partie à modéliser utilise également des concepts analogues à la viscosité turbulente associée à la turbulence aléatoire homogène et isotrope. Près des parois, les structures (même petites) deviennent cohérentes traduisant une turbulence anisotrope non prise en compte dans la modélisation des petites échelles. Plusieurs axes de recherche tentent de palier à ce problème :

(i) Diminuer la taille de maille en paroi jusqu'au calcul DNS (spectre non coupé - pas de partie modélisée). Cette possibilité est certes possible mais elle augmente fortement le coût du calcul la rendant défavorable aux simulations de cas industriels avec paroi.

(ii) Récemment, les travaux se sont orientés sur un couplage RANS-LES (approche DES). qui combine la LES et l'approche RANS par une sélection locale soit de l'échelle de longueur LES soit de l'échelle de longueur RANS.

(iii) Etablir des modèles de turbulence consistant à adopter une fermeture non-linéaires pour capter de la turbulence anisotrope non pris en compte par les modèles linéaires. On notera aussi qu'il existe des fermetures de sous maille LES spécifiques pour tenir compte de l'influence de parois (modèle de WALES par exemple)

Les méthodes semi-déterministes consistent à résoudre l'évolution des structures cohérentes et modéliser la composante aléatoire de l'écoulement contrairement à la LES qui distingue les structures selon un critère de taille. Les variables se décomposent maintenant en :

- Une moyenne statistique $\langle \psi \rangle_S$.
- Une fluctuation cohérente $\psi_C^{'}$.
- Une fluctuation aléatoire $\psi_A^{'}$.

$$\psi = \langle \psi \rangle_S + \psi_C^{'} + \psi_A^{'} = \langle \psi \rangle_{DET} + \psi_A^{'} \tag{1.10}$$

L'approche semi-déterministe la plus simple est le modèle URANS (Unsteady Reynolds Averaged Navier Stokes) qui consiste à ne plus considérer les champs moyens stationnaires. Nous résolvons ainsi la somme des fluctuations cohérentes et du champ moyen statistique comme un champ instationnaire. Les équations du transport moyen sont les mêmes que les équations RANS au terme temporel près. L'hypothèse simplificatrice est de conserver le même système de fermetures qu'avec le modèle RANS. Le défaut de prédiction de cette approche réside dans l'évaluation des échelles de vitesse et de longueur de turbulence qui ne tient pas en compte des structures cohérentes et des aspects de non-équilibre induit par les instationnarités. Après certaines études menant à quantifier la partie cohérente du mouvement turbulent, d'autres méthodes semi-déterministes plus précises se sont basées sur une décomposition triple (composante moyenne, composante fluctuante organisée et une composante fluctuante aléatoire). La méthode OES « Organised Eddy Simulation » utilise cette décomposition pour modéliser les flux turbulents. Les fermetures associées décrivent les effets de non-équilibre induits par l'interaction non-linéaire des structures organisées et aléatoires (ex : modification de la pente de la cascade d'énergie).

Les simulations incendie nécessitent des modèles de turbulence appropriés pour décrire correctement les vitesses du panache et le mélange des espèces. Les modèles de description du transport turbulent [104] ou de l'interaction combustion-turbulence [110] influencent fortement les résultats. Effectivement, en ce qui concerne le mélange des réactifs, résoudre la proportion des constituants moyens ne donne pas suffisamment d'informations sur le mélange intrinsèque permettant la réaction. L'aspect turbulent permettra de modéliser l'état du micro-mélange.

Dans le cadre d'études instationnaires avec un front de flamme mobile, le modèle RANS n'est pas approprié. Souvent, les choix s'orientent vers les modèles introduisant les effets instationnaires tels que la LES (Large Eddy Simulation) ou URANS (Unsteady Reynolds Average Numerical Simulation). Il est légitime de se demander quelle description est la mieux appropriée de URANS ou de la LES pour évaluer correctement un feu. Sadiki [125] apporte un premier élément de réponse avec une comparaison entre les modèles pour une configuration en combustion. Dans un premier temps, les exigences de discrétisation spatio-temporelle diffèrent du simple fait que la LES résout une partie des fluctuations turbulentes alors que URANS ne résout que les structures cohérentes par l'intermédiaire

d'un champ moyen instationnaire. La LES possède donc un degré de finesse plus important que URANS mais demeure intrinsèquement une méthode plus coûteuse. Un point faible de la LES est son comportement défectueux en parois pour des structures ne se développant plus en trois dimensions dans la couche limite. En ce qui concerne URANS, afin de saisir avec précision l'instationarité du champ moyen, le temps caractéristique de la moyenne temporelle (le pas de temps) doit être beaucoup plus petit que l'échelle de temps intégrale mais aussi avoir un ordre de grandeur plus élevé que l'échelle de temps des fluctuations aléatoires. Malheureusement, ces deux critères ne sont généralement pas respectés simultanément car les moyennes statistiques et temporelles sont souvent confondues via le théorème d'ergodicité légitime dans RANS mais pas dans URANS.

Dans la suite, nous resterons sur une description URANS qui semble être adéquate pour nos configurations. Cependant il est certain que ce n'est pas la seule voie à envisager et que la question d'amélioration de la description de la turbulence reste un sujet ouvert dans le cadre des études incendie. Nous disposerons du système de deux équations supplémentaires k-ε pour l'énergie turbulente et son taux de dissipation pour décrire la turbulence.

I.3.2. Modèles associés à la description de la flamme

a. Le mélange des espèces

Une multitude de flammes caractéristiques peut régir un incendie. Par exemple, des déflagrations peuvent survenir via une flamme de prémélange lorsqu'un local sous ventilé inhibe le processus de combustion et ou les gaz de pyrolyse auront le temps de se mélanger avec le comburant. Cependant nous nous intéresserons ici aux incendies régis globalement par des flammes de diffusion turbulente. Il est donc nécessaire de privilégier les modèles de combustion associés interprétant bien l'état de mélange des espèces et plus précisément des réactifs.

- **Modèle EDC :**

Plusieurs représentations sont possibles pour décrire l'état du mélange. Le modèle EDC consiste à formuler une équation de transport pour chaque espèce réactive (ou non réactive), et de modéliser le taux de production moyen.

Par exemple, une réaction de combustion unique ne faisant intervenir que 2 réactifs et leur produit fait intervenir un terme de production instantané qui peut être décrit par une loi d'Arrhenius sur la température T du mélange gazeux et proportionnelle aux concentrations des réactifs (y_F, y_O) :

$$\dot{\omega}_P = A T^B \rho^2 y_F y_O \exp\left(-\frac{T_A}{T}\right) \tag{1.10}$$

Lors de la simulation des flammes turbulentes, il est nécessaire de « moyenner » l'équation de transport des espèces. Du fait des fortes non-linéarités de cette loi, des termes supplémentaires (liés aux moments des valeurs fluctuantes) apparaissent [14], [113]. La modélisation de la turbulence réside dans la finesse de fermeture de ces termes. La linéarisation préalable de ce terme source (Eq.1.10) met en évidences ces termes supplémentaires (Eq.1.11). Nous définissons, de cette manière, le facteur chimique de ségrégation des réactifs (α_S). Il vaut 0 pour un mélange sans fluctuations nulles rendant la valeur moyenne du terme source des produits maximale. Dans le cas d'un mélange turbulent, la valeur de α_S est comprise entre zéro et l'unité avec un terme source moyen réduit lorsque la ségrégation des réactifs ou de l'avancement limite le taux de réaction.

$$\begin{aligned}\overline{\dot{\omega}_P} &= A\bar{\rho}^2 \tilde{T}^B \tilde{y}_F \tilde{y}_O \exp\left(-\frac{T_A}{\tilde{T}}\right)\left[1+\frac{\widetilde{y_O'' y_F''}}{\tilde{y}_O \tilde{y}_F}+\sum_{n=1}^{\infty} K_n \left(\frac{\widetilde{T''^n y_F''}}{\tilde{T}^n \tilde{y}_F}+\frac{\widetilde{T''^n y_O''}}{\tilde{T}^n \tilde{y}_O}\right)\right] \\ &= A\bar{\rho}^2 \tilde{T}^B \tilde{y}_F \tilde{y}_O \exp\left(-\frac{T_A}{\tilde{T}}\right)\left[1-\alpha_s\right]\end{aligned} \tag{1.11}$$

Avec les coefficients K_n définis par :

$$K_n = \sum_{i+j=n} \left[\left(\sum_{k=1}^{i} (-1)^{n-i} \frac{(n-1)!}{i(n-i)!\left[(i-1)!\right]^2} \left(\frac{T_A}{\tilde{T}} \right)^i \right) \times \left(\frac{B(B+1)...(B+j-1)}{j!} \right) \right]$$

Magnussen [89] propose une fermeture du terme source de réaction limité par le réactif déficitaire, inversement proportionnel au temps caractéristique du mélange turbulent ($\tau_t = k/\varepsilon$) et pondéré par la constante C_{mag} (Eq.1.12).

$$\overline{\dot{\omega}_F} = -C_{mag} \frac{\overline{\rho}}{\tau_t} \min\left(\tilde{y}_F, \frac{\tilde{y}_O}{s} \right) \tag{1.12}$$

Ce modèle tend à faire diminuer les fractions massiques moyennes des réactifs jusqu'à la disparition totale d'un des réactifs. Le temps caractéristique de consommation des réactifs sera égal au temps de mélange turbulent sous l'hypothèse de réaction infiniment rapide. Cependant, les fortes non-linéarités du terme de production limitent l'efficacité de ce modèle qui utilise uniquement les valeurs moyennes. Certaines corrections sont alors proposées pour améliorer l'expression du terme de production moyen comme par exemple une température limite d'inflammabilité. Cette méthode est simple et naturelle par rapport à la détermination de la composition, cependant elle est inapte à décrire convenablement les conséquences de l'état turbulent sur la flamme. En effet, le terme de production étant calculé par le biais des valeurs moyennes, l'état du mélange est décorrélé de l'avancement réactionnel. L'ensemble des méthodes (type EDC) faisant intervenir une fermeture directe du terme source en fonction des concentrations moyennes sont susceptibles d'être facilement généralisées au milieu dilué. Il est possible de proposer des limitations chimiques en proposant une fermeture du terme de production moyen (Eq.1.12) en incluant un temps caractéristique plus grand que le temps caractéristique de la turbulence. Outre l'évaluation de ce temps, difficile, la description fine de l'interaction chimie - turbulence reste impossible avec cette méthode.

- **Modèle à fraction de mélange et fonction de densité de probabilité :**

Dans le cadre des écoulements turbulents, une manière plausible de pallier ce problème est d'utiliser une moyenne statistique en définissant un modèle à fonction de densité de probabilité (PDF). Par exemple, dans le cadre de réactions chimiques considérées très rapides, il est possible de reconstituer les compositions du mélange en fonction d'un seul scalaire : la fraction de mélange. Avec la fonction de probabilité lui étant associée, on peut déterminer les proportions moyennes du mélange. Ici le terme de production moyen se déduit de la dissipation de la variance de cette distribution.

Si l'on considère la chimie infiniment rapide (par rapport au micro-mélange), il est possible de reconstituer les compositions de la flamme de diffusion uniquement en fonction de la fraction de mélange. L'hypothèse « infiniment rapide » nous impose une zone de réaction concentrée sur la surface iso-fs. Ceci signifie un terme source $\dot{\omega}_K$ nul partout sauf en $f = fs$. Ainsi, le taux de production ne dépend pas d'une cinétique chimique mais de la dissipation de la variance traduisant le mélange turbulent. On déduit les lois $y_K(f)$ continues par morceaux de part et d'autre de la stœchiométrie (16). Effectivement, les lois de Burke et Schumann [20] supposent la non-coexistence des réactifs et imposent les lois du tableau 1.1.

En milieu riche (f > fs)	En milieu pauvre (f < fs)
$y_F(f) = \frac{f - f_S}{1 - f_S}$	$y_O(f) = \frac{f_S - f}{f_S}$
$y_O(f) = 0$	$y_F(f) = 0$
$y_P(f) = \frac{1 - f}{1 - f_S}$	$y_P(f) = \frac{f}{f_S}$

Tab.1.1 - Formulation des reconstitutions des fractions massiques des espèces en fonction de la fraction de mélange pour un mélange à deux entrées et dont la cinétique chimique est supposée infiniment rapide.

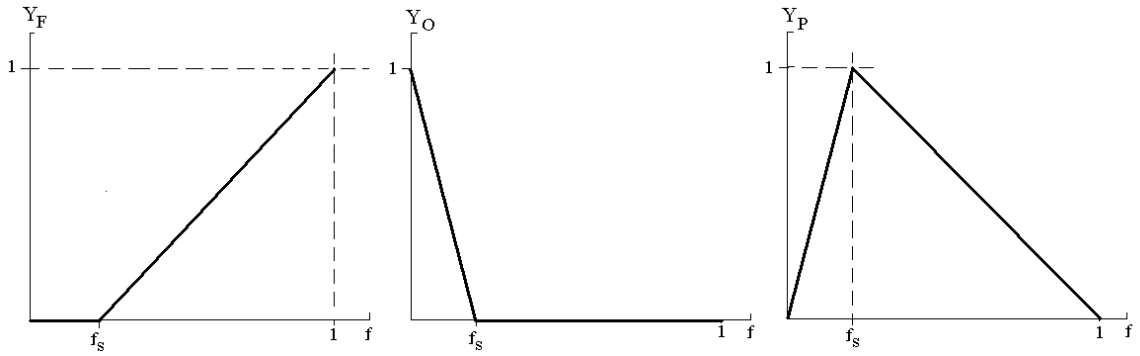


Fig.1.17 - Schéma associé à la formulation de reconstitution des espèces du tableau 1.1

L'hypothèse de chimie infiniment rapide propose un état de combustion déterminé uniquement par la fraction de mélange. Il sera nécessaire de formuler une PDF fonction de la fraction de mélange uniquement ($p_{(xi,t)}(f)$) qui déterminera l'état turbulent du mélange.

Le modèle de combustion turbulente nécessite la connaissance explicite de la fonction densité de probabilité à chaque instant et à chaque position. Effectivement, une fois la fonction de probabilité déterminée, toutes les lois instantanées qui définissent le volume massique, la température et les fractions massiques en fonction de la fraction de mélange pourront être pondérées par cette distribution pour déterminer les champs moyens.

Avec cette approche, la difficulté réside dans la détermination de cette fonction de probabilité en temps et en espace. Plusieurs méthodes sont utilisées pour déterminer la fonction de densité de probabilité. Le transport de la PDF « par bande » ou le procédé de Monte-Carlo sont des méthodes très précises à condition de disposer des ressources numériques nécessaires. Le transport des moments d'une PDF présumée fournit, à moindre coût, de bons résultats lorsqu'elle est fonction d'une unique variable. Lorsque qu'elle est fonction de plusieurs variables, il est plus compliqué de présumer la forme sauf hypothèse simplificatrice comme par exemple l'indépendance des variables. Le type de fonction utilisée pour présumer la forme de la PDF constitue donc un critère important de modélisation et nécessite l'introduction de paramètres pour adapter sa forme. Plus nous cherchons à décrire précisément la PDF, plus le nombre de paramètres à ajuster sera important et plus il sera nécessaire de transporter des moments d'ordre élevé pour les déterminer. Par exemple, pour présumer de façon appropriée $p(f)$, f étant compris entre 0 et 1, on peut utiliser une fonction « bêta » (Fig.1.18.a) qui est une forme souvent utilisée (Exemple Peters [110]). La forme présumée s'écrit :

$$\tilde{p}(f) = A_b f^{b_1-1}(1-f)^{b_2-1} \tag{1.13}$$

3 paramètres sont ici nécessaires pour faire correspondre les moments d'ordre zéro, un et deux de la PDF :

- L'ordre zéro est connu et vaut 1 :

$$\int \tilde{p}(f)df = 1 \tag{1.14}$$

- Le moment d'ordre 1 représente la moyenne :

$$\int f \times \tilde{p}(f)df = \tilde{f} \tag{1.15}$$

- Le moment d'ordre 2 est la somme du carré de la moyenne et de la variance :

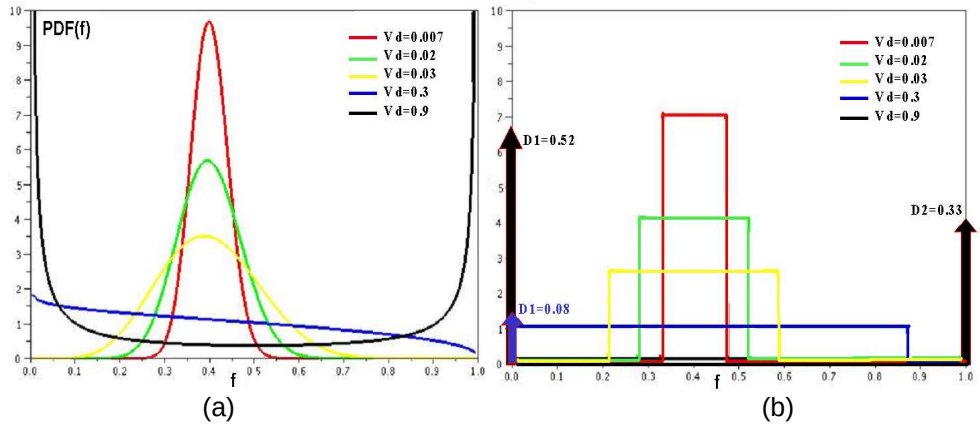
$$\int f^2 \tilde{p}(f)df = \left(\tilde{f}\right)^2 + \widetilde{\left(f''^2\right)} \tag{1.16}$$

Ainsi en transportant la moyenne et la variance, on peut calculer les paramètres de la PDF,

$$b_1 = \tilde{f}\left[\frac{\tilde{f}\left(1-\tilde{f}\right)}{\widetilde{f''^2}} - 1\right] \qquad b_2 = \left(1-\tilde{f}\right)\left[\frac{\tilde{f}\left(1-\tilde{f}\right)}{\widetilde{f''^2}} - 1\right] \tag{1.17}$$

Le coefficient A_b est calculé avec le moment d'ordre 0 :

$$A_b = \frac{1}{\Gamma_{b_1 b_2}} \text{ avec } \Gamma_{b_1 b_2} = \int f^{b_1 - 1}(1-f)^{b_2 - 1} df \tag{1.18}$$



(a) (b)

Fig.1.18 - Evolution d'une fonction de densité de probabilité - (a) béta - (b) rectangle et pic de Dirac - dont la moyenne vaut 0.4 et dont la ségrégation (Vd : variance adimensionnée) varie.

NB : D'autres formes peuvent être suggérées : comme par exemple :

- la distribution rectangle et pics de Dirac (Borghi et Moreau [18]), Fig.1.18.b

$$\tilde{p}(f) = D_0\delta(f,0) + D_1\delta(f,1) + h\left(H(f - f_{deb}) - H(f - f_{fin})\right) \tag{1.19}$$

- la distribution gaussienne "clippée" avec pics de Dirac (Lockwood et Naguib [86])

En ce qui concerne les mélanges de plusieurs espèces, il existe une généralisation aux méthodes multi-fractions de mélange. Effectivement, une unique fraction de mélange est inappropriée pour décrire le mélange pour plus de deux flux entrants et il est nécessaire d'établir un modèle à multi-fractions de mélange. Par exemple, pour les injections diesel à plusieurs entrées, Hasse ([51], [52]) ont développé un modèle à multi-fractions de mélange. Flores et Fletcher [43] ont considéré plusieurs fractions de mélange pour différencier la formation par dévolatilisation du charbon et le produit formé par oxydation. Escaich ([37], [38]) a, quant à lui, développé un modèle de combustion en présence de 4 fractions de mélange associées aux matières volatiles lourdes, aux matières volatiles légères (issues de la dévolatilisation du charbon), au carbone libéré par la combustion hétérogène et au comburant. L'établissement des diverses fractions de mélange dépend explicitement de ce que l'on recherche à modéliser. Dans notre cas, nous constaterons la nécessité de décrire une combustion avec trois entrées (carburant - comburant - diluant) dont la généralisation du modèle à trois fractions de mélange complémentaires est simple. La difficulté réside plutôt dans la détermination d'une PDF à variable multiples, Fartouk [40].

En ce qui concerne la description des limites cinétiques par le modèle à fraction de mélange, des travaux ont déjà été réalisés. Luo et Beck [88] ont déterminé un modèle de combustion tenant compte d'un seuil en oxygène changeant les lois de reconstitution des espèces. Cette limitation introduit une proportion en oxygène nécessaire pour que la réaction se déclenche. Les proportions ne respectant pas cette limite sont considérées avoir une cinétique finie ou nulle.

II. PHENOMENOLOGIES

II.1. Introduction à la combustion turbulente

La combustion joue un rôle important dans le développement d'un feu. La combustion est une des physiques permettant de décrire l'incendie en termes de réaction et de structure de flamme. Nous aborderons ici les phénomènes liés aux flammes turbulentes en général pour identifier au mieux les caractéristiques des structures des flammes impliquées dans un incendie.

II.1.1. La combustion et les flammes

a. Notion de réaction de combustion

La réaction de combustion est, par définition, un ensemble de réactions élémentaires (Fig.2.1) faisant intervenir des gaz combustibles (hydrocarbure, dihydrogène etc.) et des gaz comburants (contenant du dioxygène) ainsi que d'autres espèces pouvant participer ou non, de manière directe ou indirecte à la réaction.

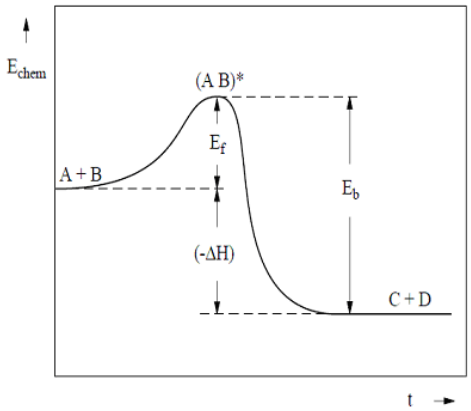


Fig.2.1 - Evolution de l'énergie interne pendant une transformation chimique, Peters [111]

Sous certaines hypothèses (état quasi stationnaire et équilibre partiel), il sera possible de décrire l'avancement de la combustion par un nombre réduit de concentrations intervenant. Les produits de combustion sont majoritairement du CO_2 et de la vapeur d'eau. Dans les gaz brûlés, on retrouve aussi une grande variété de produits tels que les oxydes d'azote, le monoxyde de carbone et certains radicaux tel que l'hydroxyle OH et les hydrocarbures imbrûlés précurseur des suies (polyacétylénique).

Dans la mesure où la prédiction de la concentration des espèces intermédiaires n'est pas l'objectif principal de l'étude, il est possible de considérer des schémas cinétiques réduits tel que ceux limités à une étape globale considérant les réactifs et les produits de fin de combustion.

$$CH_4 + 2O_2 \rightarrow CO_2 + 2H_2O \qquad (2.1)$$

En réalité, le système chimique est le siège de diverses réactions élémentaires impliquées et il ne peut être simplifié que dans la mesure où les temps caractéristiques de certaines réactions sont négligeables devant d'autres. Les produits liés à une combustion incomplète ([76], [141]), tels que les polluants par exemple, ne peuvent alors être pris en compte lors de ces simplifications.

La réaction est globalement exothermique mais nécessite tout de même une énergie d'activation suffisante correspondant à l'énergie nécessaire aux processus élémentaires pour casser les liaisons moléculaires. La chaleur dégagée provoque des élévations de température de quelques centaines de degrés.

Globalement, la libération d'énergie provoque un tel échauffement que l'on peut constater l'émission d'un spectre lumineux lié au rayonnement de particules imbrulées. Le type d'espèces présentes caractérise souvent la bande du spectre émis avec des longueurs d'onde pouvant appartenir au visible aussi bien qu'à l'infrarouge.

b. Caractéristiques des flammes

De manière générale, une flamme se caractérise comme la conséquence directe de la libération d'énergie provoquée par la réaction de combustion. On peut distinguer les flammes suivant plusieurs critères :

- Le mode d'introduction des réactifs dans la zone de flamme.
- La nature de l'écoulement.
- La nature mono ou polyphasique.

Ces différents points sont traités de manière détaillée dans ce qui suit pour permettre de caractériser au mieux les flammes correspondant à notre cadre d'étude.

Flammes de pré-mélange

Les flammes de prémélange sont caractérisées par des réactifs (carburant, comburant) intimement mélangés (procédé de mélange avant zone de réaction). Ce mélange que l'on nommera les gaz frais sera apte à brûler en fonction d'une cinétique de combustion dépendant des pressions partielles des réactifs et de la température pour donner les gaz brûlés. Plusieurs types de flammes de prémélange peuvent être observés. Le bec bunsen et le chalumeau sont des appareillages mélangeant préalablement les réactifs avant de les injecter. En ce qui concerne les déflagrations, liées à la problématique des explosions, elles aussi sont communément considérées comme des flammes de prémélange.

Trois zones caractérisent l'environnement d'une flamme de prémélange. La zone de préchauffage où se situent les gaz frais, la zone de réaction où les transformations chimiques ont lieu et la zone des gaz brûlés (Fig.2.2). Pour un temps cinétique de réaction relativement petit, la zone de réaction est en général très mince et peut s'apparenter à une discontinuité séparant les gaz frais des gaz brûlés.

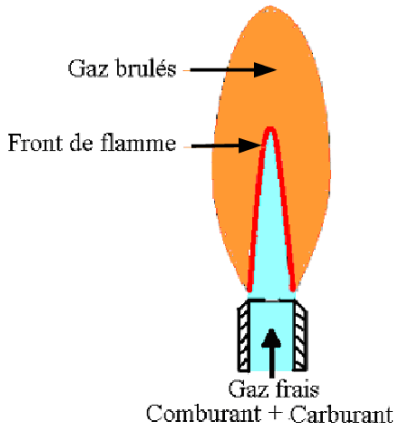


Fig.2.2 - Schématisation d'une flamme de prémélange de bec Bunsen

Le processus de propagation est le mécanisme à l'origine de ces flammes. La réaction libère de l'énergie transmise aux gaz frais avoisinant qui peuvent réagir à leur tour. Ainsi, par une « contamination » de proche en proche, on voit l'apparition d'un front de flamme mobile ou immobile suivant la vitesse des gaz frais (déflagration, flamme « jet », etc.).

La dynamique (convection diffusion) de l'écoulement joue son rôle dans le déplacement du front de flamme mais l'interaction entre la réaction de combustion et la turbulence ne s'observe qu'au voisinage du front de flamme. En effet, les microstructures turbulentes peuvent favoriser le mélange

au niveau de la zone de réaction et changer les caractéristiques de la flamme et, en particulier, ses caractéristiques propagatives. Pour mieux comprendre le phénomène d'interaction combustion-turbulence, nous raisonnerons sur les échelles caractéristiques des phénomènes (Fig.2.3).

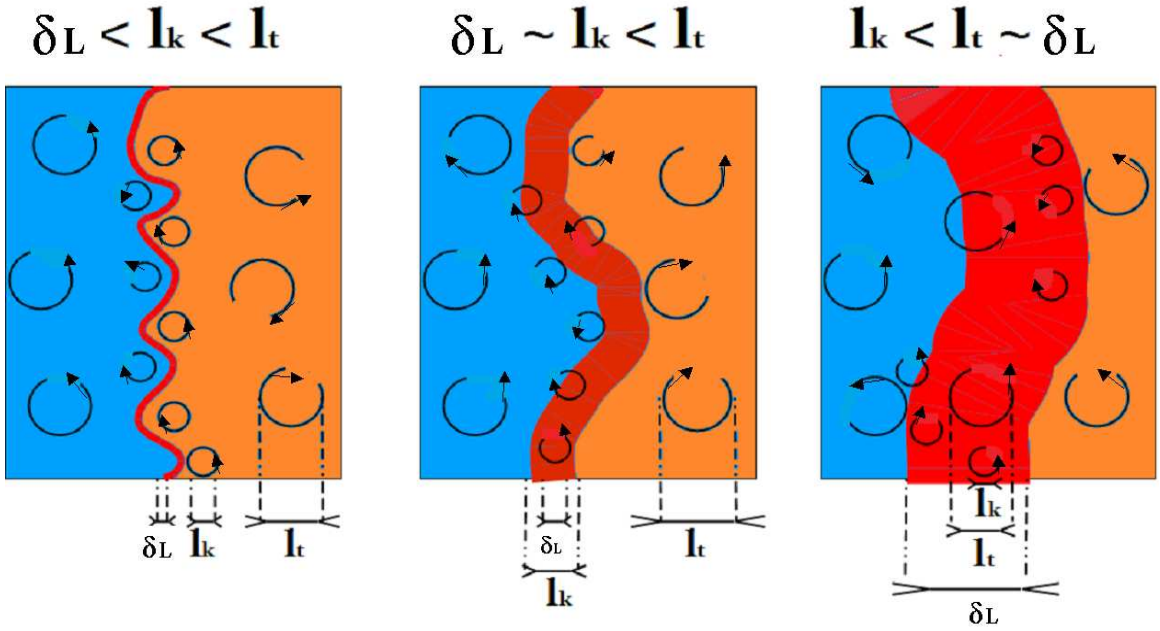


Fig.2.3 - Schéma de principe expliquant l'importance de la comparaison des échelles caractéristiques intégrale, de turbulence et de la cinétique chimique pour les flammes de prémélange

La turbulence est caractérisée par une dissociation des grosses structures d'échelles intégrales (l_t) dont on peut caractériser les fluctuations u_t et les microstructures appartenant aux échelles de Kolmogorov (l_k) caractérisées par des fluctuations de vitesse de l'ordre de u_k.

On peut y associer leurs temps caractéristiques :

$$\tau_t = l_t / u_t \tag{2.2}$$

$$\tau_k = l_k / u_k \tag{2.3}$$

L'estimation de temps caractéristique de la cinétique peut se faire en fonction de l'épaisseur du front de flamme δ_L et de la vitesse de propagation du front de flamme S_L.

$$\tau_c = \delta_L / S_L \tag{2.4}$$

Il s'agit ici d'un temps de transit dans le front de flamme qui inclue les effets moléculaires car on a retenu δ_L comme échelle spatiale.

La définition de ces temps caractéristiques conduit à introduire des nombres additionnels qui permettent d'évaluer l'importance de la phénoménologie concernée :

$$\mathrm{Re}_t = \frac{u_t l_t}{\nu} \qquad Da = \frac{\tau_t}{\tau_c} \qquad Ka = \frac{\tau_c}{\tau_k} \qquad \mathrm{Re}_k = \frac{u_k l_k}{\nu} = 1 \tag{2.5}$$

Le nombre de Reynolds intégral compare l'intensité turbulente à celle des forces de viscosité. A faible nombre de Reynolds, les fluctuations turbulentes sont négligeables. Cependant lorsque le taux de turbulence est plus important, on peut caractériser l'interaction entre la turbulence et la combustion par des nombres caractéristiques (Eq.2.5). Le nombre de Damköhler compare les temps caractéristiques de la cinétique chimique et des effets de la turbulence. Le nombre de Karlovitz compare les temps caractéristiques de la cinétique chimique et des microstructures turbulentes qui sont susceptibles de plisser (voire déchirer) le front de flamme. On peut ainsi, en fonction de ces nombres, classifier les flammes turbulentes (Peters [109], Borghi [15], Borghi et Destriau [16]), dans le diagramme représenté par la figure 2.4.

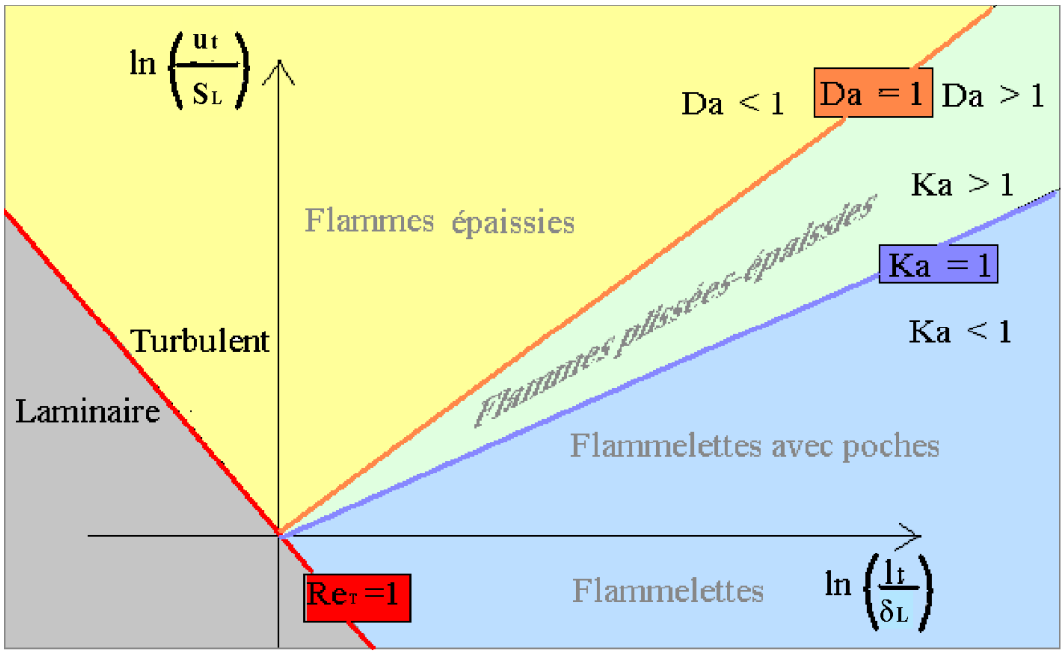


Fig.2.4 - Classification des flammes de prémélange turbulente

La détermination de cette classification est aisée si l'on peut estimer les relations qui existent entre les grandeurs définies précédemment. Si l'on introduit l'énergie cinétique turbulente (k) et le taux de dissipation de l'énergie turbulente (ε), il est possible d'estimer l_t, u_t, l_k, u_k (Eq.2.6).

$$u_t = \sqrt{k} \qquad l_t = \frac{(u_t)^3}{\varepsilon} \qquad u_k = (\nu\varepsilon)^{1/4} \qquad l_k = \left(\frac{\nu^3}{\varepsilon}\right)^{1/4} \tag{2.6}$$

Alors il est possible d'en déduire les relations suivantes :

$$\mathrm{Re}_t = k^2/\varepsilon = Da^2 Ka^2 = (u_t/S_L)(l_t/\delta_L) \tag{2.7}$$

Flammes de diffusion

Les flammes de diffusion sont catégoriquement différentes. Elles se caractérisent par des réactifs non prémélangés au moment de leur introduction (Fig.2.5). En général, cette configuration est le plus souvent rencontrée dans les feux d'incendies avec un carburant provenant des matériaux en pyrolyse et l'oxydant provenant des arrivées d'air qui alimentent le feu. On gardera néanmoins à l'esprit que cette représentation est extrêmement simplificatrice. Dans le cadre de flamme de diffusion, le phénomène de mélange turbulent des réactifs possède un temps caractéristique beaucoup plus grand

que celui de la cinétique de réaction. C'est donc le mélange qui contrôle principalement la flamme et non la propagation comme on l'a observé pour les cas prémélangés.

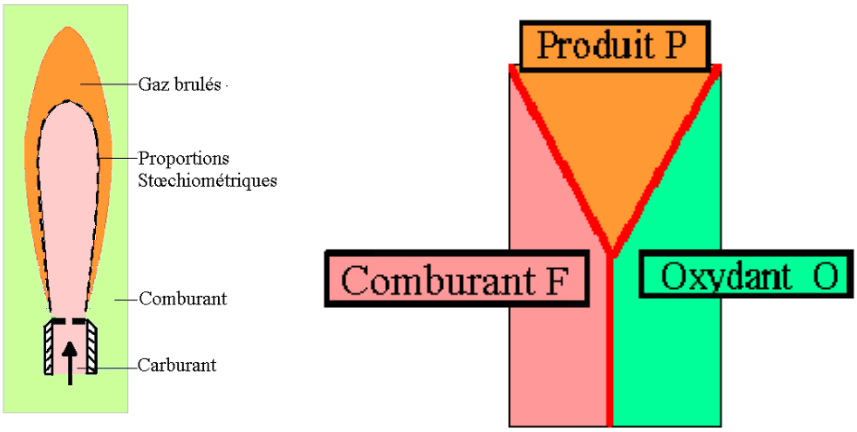


Fig.2.5 - Schématisation d'une flamme de diffusion

Les flammes de diffusion donnent l'impression d'être plus lumineuses que les flammes de prémélange. On distingue une zone étendue à forte richesse en fuel où la formation importante des suies conduit à une émission du rayonnement sur un spectre large alors que la zone de réaction où seuls quelques radicaux rayonnent, émet un rayonnement bleuté.

La description d'une flamme de diffusion laminaire (Burke et Schumann [20]) permet d'identifier la zone de réaction comme une surface très mince, délimitant une zone de combustible et une zone d'oxydant. Cette surface est constituée par l'ensemble des points dont l'état de mélange correspond aux proportions stœchiométriques. On définira par la suite un scalaire inerte f (la fraction de mélange), non affecté par l'avancement réactionnel, caractérisant le mélange entre le combustible et le comburant (f=0 dans le comburant, f=1 dans le combustible). Si on pose fs la valeur correspondant aux proportions stœchiométriques, la zone de réaction est repérée par l'iso-surface f = fs. Ce formalisme peut aussi être appliqué aux écoulements turbulents, avec des perturbations qui affecteront l'iso-surface stœchiométrique de manière chaotique (Fig.2.6). L'interaction entre l'agitation aléatoire de la zone de réaction et la combustion est le problème essentiel des configurations de flammes non prémélangées. L'aspect de plissement de la surface de réaction par les fluctuations turbulentes, provoque un mélange turbulent mésoscopique avant que la diffusion moléculaire joue son rôle lors du mélange microscopique des espèces leur permettant de réagir.

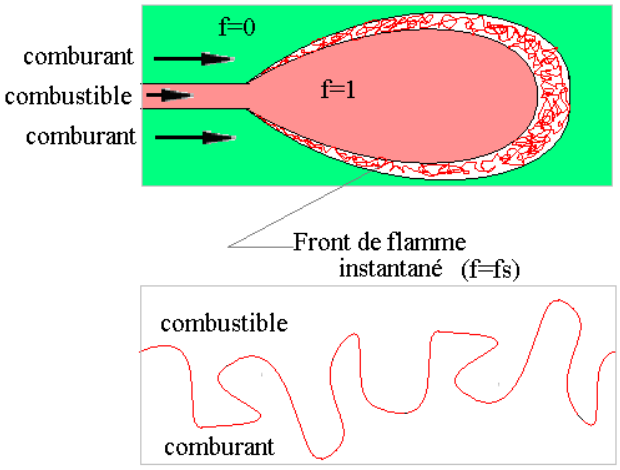


Fig.2.6 - Schéma explicatif des mouvements aléatoires de la zone de réaction des flammes de diffusion dans un écoulement turbulent

Les caractéristiques des flammes de diffusion turbulentes dépendent énormément de l'état du mélange. Il sera avant tout nécessaire de définir la notion de fraction de mélange avant de présenter un diagramme de classification des flammes de diffusion turbulentes. Nous supposons que les divers processus de la réaction de combustion se réduisent à une étape globale qui pour 1 kg de combustible (F) fait réagir « s » kg de comburant (O) pour donner, d'après la loi de conservation de la masse, (1+s) kilogrammes de produits (P) (Eq.2.8)

$$F + sO \Rightarrow (1+s)P \tag{2.8}$$

Chacune des fractions massiques des espèces est solution d'une équation de transport faisant intervenir un terme source réactionnel de la forme :

$$\frac{\partial \rho y_K}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_j}\left(\rho y_K u_j\right) = \frac{\partial}{\partial x_j}\left(\rho D_K \frac{\partial}{\partial x_j}\left(y_K\right)\right) + \dot{\omega}_K \tag{2.9}$$

La relation liant les différents termes sources se déduit de la réaction de combustion (Eq.2.8).

$$\dot{\omega}_F = \frac{\dot{\omega}_O}{s} = -\frac{\dot{\omega}_P}{1+s} \tag{2.10}$$

La fraction de mélange est un scalaire transporté indépendamment de l'avancement réactionnel. Sous l'hypothèse d'équi-diffusivité (D_K=D), il est possible de combiner ces équations de différentes manières pour éliminer le terme source réactionnel. On peut alors définir les variables de Schvab-Zel'dovich Z_1, Z_2, et Z_3 possédant la même équation de transport sans terme source réactionnel.

$$\begin{aligned} Z_1 &= y_F + \frac{y_P}{1+s} \\ Z_2 &= y_O + \frac{s y_P}{1+s} \\ Z_3 &= y_F - \frac{y_O}{s} \end{aligned} \tag{2.11}$$

On normalise chacun de ces scalaires pour que leurs conditions limites valent zéro dans l'entrée "comburant" et l'unité dans l'entrée "combustible".

$$f_n = \frac{Z_n - Z_{n,ox}}{Z_{n,F} - Z_{n,ox}} \qquad n = 1:3 \tag{2.12}$$

Dans ce cas, chacun des scalaires se transporte de la même manière (Eq.2.13) et possède des conditions limites similaires.

$$\frac{\partial \rho f_n}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_j}\left(\rho f_n u_j\right) = \frac{\partial}{\partial x_j}\left(\rho D \frac{\partial}{\partial x_j}\left(f_n\right)\right) \tag{2.13}$$

Par conséquent, chacune des quantités f_n représente la même variable *f*, définissant ainsi la fraction de mélange. Ce scalaire, aussi appelé fraction de mélange évolue de zéro à l'unité en fonction de la richesse du mélange. La position du front de flamme se détermine par l'isosurface f = fs correspondant à la fraction de mélange associée aux proportions stœchiométrique (Eq 2.14).

$$f_s = \frac{1}{1+s} \tag{2.14}$$

On comprend que la fraction de mélange apparaît comme une variable pertinente dans la théorie des flammes de diffusion. L'analyse de la structure de la flamme peut se faire dans l'espace de la fraction de mélange. C'est-à-dire dans le repère (n_f, t_1, t_2) (Fig.2.7).

$$\psi(x_1, x_2, x_3, t) = \psi(f, t)$$

Dans ce repère, nous faisons ensuite l'hypothèse de négliger les gradients de ψ dans les directions tangentes au gradient de f (faibles courbures).

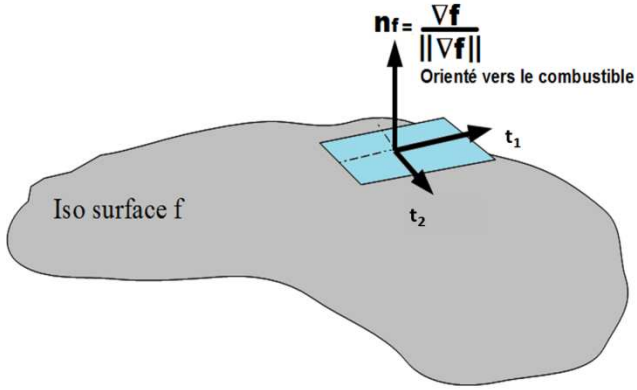


Fig.2.7 - Notion de structure de flamme dans le repère de la fraction de mélange

Ainsi, en supposant que seul le gradient des champs scalaires dans la direction normale à l'iso-surface de la fraction de mélange est significatif (Fig.2.7), le changement de variable dans les équations de transport des espèces se formule ainsi :

$$\rho \frac{\partial y_K}{\partial t} = \frac{1}{2}\rho\chi_f \frac{\partial^2 y_K}{\partial f^2} + \dot{\omega}_K \tag{2.15}$$

χ_f représente le taux de dissipation scalaire de f défini par l'équation 2.16 :

$$\chi_f = 2D\left(\frac{\partial f}{\partial x_i}\right)\left(\frac{\partial f}{\partial x_i}\right) \tag{2.16}$$

On note que cette quantité à la dimension [1/s], qu'elle est définie positive et qu'elle s'annule pour un scalaire non diffusif. On en conclut que les fractions massiques des espèces dépendent fortement de la fraction de mélange *f* et de la dissipation scalaire χ_f. Pour des forts taux de réaction, la cinétique est assez rapide pour négliger les aspects instationnaires et l'on trouve :

$$0 = \frac{1}{2}\rho\chi_f \frac{\partial^2 y_K}{\partial f^2} + \dot{\omega}_K \tag{2.17}$$

Si on pose des hypothèses supplémentaires sur le taux de réaction (système figé ou chimie infiniment rapide (Burke et Schuman), etc.), il est possible de déterminer les lois de reconstitution des espèces en fonction de la fraction de mélange ($y_K(f)$: Tab.1.1). Finalement, afin de déterminer les champs scalaires de température et des fractions massiques, il sera possible de découpler l'étude de la flamme de diffusion en deux problèmes :

- Détermination du champ scalaire $f(x_1, x_2, x_3, t)$ en résolvant l'équation de transport de la fraction de mélange.
- Détermination de la composition du mélange et de sa masse volumique via les lois de reconstruction.

L'objectif est maintenant de pouvoir établir une classification des flammes non prémélangées. Dans cette configuration, le front de flamme n'a pas de vitesse de propagation S_L ni d'épaisseur constante δ_L. On ne peut donc pas se baser sur les mêmes critères de classification qui ont été utilisés pour les flammes de prémélange. Des diagrammes dépendant du nombre de Damköhler Da et du nombre de Reynolds Re (Libby et Williams [76]) sont couramment utilisés. L'état d'agitation turbulente de la fraction de mélange sera un caractère important et il est aussi utilisé pour le paramétrage dans la classification (Vervisch et Veynante [137]).

Un critère important est l'épaisseur caractéristique de la couche de mélange. Elle détermine la localisation du domaine susceptible de réagir. L'épaisseur des couches diffusives de la fraction de mélange peut s'estimer à l'aide du coefficient de diffusion et du taux de dissipation de la variance des fluctuations (2.18).

$$l_d = \frac{D}{\chi_{\widetilde{f''^2}}} \tag{2.18}$$

Avec $\chi_{\widetilde{f''^2}} = 2D\left(\frac{\partial f''}{\partial x_i}\right)\left(\frac{\partial f''}{\partial x_i}\right) \overset{\mathrm{Re}_{t\to\infty}}{\Longrightarrow} \chi_f$

Si, de plus, on suppose certaines similitudes entre le spectre des fluctuations de la fraction de mélange et celui des fluctuations dynamiques du champ de vitesse, un modèle simple de relaxation linéaire des fluctuations peut-être retenu :

$$\chi_{\widetilde{f''^2}} \approx \frac{\widetilde{f''^2}}{c_f \tau_t} \tag{2.19}$$

Si on introduit l'échelle caractéristique des microstructures (l_k), celle des structures intégrales (l_t) et l'épaisseur de la zone de réaction (l_r), il est possible d'estimer les rapports entre ces différentes longueurs :

$$\frac{l_k}{l_d} = \left(\frac{\widetilde{f''^2}}{\mathrm{Re}^{1/2}}\right)^{1/2} \qquad \frac{l_t}{l_d} = \left(\widetilde{f''^2}\,\mathrm{Re}\right)^{1/2} \qquad \frac{l_k}{l_r} = \left(\frac{\widetilde{f''^2}}{\mathrm{Re}^{1/2}}\right)^{1/2} Da^{1/a} \tag{2.20}$$

(« a » étant une combinaison linéaire des coefficients stœchiométriques).

Le nombre de Damköhler est ici défini comme étant le rapport entre le temps de transfert par diffusion ($\tau_\chi \approx \frac{1}{\chi_{\widetilde{f}^{"2}}}$), et le temps chimique τ_c

$$Da = \frac{\tau_t}{\tau_c}\frac{1}{\widetilde{f}^{"2}} \qquad (2.21)$$

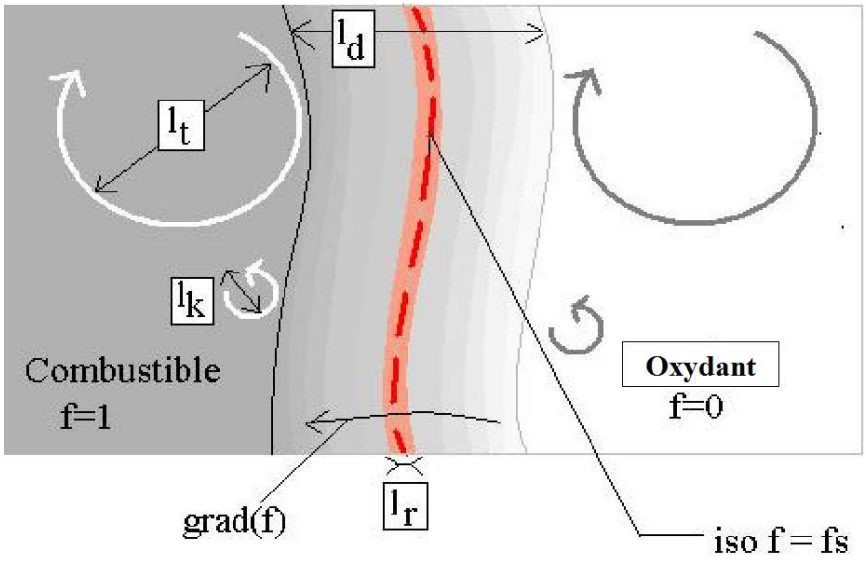


Fig.2.8 - Schéma expliquant l'importance de la comparaison des échelles caractéristiques intégrale, de turbulence, et de la cinétique chimique et de diffusion pour les flammes de diffusion

Pour des fortes fluctuations, le nombre de Damköhler devient assez faible pour que la zone de mélange devienne plus faible que la zone de réaction (Fig.2.8). Ce qui provoquera pour une valeur critique Da_q, l'extinction (« Quenching »).

La variance de la fraction de mélange étant comprise entre 0 et v_{max} avec

$$v_{max} = \widetilde{f}^{"2}_{max} = \tilde{f}(1-\tilde{f})\,.$$

On adoptera par la suite la normalisation de la variance par sa valeur maximale, que l'on notera s_g , la ségrégation (aussi appelée variance adimensionnelle) comprise entre 0 et 1. Quand s_g tend vers 0 on identifiera un mélange sans fluctuation définissant un mélange moléculaire entre les réactifs, alors que si s_g tend vers 1, il en viendra à définir le mélange comme une juxtaposition de particules fluides de carburant et de comburant pur, sans état intermédiaire (Fig.2.9).

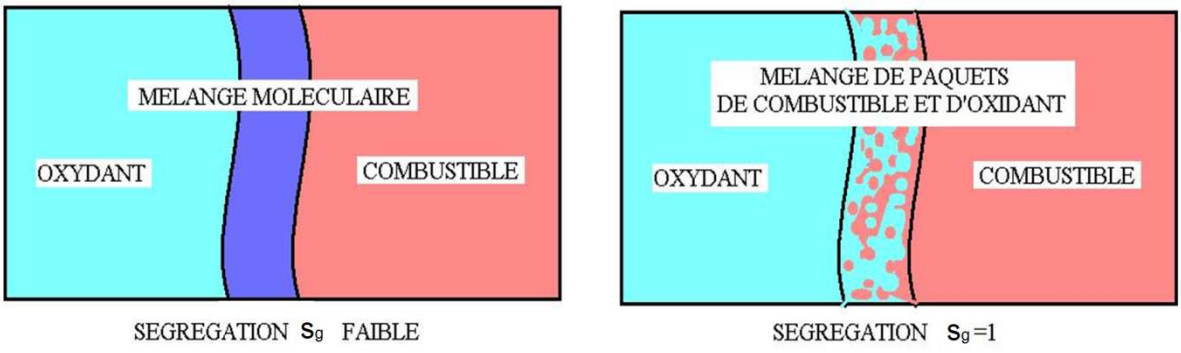


Fig.2.9 - Schématisation du mélange à faible et forte ségrégation

Les macro et micro mélanges sont des phénomènes très importants dans les flammes de diffusion. La réaction est fortement couplée avec l'aspect intationnaire des microstructures assurant le micro-mélange lorsque l'épaisseur de la zone de réaction diminue jusqu'à l'échelle des microstructures turbulentes ($l_r \sim l_k$), correspondant à un nombre de *Da* critique Da_c (Eq.2.22).

$$Da_c = \left(\frac{\mathrm{Re}^{1/2}}{\widetilde{f}^{"2}} \right)^{a/2} \qquad (2.22)$$

En conclusion, dans le diagramme de la figure 2.10 (Vervisch et Veynante [137]), on distingue la zone à fort nombre de Damköhler ($Da_q << Da_c < Da$). A ségrégation forte, les zones de réaction se localisent au niveau des interfaces séparant les différentes poches de comburant et de carburant. On parle alors de flammelettes séparées les unes des autres. A faible ségrégation, la zone de réaction est plus continue.

L'autre domaine est caractérisé par un nombre de Damköhler plus faible ($Da_q << Da < Da_c$). La flamme devient sensible aux effets instationnaires des microstructures. A faible ségrégation, la zone de réaction moyenne est épaissie par la turbulence. A forte ségrégation, on peut voir apparaître des extinctions partielles (exemple flamme liftée) jusqu'à l'extinction généralisée pour un état de ségrégation égal à 1.

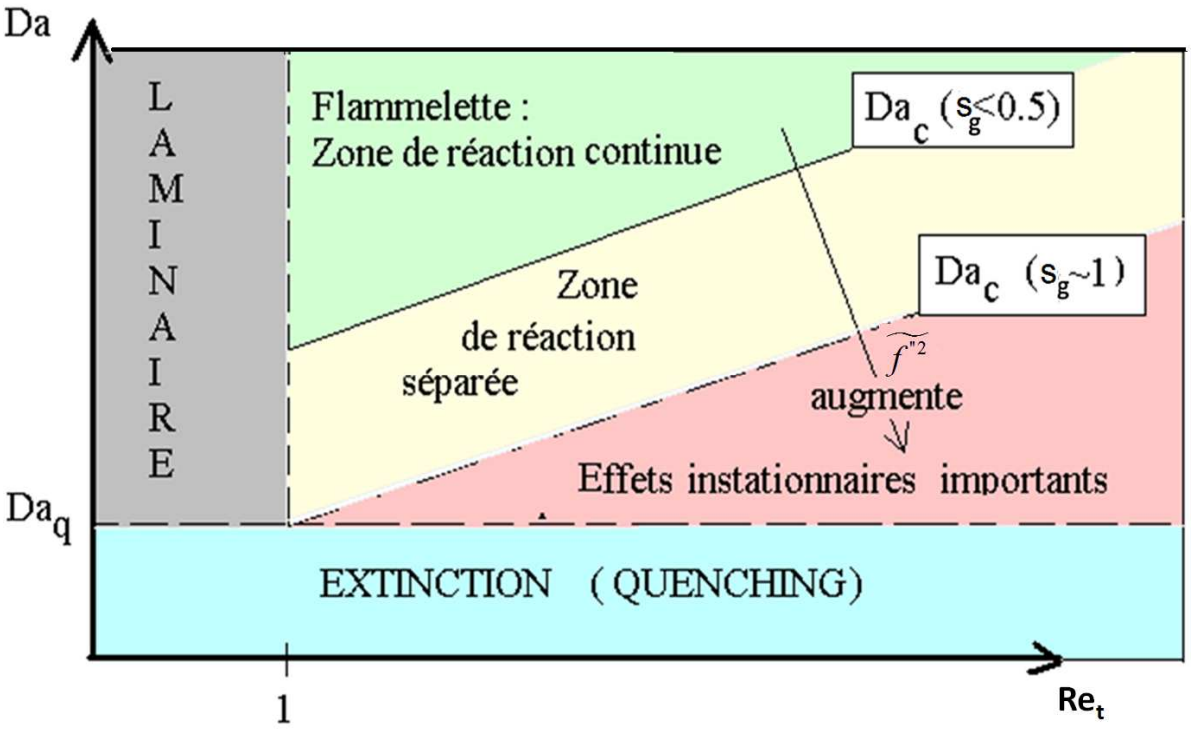


Fig.2.10 - Régime de combustion turbulente non-prémélangé

c. Flammes en milieu dilué

Différentes configurations de dilution.
Dans le cadre des flammes de diffusion, plusieurs configurations sont possibles pour introduire le gaz inerte.

Il existe les configurations de prémélange initial entre le diluant et l'un des réactifs. Ce cas de configuration se retrouve souvent dans les flammes « jet » où l'on introduit les réactifs par deux entrées distinctes. On peut distinguer 3 cas (Fig.2.11) : l'introduction d'une fraction massique de diluant dans l'arrivée de combustible (a), l'introduction d'une fraction massique de diluant dans l'arrivée d'oxydant (b), ou les deux simultanément (c).

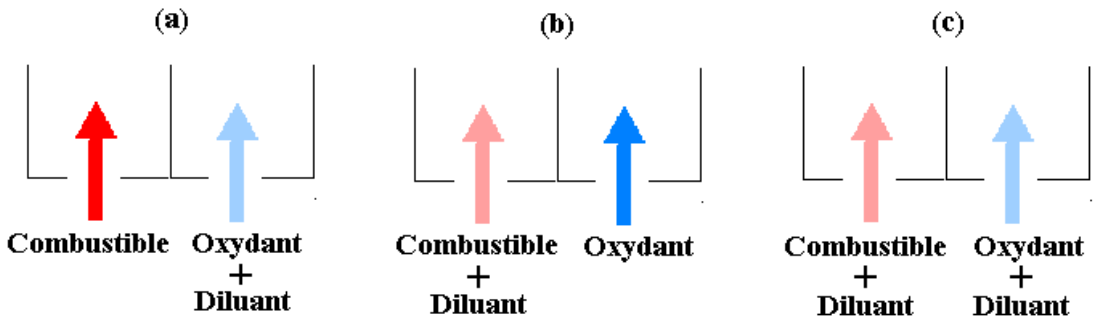


Fig.2.11 - Configuration d'un mélange avec diluant prémélangé

Dans chacune des situations, il faut comprendre que l'état de prémélange entre l'une des entrées et le diluant nous assure un mélange moléculaire entre les deux espèces dès l'injection. Dans le cadre d'équidiffusivité, nous en déduisons une invariance des proportions relatives entre le flux entrant et l'espèce inerte qui dilue. Nous notons D_1 et D_2 les espèces qui diluent respectivement le combustible et le comburant avec des proportions données. Un flux d'entrée se compose de κ_1 (fraction massique) de diluant et $1 - \kappa_1$ de combustible et l'autre flux d'entrée se compose de κ_2 de diluant et $1 - \kappa_2$ de combustible. En introduisant les fractions massiques de diluant D_1 et D_2 pour respecter les proportions de mélange on obtient :

$$\left[F+\frac{\kappa_1}{1-\kappa_1}D_1\right]+s\left[O+\frac{\kappa_2}{1-\kappa_2}D_2\right]\Rightarrow(1+s)P+\frac{\kappa_1}{1-\kappa_1}D_1+s\frac{\kappa_2}{1-\kappa_2}D_2 \qquad (2.23)$$

Et en définissant les espèces globales F^* comme le combustible dilué par D_1, O^* l'oxydant dilué par D_2 et P^* les produits dilués par D_1 et D_2, on trouve l'équation 2.24.

$$\left[1+\frac{\kappa_1}{1-\kappa_1}\right]F^*+s\left[1+\frac{\kappa_2}{1-\kappa_2}\right]O^*\Rightarrow\left[(1+s)+\frac{\kappa_1}{1-\kappa_1}+\frac{s\kappa_2}{1-\kappa_2}\right]P^* \qquad (2.24)$$

Après simplification on trouve une réaction ne faisant intervenir que deux espèces globales s'écrivant :

$$F^*+s^*O^*\Rightarrow(1+s')P^* \qquad (2.25)$$

Les proportions stœchiométriques respectant l'égalité 2.26 :

$$s^* = s\frac{1-\kappa_1}{1-\kappa_2} \tag{2.26}$$

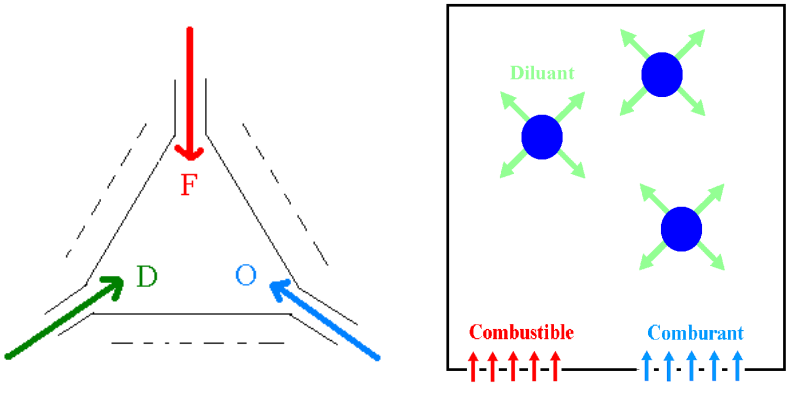
Dans ce sens, la fraction de mélange stœchiométrique devient :

$$f_S^* = \frac{1}{1+s^*} = \frac{1}{1+s\dfrac{1-\kappa_1}{1-\kappa_2}} = \frac{1}{1+\left(\dfrac{1}{f_S}-1\right)\dfrac{1-\kappa_1}{1-\kappa_2}} \tag{2.27}$$

Dans le cadre où l'hypothèse de cinétique infiniment rapide retenue dans les flammes de diffusion n'est pas altérée par la dilution, il est possible de réutiliser l'ensemble des méthodes décrites pour la réaction entre deux espèces et de l'appliquer à cette réaction faisant intervenir des espèces globales. Par exemple, la flamme de diffusion entre un carburant et l'air peut être décrite par deux flux d'arrivée :

- L'arrivée combustible (non dilué),
- l'arrivée d'oxygène dilué en azote : $1-\kappa_2$ = 0.21 pour l'oxygène et κ_2 = 0.79 pour l'azote (le dioxyde de carbone étant négligé).

Il existe des configurations où le diluant est injecté via une entrée différente de celles liées au combustible et au comburant. On peut définir une entrée localisée à un emplacement différent de l'entrée combustible et de l 'entrée oxydante (Fig.2.12.a – cas en oxy-combustion diluée par du CO_2 recyclé). On peut aussi introduire le diluant par le biais d'un changement de phase : pyrolyse d'un solide ou évaporation d'un liquide dont les vapeurs n'interfèrent pas avec la réaction (Fig.2.12.b). Par exemple, les gouttes d'un brouillard d'eau, en s'évaporant, jouent le rôle de sources ponctuelles de diluant aléatoirement réparties dans l'espace. Ces concentrations de diluants supplémentaires sont prises en compte par un terme lié à l'évaporation modélisé via les fermetures classiques des équations de transport en milieu diphasique. Dans ce cas, la surface totale interfaciale, d'où émane le diluant, peut ici être considérée comme la troisième entrée.



(a) (b)

Fig.2.12 - Configuration d'un mélange à trois entrées distinctes (a) et d'une dilution par changement de phase (b)

Limitations cinétiques liées à la dilution

Bien que l'hypothèse de chimie infiniment rapide soit souvent retenue, il est possible de constater l'invalidité de cette condition. Plusieurs modèles ont été développés pour tenir compte d'un équilibre ou d'un avancement de réaction. On peut citer par exemple le modèle de Libby et Williams [77] qui suppose un mélange partiellement prémélangé. Dans ce cas, l'avancement de la réaction n'est plus régi par le mélange et il faut donc introduire la résolution supplémentaire de l'avancement de la réaction. Le modèle avec « seuil » de Luo et Beck [88] et le modèle « MIL » ([95]) modifient les trajectoires des diagrammes de reconstitution des espèces pour tenir compte de la chimie finie. Quant au modèle RIF [65], il est capable de mettre en évidence les temps d'inflammation grâce à la résolution directe des lois de reconstitution des espèces dans l'espace des phases (résolution de l'équation 2.17) en paramétrant le taux de dissipation scalaire (χ_f) en fonction de la fraction de mélange *f* avec une forme présumée.

Du fait que les réactions chimiques sont influencées par les pressions partielles et la température, on peut comprendre que la dilution des espèces influence fortement la cinétique de la réaction. En ce qui concerne la réaction de combustion, la cinétique chimique en fonction des concentrations des réactifs se décrit par une loi évoluant de manière très spontanée pour passer d'un état de non-réaction (vitesse de réaction quasiment nulle) à un état de réaction à chimie considérablement grande (très haut nombre de Damköhler). L'hypothèse sous-jacente s'associe à un passage brusque entre l'état non inflammable et l'état inflammable et suppose que la zone intermédiaire (Da faible mais différent de zéro) n'est pas très étendue.

On peut constater expérimentalement cette distinction entre le domaine d'inflammabilité et le domaine non inflammable par exemple dans les travaux de Drysdale [36] et Lassus [71]. D'autres études ont permis de déterminer les lois d'évolution des domaines d'inflammabilité (Zabetakis [147] , Babrauskas [5], représenté dans la figure 2.13) et des caractéristiques déterminant le domaine inflammable (Peters [110]). Dans un contexte de sûreté incendie, il a été notamment déterminé les limites d'inflammabilité pour la combustion des gaz les plus courants avec l'air dans des conditions ambiantes de pression et de température. Nous présentons les résultats correspondants au tableau 2.1.

Combustible	LII		LSI		Température d'auto inflammation (°C)
	(% vol)	(%massique)	(% vol)	(%massique)	
Méthane CH_4	5	2.8	15	8.9	640
Ethylène C_2H_4	2,7	2,6	36	35	449
Acétylène C_2H_2	2,5	2.2	100	100	305
Ethane C_2H_6	3	3.1	12,4	12.3	515
Propane C_3H_8	2,1	3.1	9,5	13.7	500
Propène C_3H_6	2,4	3.4	11	15.0	458
Butane C_4H_{10}	1,8	3.5	8,4	15.5	408
1-Butène C_4H_8	1,6	3.0	10	17.6	325
2-Butène C_4H_8	1,7	3.2	9,7	17.1	384
Benzène C_6H_6	1,3	3.4	7,9	18.7	580
Heptane C_7H_{16}	1,05	3.5	6,7	24.6	223
Dodécane $C_{12}H_{26}$	0,6	3.2	4,7	28.5	204
Hydrogène H_2	4	0.3	75	17.1	520
CO	12,5	12.1	74	73.3	588

Tab.2.1 - Limites d'inflammabilité, et température d'auto-inflammation de différents combustibles dans les conditions ambiantes (tiré de [66])

La limite inférieure d'inflammabilité (LII) de la majorité des combustibles est influencée par la longueur de leur chaîne carbonée. Ainsi, le tableau 2.1 montre que, la LII sera d'autant plus faible que leurs chaînes carbonées seront longues. Cette limite reste relativement faible sauf pour quelques combustibles. En ce qui concerne la limite supérieure d'inflammabilité (LSI), elle varie énormément suivant la nature du combustible. Certaines combustions ne sont pas sujettes aux limitations hautes (ex. Acétylène) alors que d'autres sont restreintes à un intervalle réactionnel très resserré (propane).

D'autre part, les limites d'inflammabilités ne sont pas constantes en fonction du taux de dilution. Dans un contexte général, la dilution diminue le taux de production et resserre les limites d'inflammabilité autour du point stœchiométrique.

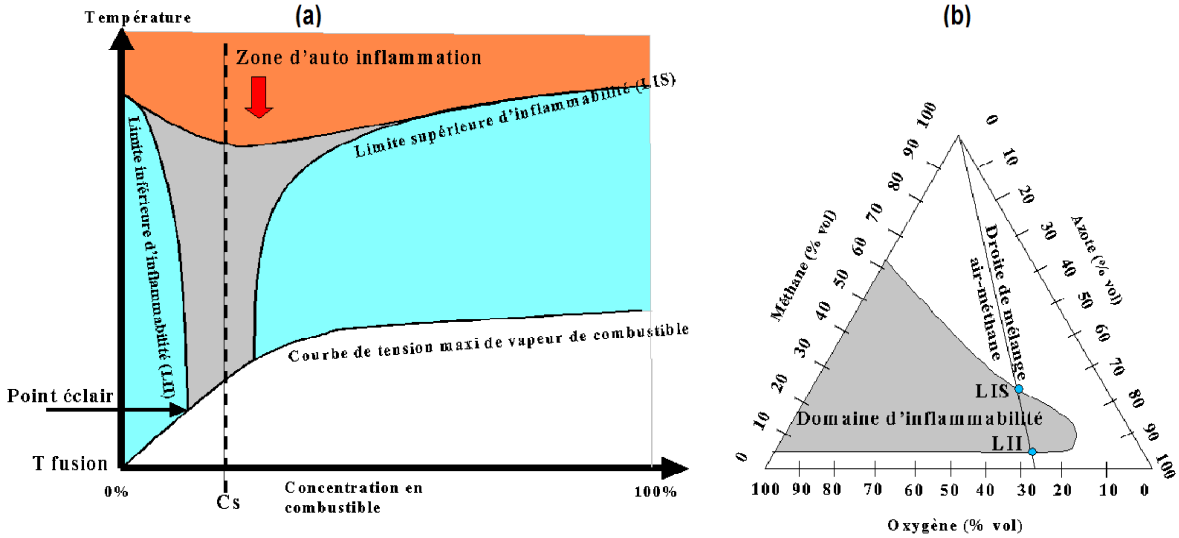


Fig.2.13 - Visualisation du domaine d'inflammabilité de mélange. (a) effet de la température initiale, (b) effet de la dilution

Compte tenu que la délimitation entre les proportions inflammables et les proportions non inflammables jouant un rôle dominant sur la stabilité de la flamme, on comprend mieux l'importance de la dilution pour altérer la réaction. Finalement l'extinction d'une flamme de prémélange est possible si nous sommes capables d'introduire des agents diluants dans la zone située juste avant le front de flamme. L'interprétation de ce phénomène d'extinction est l'augmentation significative du temps chimique de réaction rendant le nombre de Damköhler assez petit pour passer dans le domaine des flammes assujetties au phénomène de « Quenching ».

Eteindre une flamme de diffusion revient à se placer hors du domaine de stabilité (domaine non inflammable). Ceci revient à faire varier la composition du mélange réactionnel (comburant - carburant - diluant) pour rendre les proportions de mélange défavorables à l'inflammation moyennant l'ajout d'un gaz inerte. Les diluants couramment utilisés sont le CO2, la vapeur d'eau, l'azote et l'argon. La nature du constituant ajouté a son importance car il influe sur le domaine d'inflammabilité (Fig.2.14). Effectivement, chaque diluant possède une capacité qui lui est propre à réduire le domaine d'inflammabilité.

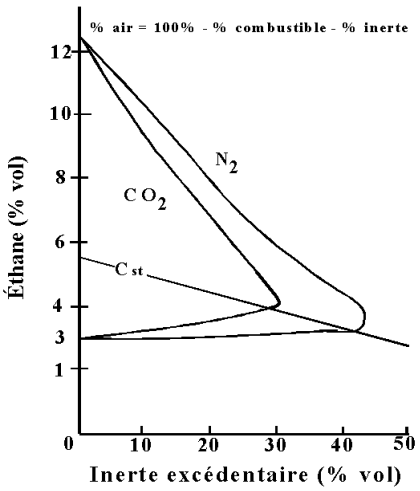


Fig.2.14 - Importance de la nature du diluant pour définir le domaine inflammable, d'après Drysdale [36]

Remarque 1 : l'introduction d'espèces non inertes est aussi possible. En règle générale, l'objectif est de les faire intervenir dans la réaction de combustion pour donner un aspect inhibiteur au diluant. Par exemple, la décomposition de CH3Br à chaud émet des radicaux Br susceptibles de catalyser la désactivation des radicaux légers H, OH. C'était le principe de l'utilisation des halons pour la lutte contre l'incendie.

Remarque 2 : il est nécessaire de mettre en évidence certains travaux qui montrent que certains inertes peuvent dans certaines configurations jouer un rôle dans la réaction. Par exemple, Richard [120] fait interagir un foyer avec de la vapeur d'eau et montre que dans la zone riche, la vapeur intervient en tant que catalyseur de la réaction.

Finalement, nous retiendrons la possibilité d'employer un modèle cinétique bimodal :

- Un régime de réaction infiniment rapide dans le cas où les proportions, bien que diluées, n'engendrent pas l'extinction (ou la non-inflammation)

- Un régime à chimie infiniment lente lorsque le mélange sera considéré non inflammable car introduit dans des proportions qui ne conduisent pas à un taux de réaction significatif.

Notion de température de croisement (*cross-over*), [121].

Lorsque l'on considère des schémas cinétiques simplifiés, il est assez facile de mettre en évidence un point particulier, ou plus exactement une valeur particulière de température (*cross-over*) pour laquelle la contribution des réactions chimiques de branchement de chaînes (ou de ramification) devient du même ordre de grandeur que celle des réactions de terminaison ([80], [142], [145]). Cela signifie qu'au-delà de cette limite, la combustion peut s'auto-entretenir car la production de radicaux nécessaires, pour que la décomposition chimique s'opère, est supérieure à sa consommation.

Dans un schéma global, le mélange de combustible et d'oxydant est converti directement en produit de combustion (accompagné d'un dégagement de chaleur) de telle sorte que la contribution de toutes espèces intermédiaires à la dynamique réactionnelle est définitivement occultée. Si l'énergie d'activation des réactions chimiques est suffisamment forte, on observe - pour une flamme de prémélange - que le niveau maximum de température correspond à l'endroit où le combustible est consommé (ou à son voisinage immédiat). Cela n'est généralement pas le cas pour les flammes d'hydrocarbures pour lesquelles les recombinaisons d'espèces intermédiaires maintiennent le dégagement de chaleur de sorte que le niveau de température maximum peut être atteint bien après que le réactif limitant présent dans le mélange initial ait été consommé. C'est pour pallier ces limitations que des représentations simples à deux étapes ont été très tôt introduites dans les analyses plus fines de la combustion et des structures de flamme ([60], [61]). Nous proposons maintenant d'illustrer ci-dessous la notion de température de *cross-over* à partir d'un mécanisme à deux étapes tel que ceux évoqués ci-dessus. Le mécanisme retenu est de la forme :

$$F + Z \rightarrow 2Z \qquad K_B = A_B \exp\left(-\frac{T_B}{T}\right) \tag{2.28}$$

$$Z + M \rightarrow P + M \qquad K_c = A_C$$

La quantité *Z* est une espèce fictive qui représente le *pool* (l'ensemble) des espèces intermédiaires disponibles (on suit en cela la démarche adoptée par Zel'dovich [149]). On parlera de radicaux pour les désigner même s'il s'agit là d'un abus de langage compte tenu que parmi l'ensemble des espèces intermédiaires qui constituent ce *pool,* seule une fraction limitée d'entre elles vont correspondre à des radicaux actifs. Ici, nous considérons donc *Z* comme une seule espèce intermédiaire qui participe à deux réactions consécutives qui conduisent à la conversion du combustible *F* en produits de combustion *P*. La première réaction est une réaction d'initiation ou d'attaque (auto-catalytique) du combustible *F* par l'intermédiaire *Z*.

Les évolutions des fractions massiques d'espèces sont données par l'équation 2.29 (où il est supposé que les flux de diffusion moléculaire peuvent être représentés par la loi de Fick).

$$\begin{aligned}\frac{\partial \rho y_F}{\partial t}+\frac{\partial}{\partial x_j}\left(\rho y_F u_j-\rho D_F\frac{\partial}{\partial x_j}\left(y_F\right)\right)&=-W_F\dot{x}_B\\ \frac{\partial \rho y_Z}{\partial t}+\frac{\partial}{\partial x_j}\left(\rho y_Z u_j-\rho D_Z\frac{\partial}{\partial x_j}\left(y_Z\right)\right)&=W_Z\left(\dot{x}_B-\dot{x}_C\right)\end{aligned} \tag{2.29}$$

Avec les taux molaires de production chimique associés aux étapes de branchement de chaînes puis de conversion en produits donnés respectivement par :

$$\begin{aligned}\dot{x}_B&=A_B\frac{\rho y_F}{W_F}\ \frac{\rho y_Z}{W_Z}\exp\left(-\frac{T_B}{T}\right)\\ \dot{x}_C&=A_C\frac{\rho y_Z}{W_Z}\ \frac{\rho}{W}\end{aligned} \tag{2.30}$$

Dans le cadre de l'étude simplifiée d'un milieu homogène en concentration, on obtient donc :

$$\frac{dy_Z}{dt}=\frac{W_Z}{\rho}\left(\dot{x}_B-\dot{x}_C\right) \tag{2.31}$$

Compte tenu des expressions données par l'équation 2.30, ceci conduit donc à :

$$\frac{dy_Z}{dt}=\rho y_Z\left(A_B\frac{y_F}{W_F}\exp\left(-\frac{T_B}{T}\right)-\frac{A_C}{W}\right) \tag{2.32}$$

Les solutions de cette équation différentielle ordinaire sont, par nature, très sensibles au signe du membre de droite. Ainsi, un équilibre au voisinage d'une concentration y_Z=0 ne sera stable que si ce second membre est négatif et sera, au contraire, instable s'il est positif. Cela permet d'identifier la température dite de *cross-over* T^{cross} pour laquelle, à une concentration connue de combustible (y_{Fc}), on a l'égalité suivante :

$$y_{Fc}\exp\left(-\frac{T_B}{T^{cross}}\right)=\frac{A_C}{A_B}\frac{W_F}{W} \tag{2.33}$$

Lorsque la température T est inférieure à cette valeur T^{cross} la concentration en radicaux va tendre vers zéro. Au contraire, si $T > T^{cross}$, une concentration initialement faible en radicaux va croître de manière exponentielle jusqu'à ce que la teneur en combustible soit suffisamment faible pour le signe du RHS de l'équation 2.32 change pour devenir négatif.

Une représentation plus réaliste consiste à suivre la proposition de Dold [31] et à considérer une forme plus générale pour le schéma à deux étapes incluant de nouveau branchement et recombinaison :

$$\begin{aligned}F+Z&\rightarrow\left(1-\mu_Z\right)F+\left(1+\mu_Z\right)Z & K_B&=A_B\exp\left(-\frac{T_B}{T}\right)\\ Z+M&\rightarrow P+M & K_C&=A_C\end{aligned} \tag{2.34}$$

Sous cette nouvelle formulation, seule une certaine proportion des molécules de combustible impliquées dans le processus de branchement conduit à la formation d'une quantité μ_Z de molécules intermédiaires. Ce schéma généralise le précèdent qui n'apparaît plus que comme un cas particulier

correspondant à $\mu_Z = 1$. L'emploi de ce schéma à deux étapes conduit à l'expression 2.35 très voisine de l'équation 2.33.

$$y_{Fc} \exp\left(-\frac{T_B}{T^{cross}}\right) = \frac{A_C}{A_B}\frac{W_F}{\mu_Z W} \qquad (2.35)$$

En effet, avec une description simplifiée permettant de décrire la cinétique de production/destruction des radicaux, on vient de mettre en évidence assez facilement ce point particulier, ou plus précisément cette valeur particulière T^{cross} de la température au delà de laquelle les réactions de branchement de chaînes sont plus rapides que celles de terminaison (qui conduisent à la formation de produits de combustion stables).

Comme nous l'avons indiqué plus haut, pour des valeurs de la température supérieures à T^{cross}, la combustion peut s'auto-entretenir alors qu'au dessous de cette valeur, cela n'est pas possible.

Malheureusement, cette valeur T^{cross} n'est bien définie que pour des schémas cinétiques extrêmement simplifiés pour lesquels elle peut même éventuellement être exprimée analytiquement, (Eq.2.33 et 2.35).

Pour estimer cette température à partir de cinétiques chimiques détaillées plus représentatives, nous nous proposons d'employer l'analogie suivante. Cette température de croisement coïncide en effet avec celle de la zone interne (réactive) dans une flamme prémélangée ([110], [68]) qui correspond au lieu du maximum du taux de dégagement de chaleur. Des calculs de flammes prémélangées de méthane et d'air non étirées sont réalisés pour différentes richesses, à l'aide du logiciel Premix de la libraire Chemkin pour estimer cette valeur T^{cross} comme étant celle associée à la localisation du taux de dégagement de chaleur maximum à la traversée du front de flamme.

Le schéma du Gas Research Institute a été retenu pour conduire ces calculs. Les résultats correspondants sont reportés sur la figure 2.15. Ils confirment que le choix effectué *a priori* de T^{cross} = 1300 K fournit un ordre de grandeur satisfaisant dans le but d'estimer les limites d'inflammabilité du mélange.

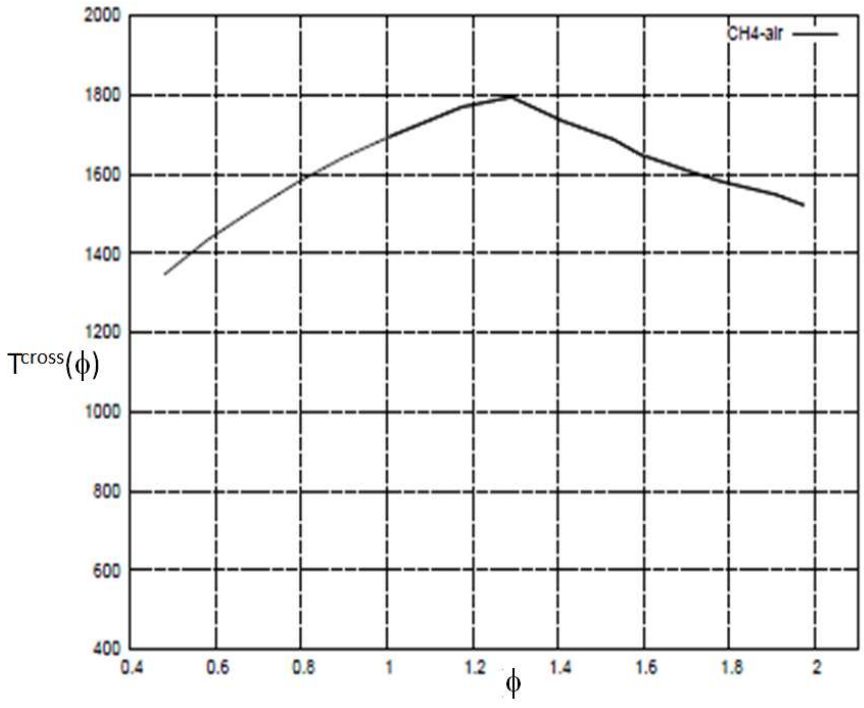


Fig.2.15 - Température de croisement en fonction de la richesse

II.2. Les milieux diphasiques turbulents

Autant que pour les écoulements dans les poreux [103], la pulvérisation de particules de charbon dans les chaudières, ou de gouttes de fuel dans les moteurs [67], la description des brouillards d'eau ouvre la problématique des milieux diphasiques. Afin d'évaluer correctement le comportement d'un brouillard d'eau dans un local confiné, il est nécessaire de bien décrire les diverses interactions qui s'opèrent par le biais des transferts de masse, de chaleur et de quantité de mouvement.

II.2.1. Echange de masse (évaporation) et de chaleur

Décrire correctement l'évaporation de gouttelettes liquides dans des environnements à hautes températures est un défit commun à un large éventail d'applications (combustion de gouttes de combustible, extinction, refroidissement, etc.). Quel que soit la description mathématique retenue, il existe un fort couplage non linéaire entre les transferts interfaciaux de quantité de mouvement, d'énergie et de masse. La modélisation de ces flux se déduit généralement de l'étude préalable de ces transferts pour une goutte unique et isolée. Les fermetures de ces transferts apparaissent dans beaucoup de modèles que ce soit pour des descriptions lagrangiennes (Sirignano, [130]), ou eulérienne de la phase dispersée (Drew et Lahey [35]). En fonction des phénoménologies que l'on cherche à modéliser, il est possible d'introduire différents niveaux de descriptions de l'évolution thermodynamique, et de l'évaporation de ces gouttelettes. Par exemple, Mashayek et al. [91] simule la dispersion de gouttelettes dans un milieu turbulent pour laquelle le modèle retenu pour l'évaporation est la loi classique « D^2 » (Godsave [49], Spalding [132]) qui suppose une température dans la gouttelette homogène (conductivité thermique infinie dans le liquide). En couplant cette loi avec un transport d'énergie, Hubbard et al. [56] ont mis en évidence l'importance de l'échauffement transitoire des gouttelettes dans le processus d'évaporation. Les modèles utilisés par Aggarawal et al. [2] intègrent une formulation à symétrie sphérique avec une conductivité du liquide finie et un modèle de circulation de révolution interne lorsque le nombre de Reynolds de gouttelettes est sensiblement supérieur à l'unité. Certains modèles proposent de prendre en compte la modification des transferts de chaleur (blowing) et du coefficient de traînée, lorsque les fortes évaporations créent un film autour de la goutte. Enfin, la formulation Langmuir-Knudsen propose un modèle plus descriptif en considérant que les gouttes ne vérifient pas l'hypothèse d'équilibre thermodynamique (discuté par Miller [94]).

Le diagramme de changement de phase d'un kilogramme d'eau en fonction de la chaleur apportée (Fig.2.16, Herterich [53]) met en évidence que l'échauffement de l'eau liquide favorise son évaporation. Certains modèles s'inspirent de ce diagramme pour formuler la loi simple d'évaporation en deux étapes : une première étape où la goutte utilise l'énergie reçue pour s'échauffer jusqu'à 100°C. Puis une étape de vaporisation utilisant le surplus d'énergie apporté ΔH pour transformer une partie de la masse Δm (Eq.2.36- L_{vap} étant la chaleur latente d'évaporation).

$$\Delta m = \frac{\Delta H}{L_{vap}} \tag{2.36}$$

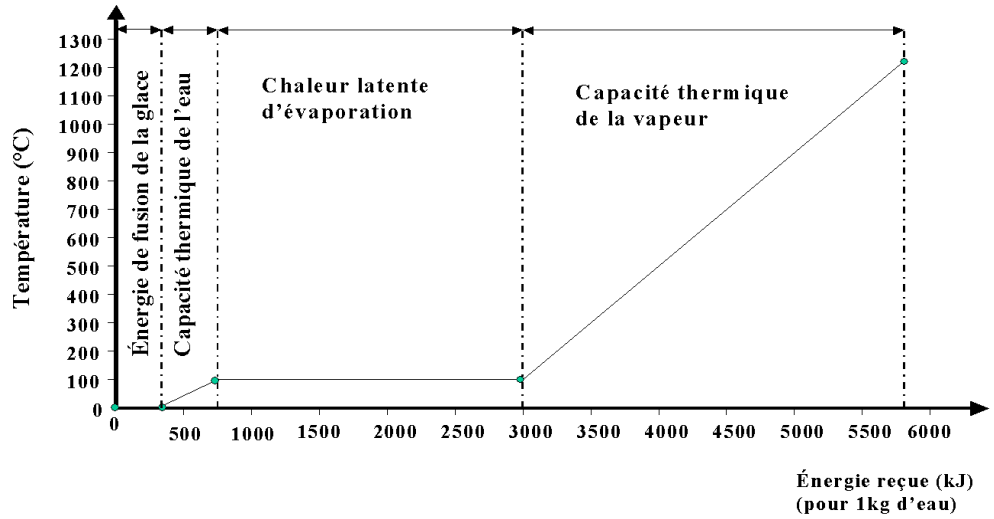


Fig.2.16 - Chaleur nécessaire à l'élévation d'un kilogramme d'eau

Il existe une description de l'évaporation plus fine qui fait intervenir le soufflage (effets du blowing) et le comportement d'équilibre à pression de vapeur saturante. Il est alors nécessaire de prendre en compte la théorie du film. Dans le cadre d'une goutte unique et isolée, la figure 2.17 schématise les différents échanges de masse et d'énergie entre la goutte et son environnement.

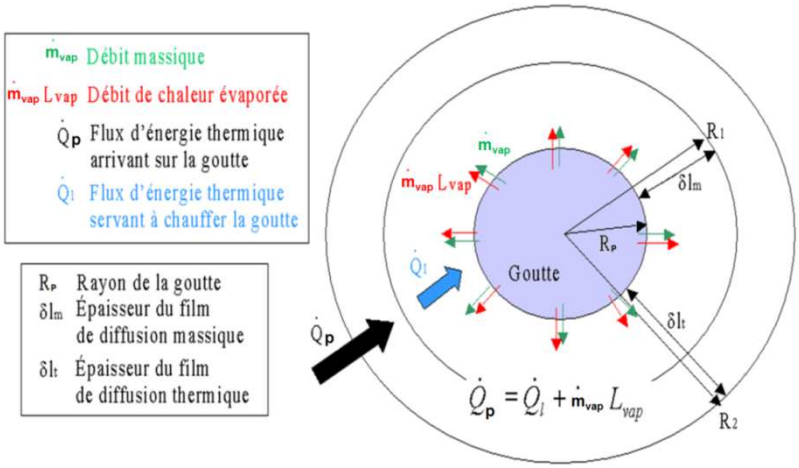


Fig.2.17 - Schématisation de l'évaporation d'une goutte

Expression du flux de masse d'une goutte

Le débit massique de vapeur d'eau peut être exprimé en fonction du rayon de la goutte R_P, du coefficient de diffusion laminaire D_{vap} de la vapeur dans le mélange gazeux, du nombre de Sherwood Sh, et du coefficient massique de Spalding B_M (Cf. annexe C)

$$-\dot{m}_p = \dot{m}_{vap} = 2\pi R_p \left(\rho_f D_{vap}\right) Sh \ \ln\left(1+B_M\right) \tag{2.37}$$

Ranz et Marshall [117], ont donné une corrélation du nombre de Sherwood Sh à partir du Reynolds de glissement de la goutte $\mathrm{Re}_p \left(=\dfrac{2R_p u_r}{\mu_f/\rho_f}\right)$ et du nombre de Schmidt $Sc_f \left(=\dfrac{\mu_f}{\rho_f D_{vap}}\right)$.

$$Sh = 2 + 0.6\,\mathrm{Re}_P^{1/2}\, Sc_f^{1/3} \tag{2.38}$$

Quant au coefficient de Spalding, il s'exprime via la fraction massique de la vapeur à la surface de la goutte (vapeur saturante) y_{vap}^{sat}, et à la valeur atteinte par cette fraction massique une distance suffisamment éloignée de la goutte y_{vap}^{∞}.

$$B_M = \frac{y_{vap}^{sat}\left(T_p\right) - y_{vap}^{\infty}}{1 - y_{vap}^{sat}\left(T_p\right)} \tag{2.39}$$

On remarquera que l'expression B_M, une fois introduite dans l'équation 2.37, assure l'équilibre de la pression partielle de vapeur à la pression partielle de vapeur saturante à la surface de la goutte qui ne dépend que de la température de la goutte. Effectivement, lorsqu'une phase condensée est au contact d'un gaz, les molécules les plus agitées ont tendance à s'échapper. Mais le processus inverse est aussi possible et un certain nombre de molécules de la phase gazeuse retournent dans le liquide. A une température donnée, le flux « entrant » et le flux « sortant » vont s'égaliser pour une certaine pression partielle de la vapeur. L'équilibre entre les deux phases est donc atteint. Cette pression de

vapeur saturante, notée p_{vap}^{sat} dépend donc uniquement de la température de la goutte et en est même une fonction croissante. La relation de *Clausius-Clapeyron* permet d'évaluer la pression de vapeur saturante (Eq.2.40) pour l'eau dans le cas de l'équilibre liquide-vapeur à partir de la pression atmosphérique p_0, de température d'ébullition T_{ebu}, de la constante des gaz parfaits R et de la masse molaire de la vapeur W_{vap} :

$$p_{vap}^{sat} = p_0 \exp\left(\frac{L_{vap}}{R / W_{vap}} \left(\frac{1}{T_{ebu}} - \frac{1}{T_p} \right) \right) \tag{2.40}$$

La pression totale du gaz, (souvent considérée égale à la pression atmosphérique) permet de déduire la loi $\mathrm{y}_{vap}^{sat}\left(T_p\right)$.

Expression du flux de chaleur reçu par une goutte

Le flux de chaleur reçu par la goutte peut être exprimé suivant l'équation ci-dessous :

$$\dot{Q}_p = 2\pi R_p \lambda_f Nu \frac{\ln\left(1+B_T\right)}{B_T}\left(T_\infty - T_s\right) \tag{2.41}$$

Cette expression fait intervenir le rayon de la goutte, la conductivité thermique du film gazeux (λ_f), le nombre de Nusselt *Nu*, le coefficient de transfert de chaleur de Spalding B_T, la température de surface de goutte T_s et la température du gaz très loin de la goutte T_∞.

Le nombre de Nusselt *Nu* se définit en fonction du nombre de Reynolds de glissement Re_p et du nombre de Prandtl $\mathrm{Pr}_f\left(=\dfrac{\mu_f}{\lambda_f / C_f}\right)$ - C_f étant la chaleur spécifique dans le film thermique.

$$Nu = 2 + 0.6\,\mathrm{Re}_P^{1/2}\,\mathrm{Pr}_f^{1/3} \tag{2.42}$$

Le coefficient de transfert de chaleur de Spalding se définit ainsi :

$$B_T = \exp\left(\frac{\dot{m}_{vap} C_f}{2\pi R_P \lambda_f Nu} \right) - 1 \tag{2.43}$$

Remarque : de nombreuses études introduisent l'hypothèse de nombres de Lewis unitaires.

$$Le_K = \frac{\lambda_f / \left(\rho_f C_f\right)}{D_K} = \frac{Sc_f}{\mathrm{Pr}_f} = 1 \tag{2.44}$$

L'égalisation du nombre de Prandtl et du nombre de Schmidt simplifie grandement le problème en égalisant le nombre de Nusselt et le nombre de Sherwood (*Nu*=*Sh*), l'épaisseur de diffusion du film thermique et du film massique ($\delta_{ft} = \delta_{fm}$), ainsi que le coefficient de transfert de chaleur de Spalding et le coefficient de transfert de masse de Spalding ($B_T = B_M$).

Remarque : l'hypothèse d'un nombre de Lewis unitaire est difficile à maintenir pour les fortes températures (Le_{vap}(100K) = 1.7) et montre les limites de cette approximation qui sous-évalue les effets liés au soufflage lorsque la goutte est dans un environnement assez chaud.

II.2.2. Echange de quantité de mouvement : le glissement

Il est possible, en première approximation, de prédire où les gouttes s'évaporent dans le local, en considérant principalement les effets thermiques du gaz sans que le glissement des gouttes n'interfère de manière significative. Cependant, l'inertie thermique ainsi que la capacité de pénétration des plus grosses gouttes jouent un rôle non négligeable dans la localisation des transferts interfaciaux. Evaluer correctement la pénétration de ces gouttes permet de mieux prédire l'évolution spatio-temporelle de la concentration en eau liquide dans le local, depuis sa zone d'émission jusqu'au moment de l'évaporation totale des gouttes. Les modèles attendus doivent donc pouvoir prédire cette pénétration en fonction de la granulométrie lors de l'injection qui évoluera dans le local via l'évaporation progressive des gouttes.

La première partie ayant consisté à recenser précisément les différentes approches de description d'un brouillard d'eau, notamment l'approche Euler-Lagrange et Euler-Euler, cette partie discutera davantage des forces significatives pour modifier la trajectoire d'une goutte dans un écoulement de gaz. L'approche diphasique eulérienne homogène est adaptée pour le transport de particules dont la granulométrie (1 à 50 µm) permet de négliger la vitesse de glissement entre les phases. Pour des gouttes ayant un diamètre relativement plus important (50-500µm), la vitesse de dérive des gouttes influe sur leurs capacités à pénétrer vers le foyer et donc à interagir avec lui de manière non négligeable. Les brouillards d'eau se caractérisent par un spectre en diamètre principalement inclue dans une plage où le glissement reste négligeable. Cependant, il existe des brouillards d'eau montrant un spectre de diamètre plus large qui n'autorise plus cette hypothèse de non glissement. Evidemment, après l'injection, ces gouttes auront une forte tendance à « rétrécir » mais il sera intéressant de savoir si le glissement, initialement non négligeable, influencera la capacité d'extinction en rapprochant la zone d'évaporation de la zone de combustion.

Ceci permettra de formuler par la suite un modèle de transport du brouillard issu d'un formalisme bi-fluide eulérien-eulérien simplifié avec modèle de glissement (« drift model »), basé sur la résolution d'une équation unique de la quantité de mouvement et sur l'introduction d'une déviation des gouttes par rapport aux lignes de courant des gaz. Un tel choix repose sur la faible inertie des gouttes considérées. Pour des cas industriels, cette approche apporte un bon compromis entre le niveau satisfaisant de description diphasique et les temps de calculs limités en comparaison avec d'autres formalismes diphasiques (eulérien bi-fluide complet, lagrangien).

a. Notions de vitesse de chute et temps de relaxation d'une particule

En ramenant, l'étude de la trajectoire d'une goutte à la description du mouvement de son centre de gravité, l'équation de conservation de la quantité de mouvement se ramène à :

$$\frac{d}{dt}\left(m_p u_p\right) = \sum F + F_f \qquad (2.45)$$

m_p étant la masse de la goutte, u_p la vitesse de la goutte, ΣF : la somme des forces de volume s'exerçant sur la goutte et les forces de surface. Sous l'hypothèse de particule sphérique qui ne soit pas en rotation, nous n'envisageons que la force de frottement F_f qu'exerce le fluide sur la goutte pouvant être formulé de la façon suivante :

$$F_f = -k\left(u_p - u_f\right) = -k\ \mathrm{u}_r \qquad (2.46)$$

u_f étant la vitesse propre du fluide, u_r la vitesse de glissement et k un coefficient de frottement.

Une particule en mouvement dans un fluide est sujette à plusieurs forces (Nerisson [98]). En ce qui concerne les gouttes, les forces de volume existantes sont multiples, un grand nombre de ces forces seront négligées dans l'étude :

- La force de masse ajoutée et la force d'histoire (force de Basset) sont liées au mouvement du fluide autour de la particule. Elles sont importantes seulement quand la masse volumique du gaz n'est pas négligeable devant celle des particules.

- La force brownienne traduisant l'agitation moléculaire du fluide. Son influence est d'autant plus importante que la particule considérée est petite. Elle est négligée dans l'étude d'interaction avec un foyer car cette force intervient après évaporation quasi totale des gouttes qui n'auront alors plus d'influence sur l'écoulement.
- Force de portance, est aussi négligée car on suppose un écoulement fluide autour de gouttes sphériques. On précisera que cet écoulement est considéré comme non perturbé par la présence d'autres gouttes.
- Les effets thermophorétiques (liés au gradient thermique).

Nous tentons de décrire la pénétration des gouttes les plus lourdes. Ainsi, nous considérerons uniquement la force de pesanteur F_P (avec ρ_p la masse volumique de la particule – celle de l'eau dans notre cas).

$$\sum F = F_P + F_\Pi = V_p \left(\rho_p - \rho_f\right) g \approx V_p \ \rho_p \ g \tag{2.47}$$

La poussée d'Archimède F_{Π} est supposée négligeable (masse volumique du gaz ρ_f négligeable face à la masse volumique de l'eau).

Pour analyser le comportement de la goutte face au changement de vitesse du fluide, nous prendrons le cas très simple d'une goutte initialement à la vitesse du fluide, avec un changement brusque de la vitesse du fluide. On supposera que la masse de la goutte ainsi que le coefficient de frottement sont des constantes. La résolution de la trajectoire de la particule est alors :

$$u_p = u_f + u_\infty \left(1 - \exp\left(-\,{}^{t}\!/\!_{\tau_p}\right)\right) \tag{2.48}$$

u_∞ définit ici la vitesse de glissement après un temps infini :

$$u_\infty = \frac{V_p \ \rho_p}{k} g \tag{2.49}$$

Remarque : La vitesse de glissement est supposée négligeable si u_∞ petit par rapport à u_f. La constante τ_p représente le temps caractéristique de relaxation de cette vitesse de glissement vers cette valeur.

$$\tau_p = \frac{V_p \ \rho_p}{k} \tag{2.50}$$

Ce temps caractérise le délai nécessaire à la particule pour ajuster sa vitesse aux conditions extérieures (ici la vitesse du gaz). Négliger l'aspect inertiel de la goutte revient à supposer que la goutte atteint très rapidement son état stationnaire lorsque le fluide change de vitesse.

$$u_p = u_f + u_\infty \left(1 - \exp\left(-\,{}^{t}\!/\!_{\tau_p}\right)\right) \approx u_f + u_\infty \tag{2.51}$$

Ceci revient à supposer le temps caractéristique de relaxation de la goutte (τ_p) très petit par rapport au temps caractéristique des fluctuations de la vitesse du fluide « vu » (τ_f). Dans le cadre d'un écoulement fluide turbulent, le spectre des vitesses du fluide possède plusieurs temps caractéristiques :

- τ_f^k correspondant aux variations turbulentes de la vitesse du fluide « vu »
- τ_f^m correspondant aux variations de la vitesse moyenne du fluide « vu »

Si τ_p est très petit par rapport à τ_f^m, et très grand par rapport à τ_f^k, cela signifie que la trajectoire des gouttes n'a pas le temps d'être affectée par les fluctuations du champ turbulent du gaz, alors que les variations du champ moyen sont directement « vues » par les particules (Fig.2.18).

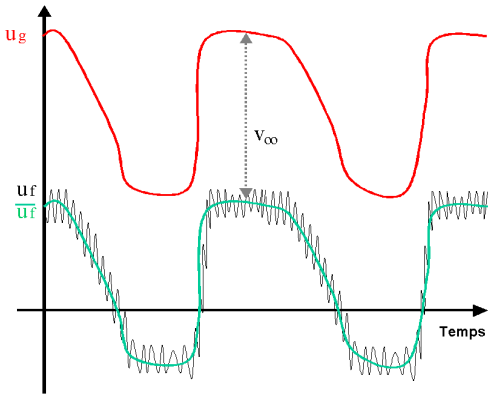


Fig.2.18 - Schématisation de l'intégration des fluctuations des vitesses du gaz lors du transport de particules dont le temps caractéristique de réponse est beaucoup plus grand que le temps caractéristique des fluctuations

En règle générale, il n'existe pas de réelle séparation d'échelle entre les fluctuations moyennes et les fluctuations turbulentes du fluide « vu ». L'effet lié aux fluctuations rapides sera introduit par un transport supplémentaire de diffusion-dispersion des particules.

Pour déterminer ce temps caractéristique τ_p ainsi que cette vitesse de glissement, il est indispensable de connaître le coefficient de frottement *k*. Il existe une manière de caractériser la force de frottement (et donc le coefficient *k*) via un coefficient de traînée *Cd*, la vitesse de glissement u_r et la surface projetée A_{Sp} du volume de la goutte sur le plan perpendiculaire à la vitesse de glissement :

$$Cd = \frac{F_f}{\frac{1}{2}\rho_f \left(u_f - u_p\right)^2 A_{Sp}} = \frac{F_f}{\frac{1}{2}\rho_f u_r^2 A_{Sp}} = \frac{k}{\frac{1}{2}\rho_f u_r A_{Sp}} \qquad (2.52)$$

Suivant, la forme de la particule, ce coefficient suit une évolution en fonction du nombre de Reynolds de glissement (Fig.2.19).

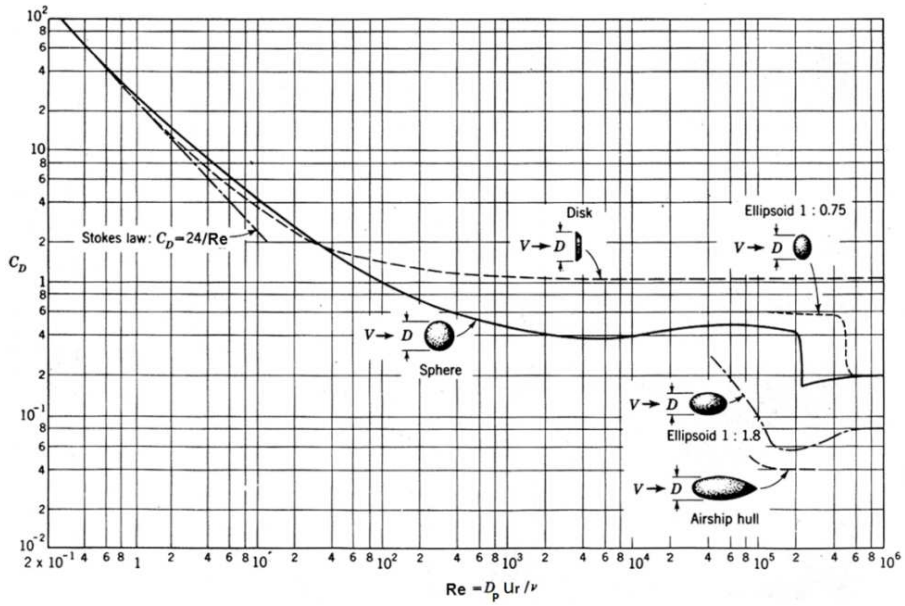


Fig.2.19 - Evolution du coefficient de traînée en fonction du nombre de Reynolds de glissement pour des particules avec plusieurs profiles

4 régimes se distinguent bien :

- Les glissements à faible nombre de Reynolds (régime de Stokes)
- Un régime intermédiaire pour un nombre de Reynolds compris entre 1 et 1000
- Le régime de Newton si nous sommes à Reynolds compris entre 1000 et 2 10^5
- Et enfin le régime de décrochage avec une chute caractéristique du coefficient de traînée pour les nombres de Reynolds encore supérieurs.

Chacun des régimes peut être caractérisé par une loi d'évolution $Cd(Re_p)$. En régime de Stokes, Il est possible de donner une loi d'évolution de la forme :

$$Cd = \frac{24}{\mathrm{Re}_p} \tag{2.53}$$

En régime intermédiaire, plusieurs lois sont connues. Les bornes de ce régime étant moins bien connues, il est préférable d'énoncer des lois qui se raccordent au régime de Stokes. Pour une particule sphérique, on peut énoncer la loi ci-dessous.

$$Cd = \frac{24}{\mathrm{Re}_p}(1+\alpha \mathrm{Re}_p^{\beta}) \tag{2.54}$$

Les coefficients α et β sont ici des valeurs paramétriques. On peut citer la corrélation de Schiller et Nauman (α=0.15 et β=0.687), la corrélation de Ishii et Zuber : (α=0.1 et β=0.75), de Hanel (α=0.13 et β=0.85) et celle de Klyachko (α=1/6 et β=2/3).

Pour le régime de Newton le coefficient de traînée Cd devient quasi constant généralement égal à 0.44. Au-delà du régime de Newton, le décrochage provoque une chute du coefficient de traînée pour stagner à une valeur de l'ordre de 0.07.

Nous considérerons par la suite que le nombre de Reynolds de glissement ne dépassera pas le régime intermédiaire. En effet, pour le régime de Newton, la vitesse de glissement infinie est donnée par la relation :

$$u_{\infty} = \sqrt{\frac{8}{3}\frac{R_p \rho_p}{\rho_f Cd} g} \tag{2.55}$$

Le diamètre de la goutte peut alors être calculé en fonction du Reynolds de glissement.

$$2R_p = \left(\frac{3}{4} \frac{\mathrm{Re}_p^2 \nu_f^2 \rho_f Cd}{\rho_p \, g} \right)^{1/3} \tag{2.56}$$

Une application numérique d'une goutte glissant dans de l'air donne (avec Re_p > 1000) une goutte dont le diamètre D_p est supérieur à 2 mm. La taille caractéristique des gouttes que nous pulvérisons ne dépassant pas ce diamètre, cette plage de Reynolds ne concernera pas cette étude. Finalement la corrélation de Schiller et Nauman (Eq.2.54) sera retenue pour décrire la loi d'évolution du coefficient de traînée qui décrit bien le régime de Stokes et le régime intermédiaire avec une erreur maximale de 0.6%.

Dans ce cas, pour connaître la vitesse de dérive u_∞, on doit résoudre l'équation sur le nombre de Reynolds :

$$\mathrm{Re}_p(1+0.15\mathrm{Re}_p^{0.687}) = \frac{4}{9}\frac{g}{\nu_f^2}\frac{\rho_p}{\rho_f}R_p^3 \tag{2.57}$$

La vitesse relative limite se retrouve grâce à l'expression du Reynolds de glissement :

$$u_\infty = \frac{\nu_f \mathrm{Re}_p}{2R_p} \tag{2.58}$$

Remarque : l'expression du coefficient de frottement peut être déduite des équations précédentes :

$$k = \frac{6\pi\mu_f R_p}{1+0.15\mathrm{Re}_p^{0.687}} \tag{2.59}$$

Cette expression nous permet d'évaluer le temps caractéristique τ_p.

$$\tau_p = \frac{2\rho_p R_p^2}{9\mu_f\left(1+0.15\mathrm{Re}_p^{0.687}\right)} \tag{2.60}$$

Le temps caractéristique de la turbulence est le temps caractéristique des plus grands tourbillons

$$\tau_f^k = \frac{k}{\varepsilon}$$

avec k l'énergie cinétique turbulente et ε le taux de dissipation de cette énergie cinétique turbulente.

Pour évaluer le temps caractéristique des vitesses moyennes, il serait nécessaire de calculer les variations des vitesses du gaz suivant la trajectoire des gouttes.

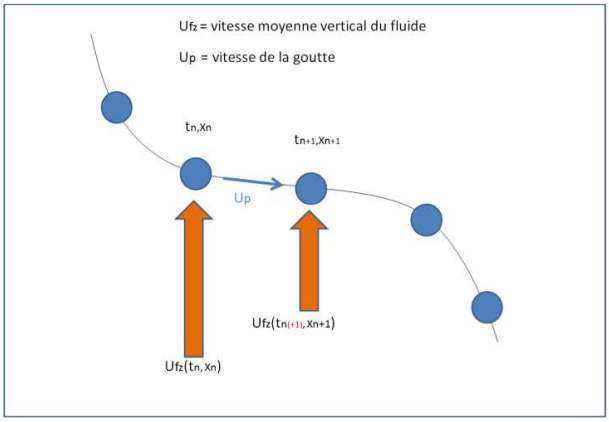


Fig.2.20 - Schéma explicatif de définition du temps caractéristique des vitesses moyennes du fluide

En considérant les vitesses moyennes du gaz comme un champ stationnaire (simplification), il est possible d'évaluer le temps caractéristique moyen du gaz via l'expression suivante :

$$\tau_f^m = \frac{X_{n+1} - X_n}{U_{fz}\left(t_{n+1}, X_{n+1}\right) - U_{fz}\left(t_n, X_n\right)} \approx \frac{X_{n+1} - X_n}{U_{fz}\left(t_n, X_{n+1}\right) - U_{fz}\left(t_n, X_n\right)}$$

$$\tau_f^m \approx \left| \nabla\left(\tilde{u}_{fz}\right).\frac{\vec{u}_p}{\left\|\vec{U}_p\right\|} \right|^{-1} \tag{2.61}$$

Remarque : seule les variations de la vitesse moyenne du gaz suivant la direction verticale sont considérées car le glissement ne s'opère que suivant cette direction.

b. Glissement d'une goutte en cours d'évaporation

L'étude précédente, se concentrait sur une particule ne subissant aucune perte de masse. Les gouttes injectées dans des forts gradients de température subissent une forte déperdition de masse par évaporation. Dans le cas où la perte de masse ne serait pas homogène au niveau de la surface de la goutte, une force supplémentaire est à prendre en compte.

$$m_p \frac{d}{dt}\left(u_p\right) = \sum F + f - \int u_b \rho_e dS \tag{2.62}$$

Effectivement, il est possible de constater que les gouttes d'eau ont tendance à fuir les zones très chaudes car leur face exposée à cette zone s'évapore plus rapidement. On pourrait qualifier ce processus vapo-phorèse. Dans le cadre de notre étude, au même titre que les effets thermophorétiques, cette force ne sera pas prise en compte.

Malgré tout, il sera intéressant de prendre en compte la diminution du frottement par les effets de soufflage. En effet, pour des forts débits d'évaporation, le flux de masse sortant de la goutte diminue le coefficient de traînée. Bellan et Harstad [9] ont comparé plusieurs modèles de déviation de la force de traînée par le flux d'évaporation. Les corrélations peuvent s'exprimer en fonction du nombre de Reynolds lié au soufflage :

$$\mathrm{Re}_b = \frac{\mu_f u_b}{\rho_f d_p} = \frac{\mu_f \dot{m}_{vap}}{\pi \rho_f^2 D_p^3} \tag{2.63}$$

Un exemple de corrélation pour la modification du coefficient de frottement k est formulé via l'expression suivante :

$$k_b = \frac{k}{1 + q\,\mathrm{Re}_b^r} \tag{2.64}$$

Les paramètres q et r sont eux même reliés au nombre de Reynolds de glissement (Re_p) par les relations suivantes :

$$q = 0.09 + 0.077 \exp\left(-0.4\,\mathrm{Re}_p\right)$$

$$r = 0.4 + 0.77 \exp\left(-0.04\,\mathrm{Re}_p\right) \tag{2.65}$$

II.3. Transfert radiatif dans les milieux chargés en gouttes.

Dans cette partie, nous présentons la phénoménologie de rayonnement à travers un mélange gaz-gouttelettes. Bien que l'on ait mis en évidence l'importance de ce phénomène dans l'interaction entre un foyer et un spray de gouttes, nous ne développerons que succinctement cette partie. Effectivement, l'objectif principal de la thèse s'est focalisé sur d'autres phénoménologies liées à la présence du brouillard. Certaines démarches ont été entreprises pour ouvrir des perspectives plus concrètes du rayonnement sans pour autant approfondir le sujet.

Code_Saturne permet de coupler un modèle rayonnement pour décrire au mieux les échanges de chaleur par flux rayonné qui ne sont pas négligeables face aux échanges interfaciaux de chaleur. L'introduction du rayonnement permet alors de décrire plusieurs phénomènes supplémentaires :

- Bien que le coefficient d'absorption ne soit pas très important pour l'eau liquide, les forts effets de multi-diffusions à travers le brouillard permettent d'accroître la longueur du parcours par les rayons lumineux et de les atténuer en conséquence. Le brouillard d'eau fait alors office d'écran.

- Les gouttelettes recevant de la chaleur supplémentaire auront ainsi tendance à s'échauffer et s'évaporer plus rapidement.

II.3.1. Le rayonnement thermique

L'équation fondamentale qui régit la variation de luminance dans le milieu, appelée Équation du Transfert Radiatif (ETR) s'écrit :

$$\frac{dL_\lambda}{\partial r}\left(\vec{r},\vec{\Omega}\right) = -\kappa_\lambda L_\lambda\left(\vec{r},\vec{\Omega}\right) - \sigma_\lambda L_\lambda\left(\vec{r},\vec{\Omega}\right) + n_\lambda^2 \kappa_\lambda L_\lambda^0\left(T\left(\vec{r}\right)\right) + \frac{1}{4\pi}\int_{4\pi} \sigma_\lambda L_\lambda\left(\vec{r},\vec{\Omega}'\right) P_\lambda\left(\vec{\Omega}\to\vec{\Omega}'\right) d\Omega' \tag{2.66}$$

Elle représente la variation de la luminance *L* à la position $\vec{r}$ dans la direction $\vec{\Omega}$ pour la longueur d'onde λ.

Les deux premiers termes du membre de droite représentent les pertes de luminance dues à l'absorption du milieu (via le coefficient d'absorption κ_λ) et à la diffusion du rayonnement dans une autre direction (via le coefficient de diffusion σ_λ). Les troisièmes et quatrièmes termes représentent les gains de luminance du à l'émission propre du milieu et au rayonnement venant d'une autre direction et repartant dans la direction $\vec{\Omega}$.

II.3.2. Les propriétés radiatives

Le phénomène d'absorption correspond à la capacité du milieu à absorber l'énergie radiative. Un milieu très absorbant va donc avoir tendance à monter en température du fait de l'absorption de l'énergie radiative et à émettre beaucoup de rayonnement. Le phénomène de diffusion est une redistribution directionnelle de l'énergie radiative. Il ne contribue pas à diminuer l'énergie radiative mais simplement à dévier la direction de propagation.

a. Propriété radiative du gaz

Le rayonnement du gaz fait intervenir plusieurs espèces aux propriétés différentes et rend l'évaluation des coefficients d'absorption de la phase gazeuse plus complexe.

Il est difficile de décrire fidèlement les propriétés exactes du mélange sans discrétiser de façon très fine le spectre des longueurs d'onde. Certaines approches permettent de représenter de manière plus ou moins précise ces propriétés avec un certain compromis entre le temps de calcul et la précision des résultats. La description raie par raie [135] est le modèle le plus précis pour évaluer les propriétés radiatives des gaz mais reste très onéreuse en temps de calcul. A l'opposé, le modèle de gaz gris, représentant l'absorption par le milieu gazeux au moyen d'un seul coefficient d'absorption, est beaucoup moins coûteux mais reste parfois insuffisant pour certaines configurations [81]. Entre ces deux extrêmes, un large panel de modèles existe avec différents degrés de finesse comme par exemple les modèles statistiques à bandes étroites [131] et les modèles de sommes de gaz gris [47].

b. Propriété radiative du liquide

La prise en compte des gouttes d'eau lors du transfert radiatif fait apparaître plusieurs difficultés. Les gouttes sont des particules absorbantes, émettrices et diffusantes dont les propriétés radiatives doivent être a priori calculées par la théorie de Mie [102]. Typiquement, la théorie de Mie prédit les coefficients d'absorption, d'émission et de diffusion pour une goutte en fonction du paramètre de taille x_a dépendant de la taille de goutte et de la longueur d'onde λ :

$$x_a = 2\pi R_p / \lambda \qquad (2.67)$$

Les indices de réfraction en fonction de la longueur d'onde sont tabulés dans l'article de Hale et Querry [50]. Les propriétés « grises » peuvent être ensuite établies en fonction du diamètre des gouttes. Une fois ces propriétés déterminées, on peut facilement établir celles d'un ensemble de gouttes « monodisperses », ou « polydisperses ».

II.3.3. Les conséquences sur l'interaction feu-brouillard

Lors du transport de l'énergie d'un mélange, il existe des termes sources (liés à l'absorption) et des termes « puis » (liés à l'émission) pour chacune des phases rencontrées. Ce terme résultant de la somme de ces deux contributions s_R (Tab.3.3), génère des modifications des niveaux d'énergie de la phase liquide et du mélange gazeux réactionnel. En espace confiné, les flux que rayonne les parois du local n'est pas négligeable et introduit un terme source de rayonnement significatif pour l'énergie. A terme il sera nécessaire d'étudier plus spécifiquement le comportement du rayonnement dans l'extinction.

a. Conséquence sur les gouttelettes

Lors de la pulvérisation, les flux rayonnés par le foyer incendie vont accentuer l'échauffement des gouttes favorisant leur évaporation. La pénétration des gouttes vers la flamme sera moins importante mais l'asphyxie en O_2 et le refroidissement du milieu environnant se fera plus en amont.

b. Conséquence sur la combustion gaz

La zone de combustion est propice à l'émission de rayonnement. Le panache chaud se refroidit légèrement. Cette diminution des températures n'a pas une conséquence énorme sur une étape de combustion déjà achevée. Cependant les flux rayonnés transmis vont élever la température dans le local et augmenter le domaine d'inflammabilité. Ceci aura pour effet de favoriser l'inflammation des gaz initialement non inflammables.

III.ETABLISSEMENT DU MODELE

III.1. Modélisation de la combustion turbulente en milieu dilué

La modélisation de l'extinction des flammes de diffusion par aspersion peut se décomposer en deux grands problèmes : la partie liée à l'aspect phénoménologique des physiques mises en jeu par le caractère diphasique dû à la présence d'une phase liquide (eau) et d'une phase gazeuse (le mélange réactif) et la partie liée directement à la combustion turbulente dans un milieu dilué en vapeur d'eau. Nous traiterons de cette dernière partie dans cette section.

Dans le deuxième chapitre, nous nous intéresserons plus particulièrement à l'extension du formalisme de fraction de mélange pour les flammes de diffusion en milieu dilué en considérant les hypothèses à conserver ou à développer pour décrire convenablement les flammes d'incendie se développant dans un environnement chargé en inerte tel que la vapeur d'eau. Cette extension a abouti à des développements spécifiques du modèle :

- L'élargissement du modèle à fraction de mélange pour décrire un mélange ternaire via l'utilisation d'un formalisme « multi-fractions de mélange »
- La prise en compte d'une cinétique chimique finie présentant des limites d'inflammabilité.
- L'introduction d'une PDF jointe pour les différentes fractions de mélange et le modèle simplifié résultant d'une hypothèse effectuée sur le support de la PDF.

III.1.1. Description d'un modèle à multi-fractions de mélange

a. Hypothèses liées aux flammes de diffusion

Pour décrire une flamme de diffusion en milieu dilué, nous ne supposerons plus deux entrées caractérisant le fuel et l'oxydant mais trois entrées faisant intervenir l'injection d'une troisième espèce : le diluant. Ainsi, l'ensemble des hypothèses caractérisant les flammes de diffusion turbulentes sera utilisé à l'exception de l'hypothèse de chimie infiniment rapide.

- La réaction chimique n'est supposée suivre qu'une seule étape irréversible dont la réaction bilan en terme massique s'exprime ainsi :

$$F + sO + tD \Rightarrow (1+s)P + tD \tag{3.1}$$

- L'énergie et les espèces ont la même diffusivité (nombres de Lewis unitaires).

- Faible nombre de Mach : la pression thermodynamique est considérée constante et les vitesses relativement faibles permettent de négliger l'échauffement par frottement visqueux.

- Flammes à structure de flammelettes.
  Cette hypothèse est discutable car la dilution affecte la réaction en limitant la vitesse de réaction. La diminution du nombre de Damköhler peut alors engendrer l'apparition d'effets instationnaires liés aux microstructures qui empêcheraient, dans certaines mesures, de considérer la zone de réaction comme une zone continue (modèle de flammelettes). Nous supposerons cependant que la dilution n'empêche pas de considérer le régime de la flamme comme un ensemble de flammelettes.

- Il est important de mettre en avant l'utilisation d'une hypothèse de chimie non infiniment rapide. Bien que le diluant n'intervienne pas directement dans le processus global de la réaction, il joue un rôle indirect sur la cinétique chimique via les limites d'extinction. La prise en compte de ce phénomène se place au cœur de l'extension du modèle présentée ici.

Dans cette partie, nous considérerons, un transport de l'énergie adiabatique ne faisant intervenir ni rayonnement (non étudié), ni échange de chaleur entre les différentes phases. Nous montrerons par la suite comment la perte de chaleur de la phase gaz à été prise en compte.

b. Equations de transport instantanées

Les équations de transport instantanées des fractions massiques des espèces font intervenir un terme source de production chimique (Eq.3.2).

$$\frac{\partial \rho y_K}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_j}\left(\rho y_K u_j\right) = \frac{\partial}{\partial x_j}\left(\rho D_K \frac{\partial}{\partial x_j}\left(y_K\right)\right) + \dot{\omega}_K \tag{3.2}$$

La réaction bilan massique (Eq.3.1) permet de donner les relations entre les termes source :

$$\begin{aligned} \dot{\omega}_O &= s\dot{\omega}_F \\ \dot{\omega}_P &= -(1+s)\dot{\omega}_F \\ \dot{\omega}_D &= 0 \end{aligned} \tag{3.3}$$

Pour l'équation de l'énergie, le faible nombre de Mach nous permet de négliger le terme d'échauffement visqueux. Sans rayonnement, le transport de l'énergie est considéré adiabatique. En utilisant la loi de Fourier pour estimer la diffusion moléculaire de l'énergie, on obtient l'équation pour l'enthalpie sensible :

$$\frac{\partial \rho h_S}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_j}\left(\rho h_S u_j\right) = \frac{\partial}{\partial x_j}\left(\rho D_{th} \frac{\partial}{\partial x_j}\left(h_S\right)\right) + \dot{\omega}_h \tag{3.4}$$

avec

$$\dot{\omega}_h = -\sum\nolimits_K \dot{\omega}_K \Delta h^0_{f,K} \tag{3.5}$$

c. Etablissement des fractions de mélange

Sous l'hypothèse d'équi-diffusivité des espèces et de l'énergie (cf. nombres de Lewis unitaires : $D_K = D_{th} = D$), les relations de proportionnalité entre les différents termes source (Eq.3.3) permettent de combiner linéairement les équations d'évolution des espèces pour obtenir celles de quantités dépourvues de termes source (variable de Zel'dovich [149]).

$$\left.\begin{aligned} Z_F &= (1+s)\,y_F + y_P \\ \frac{\partial \rho y_F}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_j}\left(\rho y_F u_j\right) &= \frac{\partial}{\partial x_j}\left(\rho D \frac{\partial y_F}{\partial x_j}\right) + \dot{\omega}_F \\ \frac{\partial \rho y_P}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_j}\left(\rho y_P u_j\right) &= \frac{\partial}{\partial x_j}\left(\rho D \frac{\partial y_P}{\partial x_j}\right) - (1+s)\dot{\omega}_F \end{aligned}\right\} \frac{\partial \rho Z_F}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_j}\left(\rho Z_F u_j\right) = \frac{\partial}{\partial x_j}\left(\rho D \frac{\partial Z_F}{\partial x_j}\right) \tag{3.6}$$

$$\left.\begin{aligned} &Z_O = (1+s)\,y_O + s y_P \\ &\frac{\partial \rho y_O}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_j}\left(\rho y_O u_j\right) = \frac{\partial}{\partial x_j}\left(\rho D \frac{\partial y_O}{\partial x_j}\right) + s\dot{\omega}_F \\ &\frac{\partial \rho y_P}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_j}\left(\rho y_P u_j\right) = \frac{\partial}{\partial x_j}\left(\rho D \frac{\partial y_P}{\partial x_j}\right) - (1+s)\dot{\omega}_F \end{aligned}\right\} \frac{\partial \rho Z_O}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_j}\left(\rho Z_O u_j\right) = \frac{\partial}{\partial x_j}\left(\rho D \frac{\partial Z_O}{\partial x_j}\right) \qquad (3.7)$$

$$\left.\begin{aligned} &Z_D = y_D \\ &\frac{\partial \rho y_D}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_j}\left(\rho y_D u_j\right) = \frac{\partial}{\partial x_j}\left(\rho D \frac{\partial y_D}{\partial x_j}\right) + 0 \end{aligned}\right\} \frac{\partial \rho Z_D}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_j}\left(\rho Z_D u_j\right) = \frac{\partial}{\partial x_j}\left(\rho D \frac{\partial Z_D}{\partial x_j}\right) \qquad (3.8)$$

Ces quantités non réactives (transportées sans terme source chimique) ont pour conditions limites :

	Entrée F (1)	Entrée O (2)	Entrée D (3)
Z_F	$Z_{F,1} = 1+s$	0	0
Z_O	0	$Z_{O,2} = 1+s$	0
Z_D	0	0	$Z_{D,3} = 1$

Tab.3.1 - Conditions limite des variables de Zeldovich

On peut alors reconstituer les fractions de mélange (aussi appelées traceurs associés au combustible, au comburant et au diluant injecté) en normalisant chacune des variables avec sa condition limite en entrée.

$$\beta_1 = \frac{Z_F}{Z_{F,1}} = y_F + \frac{1}{1+s} y_P \qquad (3.9)$$

$$\beta_2 = \frac{Z_O}{Z_{O,2}} = y_O + \frac{s}{1+s} y_P \qquad (3.10)$$

$$\beta_3 = \frac{Z_D}{Z_{D,3}} = y_D \qquad (3.11)$$

On remarque que sans création de produit ($y_P = 0$), les fractions de mélange seraient respectivement égales aux fractions massiques de combustible, de comburant, et de diluant. Les fractions de mélange définissent la fraction de masse injectée indépendamment de sa conversion ou non en produits de réaction. Sachant que la somme des fractions massique est égale à 1, on constate aisément que la somme des trois fractions de mélange est égale à 1.

$$\beta_1 + \beta_2 + \beta_3 = 1 \qquad (3.12)$$

d. Détermination de l'enthalpie massique du mélange

De manière analogue, on reconstitue l'enthalpie massique du mélange :

$$h = h_S + \sum_K y_K \ \Delta h^0_{f,K} \tag{3.13}$$

On montre facilement que ce scalaire est transporté sans terme source chimique.

$$\left\{ \begin{array}{l} h = h_S + \sum_k y_k \Delta h^0_{f,k} \\ \dfrac{\partial \rho y_K}{\partial t} + \dfrac{\partial}{\partial x_j}\left(\rho y_K u_j\right) = \dfrac{\partial}{\partial x_j}\left(\rho D \dfrac{\partial y_K}{\partial x_j}\right) + \dot{\omega}_K \\ \dfrac{\partial \rho h_S}{\partial t} + \dfrac{\partial}{\partial x_j}\left(\rho h_S u_j\right) = \dfrac{\partial}{\partial x_j}\left(\rho D \dfrac{\partial h_S}{\partial x_j}\right) - \sum_K \dot{\omega}_K \Delta h^0_{f,K} \end{array} \right\} \Leftrightarrow \frac{\partial \rho h}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_j}\left(\rho h u_j\right) = \frac{\partial}{\partial x_j}\left(\rho D \frac{\partial h}{\partial x_j}\right) \tag{3.14}$$

Et ses conditions limites sont fixées par

	Entrée F (1)	Entrée O (2)	Entrée D (3)
h	$h_{F,1}$	$h_{O,2}$	$h_{D,3}$

Tab.3.2 - Conditions limite pour l'enthalpie massique

L'enthalpie h et la combinaison linéaire $\beta_1 h_{F,1} + \beta_2 h_{F,2} + \beta_1 h_{F,3}$, possèdent les mêmes conditions limites et la même équation de transport. On peut alors déterminer l'enthalpie comme une fonction des fractions de mélange:

$$h = \beta_1 h_{F,1} + \beta_2 h_{O,2} + \beta_3 h_{D,3} \tag{3.15}$$

Dans les circonstances de transport adiabatique de l'énergie, cette égalité se comprend bien physiquement, avec la conservation de l'enthalpie totale du mélange indépendamment de l'avancement de la réaction. L'expression de l'enthalpie est donc formellement exacte pour n'importe quel degré d'avancement y compris pour l'avancement nul ($y_P = 0$). Ceci nous permet d'établir à nouveau l'équation 3.15.

e. Reconstitution des fractions massiques instantanées des espèces

On peut résoudre le transport des trois fractions de mélange ($\beta_1, \beta_2, \beta_3$) alors que le nombre de fractions massiques des espèces à déterminer est de quatre (y_F, y_O, y_P, y_D). Ce système sous-contraint n'est inversible qu'avec une hypothèse supplémentaire tenant compte de l'état d'avancement de la réaction. Effectivement, la formulation des fractions de mélange introduit l'état de mélange mais l'état d'avancement de la réaction reste un paramètre indéterminé du simple fait que l'on s'est abstenu de déterminer les termes source chimiques ($\dot{\omega}_K$).

Une hypothèse supplémentaire portant généralement sur la cinétique chimique est donc nécessaire afin de supprimer le degré de liberté surnuméraire et de résoudre le système. Les fractions massiques des espèces, se définissant à l'origine par des fonctions du temps et de l'espace, peuvent alors être exprimées en fonction des seules fractions de mélange. La résolution du problème se décompose alors en deux sous problèmes :

- Résolution des champs des fractions de mélange.
- Déduction de la composition du mélange, la température et la masse volumique.

Plusieurs propositions d'hypothèses peuvent être citées comme le cas « *frozen* chemistry » (ou figé), le cas de réaction infiniment rapide et totale (Burke et Schumann) ou le cas de réaction infiniment rapide à l'équilibre (relation de Gibbs). Nous étendrons quelques-unes des hypothèses dans le cadre du modèle à multi-fractions de mélange avant de développer l'hypothèse tenant compte des limites d'inflammabilité.

- **Hypothèse 1 : Chimie figée ou mélange sans réaction**

Ce cas représente la non-formation des produits, et on retrouve alors (Fig.3.1) :

$y_F = \beta_1$	$y_O = \beta_2$	$y_D = \beta_3 = 1 - \beta_1 - \beta_2$	$y_P = 0$

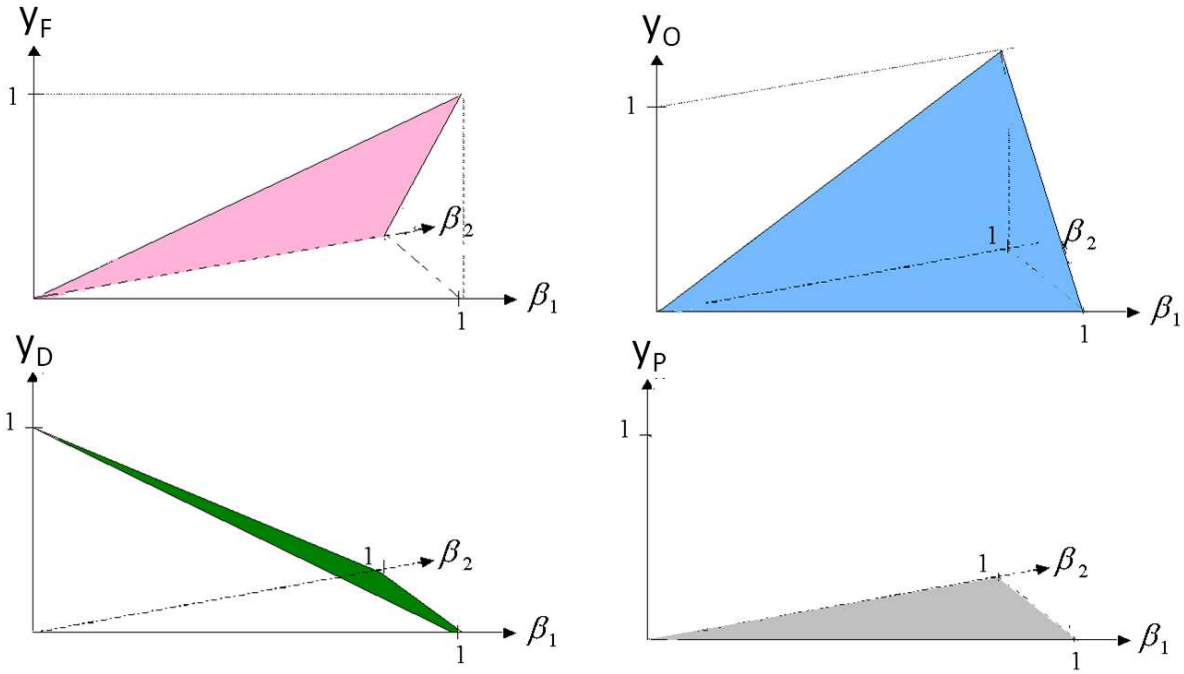


Fig.3.1 - Reconstitution des fractions massiques des espèces dans le cas de chimie figée

- **Hypothèse 2 : chimie infiniment rapide**

L'hypothèse forte suppose la non-coexistence des réactifs : $y_O y_F = 0$

Cas 1 : $y_O = 0$ (on parlera de mélange riche)

$$\beta_1 = y_F + \frac{1}{1+s} y_P$$

$$\beta_2 = y_O + \frac{s}{1+s} y_P = \frac{s}{1+s} y_P$$

$$\beta_3 = y_D$$

d'où

$y_P = \frac{s+1}{s}\beta_2$	$y_F = \beta_1 - \frac{\beta_2}{s}$	$y_O = 0$	$y_D = \beta_3 = 1 - \beta_1 - \beta_2$

Sachant que y_F est défini positif, il en vient que $\frac{\beta_1}{\beta_2} > \frac{1}{s}$ définit la région riche.

Cas 2 : $y_F = 0$ (on parlera de mélange pauvre)

$$\beta_1 = y_F + \frac{1}{1+s} y_P = \frac{1}{1+s} y_P$$
$$\beta_2 = y_O + \frac{s}{1+s} y_P \qquad (3.16)$$
$$\beta_3 = y_D$$

On obtient alors :

$y_P = (s+1)\beta_1$	$y_O = \beta_2 - s\beta_1$	$y_F = 0$	$y_D = \beta_3 = 1 - \beta_1 - \beta_2$

Sachant que y_O est toujours positif, il en vient que $\frac{\beta_1}{\beta_2} < \frac{1}{s}$ définit la région pauvre. Finalement, la figure 3.2 décrit bien l'extension de l'hypothèse de chimie infiniment rapide en milieu dilué.

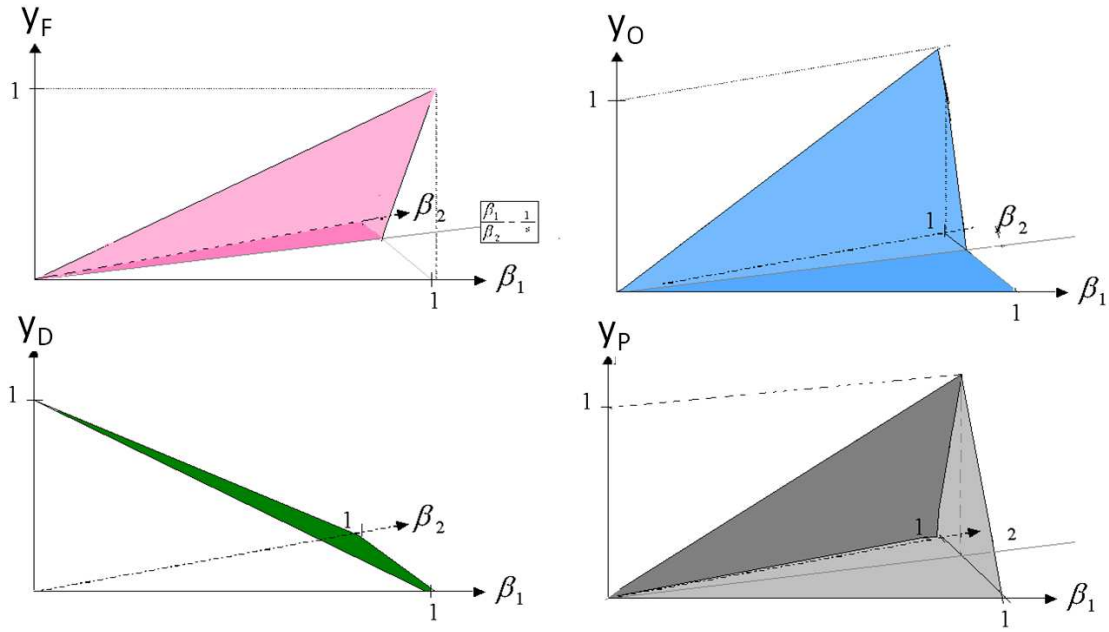


Fig.3.2 - Reconstitution des fractions massiques des espèces dans le cas de chimie infiniment rapide et totale

NB : Si on se place sur la droite de mélange à dilution nulle ($\beta_2 + \beta_1 = 1$), on retrouve bien les lois de reconstitution des espèces du modèle à fraction de mélange f en posant $\beta_1 = f$ et $\beta_2 = 1 - f$.

- **Chimie paramétrée par un avancement**

Le système étant sous contraint, nous introduisons une variable d'avancement tenant compte de la progression de la réaction valant zéro lorsque les réactifs n'ont pas réagi et valant l'unité quand l'ensemble du réactif limitant s'est transformé en produit.

Dans le cas où le réactif limitant est le combustible, β_1 est la fraction de mélange déficitaire et l'on définit alors l'avancement c :

$$c = \frac{y_P / (s+1)}{\beta_1} \tag{3.17}$$

Dans le cas où le réactif limitant est le comburant, β_2 est la fraction de mélange déficitaire et l'on définit alors l'avancement c :

$$c = \frac{s y_P / (s+1)}{\beta_2} = \frac{y_P / (s+1)}{\beta_2 / s} \tag{3.18}$$

Finalement, on donne l'avancement de la réaction :

$$c = \frac{y_P / (s+1)}{\min(\beta_1, \beta_2 / s)} \tag{3.19}$$

Dans ces circonstances, on peut résoudre le système d'équations et donner les fractions massiques des espèces sous la forme :

$$y_K = y_K(\beta_1, \beta_2, c) \tag{3.20}$$

On trouve les relations suivantes :

Mélange riche

$y_P = c\frac{s+1}{s}\beta_2$	$y_F = \beta_1 - \frac{c\beta_2}{s}$	$y_O = (1-c)\beta_2$	$y_D = \beta_3 = 1-\beta_1-\beta_2$

Mélange pauvre

$y_P = c(s+1)\beta_1$	$y_O = \beta_2 - sc\beta_1$	$y_F = (1-c)\beta_1$	$y_D = \beta_3 = 1-\beta_1-\beta_2$

NB1 : on remarque qu'avec c=0 et c=1 on retrouve les cas de non-réaction ou de réaction complète évoqués précédemment.

NB2 : on remarque que pour un avancement donné « c », les expressions des fractions massiques des espèces sont des combinaisons linéaires entre celles à avancement nul et celles à avancement unitaire.

$$y_k(\beta_1, \beta_2, c) = (1-c)\, y_k(\beta_1, \beta_2, 0) + c\, y_k(\beta_1, \beta_2, 1) \tag{3.21}$$

NB3 : l'avancement c étant une inconnue, on pourra résoudre complètement le système en paramétrant c comme une fonction des fractions de mélange - $c = c(\beta_1, \beta_2)$. Les hypothèses précédemment proposées peuvent toutes être décrites par une définition appropriée de la fonction $c_{\beta_1\beta_2} = c(\beta_1, \beta_2)$. Dans les différents développements, nous adopterons cette dernière notation.

Pour mieux comprendre l'influence de la fonction paramétrique « c » dans la reconstitution des espèces, on se propose de visualiser le diagramme de constitution à $c_{\beta_1\beta_2} = c_0$, (Fig.3.3).

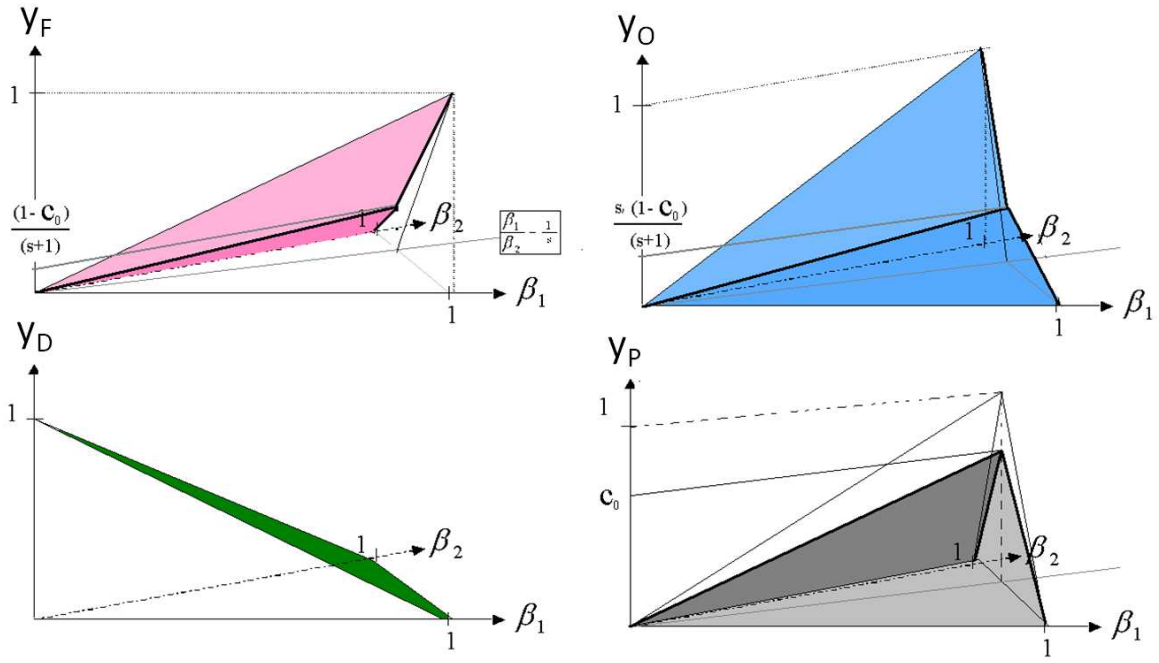


Fig.3.3 - Reconstitution des fractions massiques des espèces dans le cas d'une chimie paramétrée par un avancement constant

- **Modèle adopté tenant compte des limites d'inflammabilité : Le Modèle CLI (c - avancement à Limite d'Inflammabilité)**

Dans le diagramme (β_1,β_2), représenté dans la figure 3.4, on subdivise le domaine accessible en deux sous-ensembles : le domaine inflammable (I) et le domaine non inflammable (NI). La délimitation sera donnée par la courbe représentative de $F(\beta_1,\beta_2) = 0$. On envisagera une fermeture pour la fonction F, de la forme $F(\beta_1,\beta_2) = T(\beta_1,\beta_2,c=1) - T^{cross}$, associé à un critère de cross-over sur la température interdisant toute réaction formant des produits aux températures inférieures à une température critique T^{cross}, dépendant du combustible brûlé. Peters évalue la température critique à 1300 K pour les hydrocarbures dans des conditions normales de pression [110].

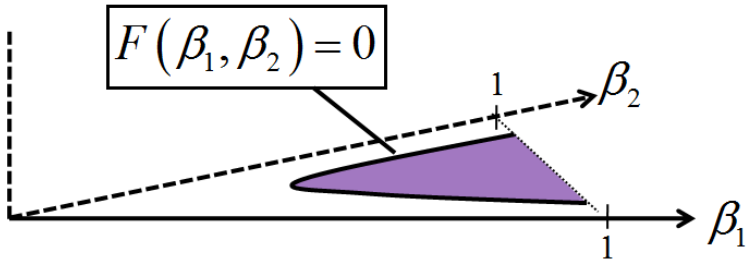


Fig.3.4 - Visualisation du domaine d'inflammabilité dans le diagramme des fractions de mélange

Pour tous les couples (β_1,β_2) à l'intérieur du domaine d'inflammabilité, on a une chimie infiniment rapide correspondant à $y_K(\beta_1,\beta_2,c_{\beta1\beta2} = 1)$. Pour tous les couples (β_1,β_2) à l'extérieur du domaine d'inflammabilité, il n'y a pas de réaction significative, ce qui correspond à $y_K(\beta_1,\beta_2,c_{\beta1\beta2} = 0)$.

f. Détermination de la température

Après la détermination des fractions massiques de chaque espèce, il devient possible de déterminer la température grâce à l'expression suivante liant la température et l'enthalpie:

$$h = \sum_K y_K h_K = \sum_K y_K \left(\int_{T^0}^{T} Cp_K(T)dT + \Delta h_K^0 \right) = \int_{T^0}^{T} \sum_K \left(y_K Cp_K(T) \right) dT + \sum_K y_K \Delta h_K^0 \quad (3.22)$$

L'expression linéaire 3.15 permet alors de déduire la relation entre la température et l'enthalpie :

$$h_{\beta_1\beta_2} - \sum_K y_K \left(\beta_1, \beta_2, c_{\beta_1\beta_2} \right) \Delta h_K^0 = \int_{T^0}^{T} \sum_K \left(y_K \left(\beta_1, \beta_2, c_{\beta_1\beta_2} \right) Cp_K(T) \right) dT = TAB_{\beta_1\beta_2}(T) \quad (3.23)$$

Pour des fractions massiques d'espèces connues, il est aussi possible de créer des lois enthalpie/température permettant d'obtenir la température en fonction de l'enthalpie :

$$T_{\beta_1\beta_2} = TAB_{\beta_1\beta_2}^{-1} \left(h_{\beta_1\beta_2} - \sum_K y_K \left(\beta_1, \beta_2, c_{\beta_1\beta_2} \right) \Delta h_K^0 \right) \quad (3.24)$$

Lorsque la capacité calorifique du mélange constante en fonction de la température :

$$Cp_{\beta_1\beta_2}(T) = \sum_K y_K \left(\beta_1, \beta_2, c_{\beta_1\beta_2} \right) Cp_K(T) = Cp_{\beta_1\beta_2} \quad (3.25)$$

L'expression de la loi $TAB_{\beta_1\beta_2}^{-1}$ se simplifie en :

$$T_{\beta_1\beta_2} = T_0 + \frac{h_{\beta_1\beta_2} - \sum_K y_K \left(\beta_1, \beta_2, c_{\beta_1\beta_2} \right) \Delta h_K^0}{Cp_{\beta_1\beta_2}} \quad (3.26)$$

Mais **pour** des variations de température rencontrées dans une flamme, la capacité moyenne du mélange n'est pas constante et nous retenons alors une dépendance enthalpie-température de nature polynomiale initialement linéarisée par morceau et utilisé par l'intermédiaire d'une table.

g. Détermination du volume massique

Pour déterminer la masse volumique, on se place sous l'hypothèse des gaz parfaits avec l'hypothèse d'une pression totale P est égale à la pression atmosphérique :

$$p_0 V = n_{\beta_1\beta_2} R T_{\beta_1\beta_2}$$

$n_{\beta_1\beta_2}$ représente ici le nombre total de moles contenues dans le volume considéré.

$$n_{\beta_1\beta_2} = \sum_K \frac{m_{K\beta_1\beta_2}}{W_K} = m \sum_K \frac{y_K \left(\beta_1, \beta_2, c_{\beta_1\beta_2} \right)}{W_K} = \frac{m}{W_{\beta_1\beta_2}} \quad (3.27)$$

En définissant la masse molaire du mélange :

$$\frac{1}{W_{\beta_1\beta_2}} = \sum_K \frac{y_K \left(\beta_1, \beta_2, c_{\beta_1\beta_2} \right)}{W_K} \quad (3.28)$$

Finalement on trouve :

$$\left(\frac{1}{\rho} \right)_{\beta_1\beta_2} = \frac{R T_{\beta_1\beta_2}}{W_{\beta_1\beta_2} p_0} \quad (3.29)$$

III.1.2. Modélisation d'une flamme de diffusion turbulente en milieu dilué

a. Définition des moyennes statistiques

Dans le but d'adapter ce formalisme à multi-fractions de mélange pour une flamme de diffusion turbulente, il est nécessaire d'introduire les moyennes statistiques.

Pour une grandeur ψ donnée, on définit la décomposition de Reynolds ($\psi = \overline{\psi} + \psi'$) avec $\overline{\psi}$ la moyenne de Reynolds ψ' et la fluctuation au sens de Reynolds centrée autour de la valeur moyenne.

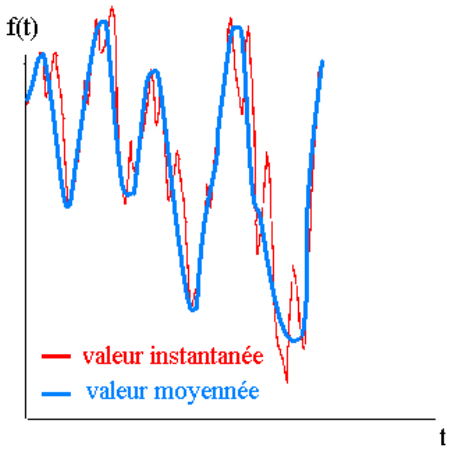


Fig.3.5 - Visualisation des évolutions de la fraction de mélange avec et sans la prise en compte des micro-fluctuations

Cependant pour les écoulements à masse volumique variable, il sera plus approprié de définir une moyenne pondérée par la masse volumique couramment appelée moyenne de Favre :

$$\tilde{\psi} = \frac{\overline{\rho\psi}}{\overline{\rho}} \tag{3.30}$$

La décomposition associée à cette moyenne ($\psi = \tilde{\psi} + \psi''$) fera intervenir la moyenne de Favre ($\tilde{\psi}$) et la valeur fluctuante au sens de Favre (ψ''). En pratique, la moyenne de Reynolds de l'équation de transport d'un scalaire massique fait apparaître sa moyenne de Favre et la masse volumique moyennée au sens de Reynolds. Il ne faut pas confondre ces deux opérateurs. Une relation importante existe cependant entre la moyenne de Reynolds de la masse volumique et la moyenne de Favre du volume massique (Eq 3.31) :

$$\left(\frac{1}{\rho}\right)^{\sim} = \frac{\overline{\left(\rho\frac{1}{\rho}\right)}}{\overline{\rho}} = \frac{1}{\overline{\rho}} \tag{3.31}$$

D'un point de vue statistique : Pour un nombre n de variables turbulentes, à un instant et une position donnés, chaque n-uplet $(\psi_1, \psi_2, ..., \psi_i, ..., \psi_n)$, possède une probabilité d'apparition qui dépend du n-uplet. On peut alors faire correspondre à ces lois de probabilité (au sens de Reynolds (PDF_R) ou au sens de Favre (PDF_F)), une fonction du n-uplet ($p_{(xi,t)}(\psi_1, \psi_2, ..., \psi_i, ..., \psi_n)$) (cf. chap.VI.2.b).

b. PDF présumée pour un modèle à multi-fractions de mélange

Nous considérerons maintenant que l'état de combustion dépend de plusieurs fractions de mélange. Il sera donc nécessaire de définir une PDF définissant les fluctuations de ces variables. On pose la probabilité d'apparition des fractions de mélange $p(\beta_1,\beta_2,\beta_3)$.

Il existe plusieurs formes possibles $p(\beta_1, \beta_2, \beta_3)$ pour présumer la PDF à variables comprises entre zéro et l'unité (Girimaji [46], Escaich [37]). De plus, la corrélation $\beta_1 + \beta_2 + \beta_3 = 1$ (variables non indépendantes) doit être respectée. Il est donc nécessaire d'annuler toute probabilité d'apparition ne respectant pas cette égalité.

$$P(\beta_1,\beta_2,\beta_3) = f(\beta_1,\beta_2,\beta_3)\ \delta\left(\beta_3, 1-\beta_1-\beta_2\right) \tag{3.32}$$

$$P(\beta_1,\beta_2,\beta_3) = p(\beta_1,\beta_2)\ \delta\left(\beta_3, 1-\beta_1-\beta_2\right) \tag{3.33}$$

La fonction nappe est définie par l'expression 3.34.

$$p(\beta_1,\beta_2) = f(\beta_1,\beta_2, 1-\beta_1-\beta_2) \tag{3.34}$$

Les paramètres sont alors fixés par la détermination de moments d'ordre plus ou moins élevés. Ces moments peuvent se déterminer par le transport de scalaire comme par exemple les valeurs moyennes, les variances et la covariance :

$\tilde{\beta}_1$ - $\tilde{\beta}_2$ - $\tilde{\beta}_1^{"2}$ - $\tilde{\beta}_2^{"2}$ - $\widetilde{\beta_1^{"}\beta_2^{"}}$

Le moment d'ordre zéro est connu et vaut l'unité :

$$\int p(\beta_1,\beta_2)d\beta_1 d\beta_2 = 1 \tag{3.35}$$

Les moments d'ordre 1 sont les deux moyennes :

$$\int \beta_1 p(\beta_1,\beta_2)d\beta_1 d\beta_2 = \tilde{\beta}_1 \tag{3.36}$$

$$\int \beta_2 p(\beta_1,\beta_2)d\beta_1 d\beta_2 = \tilde{\beta}_2 \tag{3.37}$$

Les moments d'ordre 2 sont liés aux deux variances et à la covariance :

$$\int \beta_1^2 p(\beta_1,\beta_2)d\beta_1 d\beta_2 = \left(\tilde{\beta}_1\right)^2 + \tilde{\beta}_1^{"2} \tag{3.38}$$

$$\int \beta_2^2 p(\beta_1,\beta_2)d\beta_1 d\beta_2 = \left(\tilde{\beta}_2\right)^2 + \tilde{\beta}_2^{"2} \tag{3.39}$$

$$\int \beta_1\beta_2 p(\beta_1,\beta_2)d\beta_1 d\beta_2 = \tilde{\beta}_1\tilde{\beta}_2 + \widetilde{\beta_1^{"}\beta_2^{"}} \tag{3.40}$$

Dans un contexte général, une PDF de deux variables $p(\beta_1, \beta_2)$ représentant un mélange entre trois flux d'entrée sera « correctement » représentée par la détermination de ses 5 premiers moments (les 2 moyennes, les 2 variances, la covariance de β_1 et de β_2). En ce qui concerne les moyennes et les variances de β_1 et de β_2, nous développerons, dans la partie 3, les équations de transport permettant de les déterminer. Moyennant des hypothèses de fermeture appropriées pour les flux turbulents et les flux interfaciaux, ces équations pourront prendre la forme suivante.

$$\frac{\partial}{\partial t}\left(\bar{\rho}\tilde{\psi}\right) + \frac{\partial}{\partial x_j}\left(\bar{\rho}\tilde{u}_j\tilde{\psi}\right) = \Gamma_{dif-turb} + \Gamma_{prod} + \Gamma_{diss} \tag{3.41}$$

En ce qui concerne la covariance, il est possible de la déterminer par transport mais dans le cadre d'un mélange à trois fractions de mélange, il est possible de la reconstituer en fonction des 3 variances de β_1, β_2 et de β_3. La reconstitution est simple et se définit par l'équation 3.42 :

$$\widetilde{\beta_1''\beta_2''} = \frac{\tilde{\beta}_3''^2 - \tilde{\beta}_1''^2 - \tilde{\beta}_2''^2}{2} \tag{3.42}$$

A partir des moments de la PDF, il est possible de déterminer certains facteurs pertinents comme par exemple les ségrégations (Eq.3.43) ou les facteurs de corrélation (Eq.3.44).

$$s_n^g = \frac{\tilde{\beta}_n''^2}{\tilde{\beta}_n(1-\tilde{\beta}_n)} \tag{3.43}$$

$$Cor_{nl} = \frac{\widetilde{\beta_n''\beta_l''}}{\sqrt{\tilde{\beta}_n''^2\tilde{\beta}_l''^2}} \tag{3.44}$$

Les ségrégations, comprises entre 0 et 1, représentent les variances adimensionnées par la variance maximale du scalaire. Les facteurs de corrélation, compris entre –1 et 1, représentent une certaine dépendance pour les probabilités d'apparition. Par exemple, si β_n et β_l sont préalablement intimement mélangés avant de rencontrer β_q, alors il existe une forte corrélation entre les proportions respectives des deux fractions de mélange. La corrélation Cor_{nl} vaut 1 et les corrélations Cor_{ql} et Cor_{qn} valent –1 dans ce cas.

En règle générale, la forme de la PDF recherchée doit respecter un certain nombre de critères :

- Elle doit représenter correctement le mélange
- Les paramètres de cette fonction doivent être facilement déterminés
- Elle doit être facile à intégrer (coût numérique)

Ainsi, le choix d'une forme présumée doit se faire suivant un compromis. Effectivement, plus nous cherchons à représenter correctement le mélange plus la fonction de densité de probabilité est une distribution complexe, difficile à déterminer et coûteuse pour l'intégration numérique.

Il existe souvent des simplifications liées à des hypothèses supplémentaires pour générer une forme de PDF simple dans le cadre de la configuration étudiée. Par exemple, Il est possible de formuler l'hypothèse d'équipartition de la ségrégation ; c'est à dire que les variances adimensionnées sont considérées comme égales (Girimaji [46]). Le type de PDF proposée est (Fig.3.6.a) :

$$p(\beta_1,\beta_2,\beta_3) = A\beta_1^{b_1-1}\beta_2^{b_2-1}\beta_3^{b_3-1}\delta(\beta_3,1-\beta_1-\beta_2) \tag{3.45}$$

L'évaluation des paramètres est donnée par les relations :

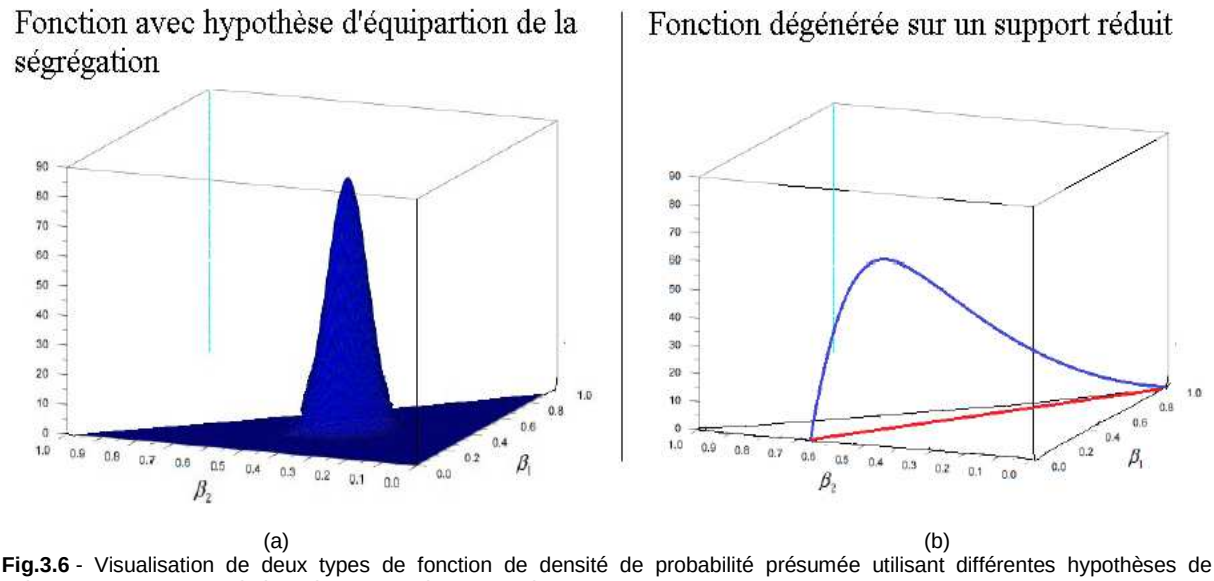
$$b_l = \tilde{\beta}_l\left(\frac{1-E_S}{E_Q}-1\right) \tag{3.46}$$

Sachant que E_Q est l'énergie totale turbulente et E_S la somme des carrés des fractions de mélange moyenne.

$$E_Q = \sum_{n=1}^{3}\tilde{\beta}_n''^2 \quad \text{et} \quad E_S = \sum_{n=1}^{3}\left(\tilde{\beta}_n\right)^2 \tag{3.47}$$

Cela suppose, que le mélange se fait partout de la même manière entre chacun des flux d'entrée et que les fractions de mélange possèdent chacune la même ségrégation.

Dans d'autres situations, on peut faire l'hypothèse de mélanges successifs entre les flux des différentes entrées. Ceci aura pour conséquence de dégénérer le support lui-même de la PDF (Fig.3.6.b) en une droite unique. La modélisation de la combustion de charbon pulvérisé (Escaich [37]) utilise ce genre d'hypothèse. Il est alors possible de se ramener à des fonctions ad hoc connues pour les PDF à une variable comme par exemple la fonction bêta ou la distribution rectangle et pics de Dirac (Cf. Chap.2.1 IV.2.b).



(a) (b)

Fig.3.6 - Visualisation de deux types de fonction de densité de probabilité présumée utilisant différentes hypothèses de mélange : a) PDF beta généralisée ; b) PDF à support réduit

En remarquant qu'aucune de ces formulations ne dégénère vers l'autre, il est nécessaire de choisir le type de PDF vers laquelle on s'orientera. Certaines configurations rencontrées (en contexte incendie) pourront être en dehors du domaine de validité des hypothèses caractéristiques de ces PDF présumées. Concernant la PDF bêta généralisée, outre le coût d'intégration important, cette forme ne semble adéquate que pour la description d'un mélange de traceurs ayant coexisté pendant une même durée. Si deux des fractions de mélange ont coexisté longtemps ensemble avant de rencontrer la troisième, les ségrégations seront fortement différentes (Fig.3.7) alors que la fonction bêta généralisée impose des ségrégations égales. Cette configuration est pourtant fréquemment rencontrée lors de l'évaporation des gouttes d'eau loin du foyer. Dans ce cas, l'air et la vapeur coexistent un temps relativement important avant de rencontrer le fuel.

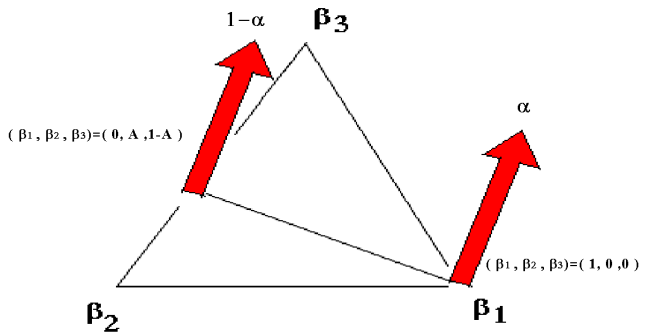


Fig.3.7 - Représentation d'un exemple de mélange avec un temps de coexistence air-vapeur important avant la rencontre avec le fuel

A contrario, la PDF à support réduit à une droite est plus apte à décrire les mélanges représentés par la figure 3.7 mais sa pertinence se dégrade fortement pour les situations ne découlant pas d'une longue coexistence air-vapeur. Ce genre de situation peut être rencontrée lorsqu'une goutte peut subsister jusqu'au front de flamme et s'évaporer en présence de carburant. Dans ce cas, la vapeur

produite n'a pas le temps de se mélanger préalablement avec l'oxygène rendant inappropriée la dégénérescence de la PDF en une droite.
N'ayant pas forcement les informations nécessaires (données expérimentales) pour estimer l'erreur commise en retenant l'une ou l'autre des formes de PDF présumées, nous avons recours à une approche numérique consistant à transporter chacune des fractions de mélange ainsi que leurs variances respectives. Cependant, la fonction densité de probabilité réelle résultant de divers phénomènes (transport, mélange, etc.), la forme de la PDF est fortement influencée par les détails de modélisation, en particulier pour le micro-mélange et pour la prise en compte d'effet de l'environnement sur l'évaporation (si les gouttes s'évaporaient préférentiellement proches des particules les plus chaudes ou les plus sèches par exemple). Dans ce contexte, les fermetures des termes source de création et de dissipation des variances se complexifient et dépendent des choix de forme de la PDF présumée. Par soucis de simplification, nous garderons les fermetures usuelles de création et de dissipation de la variance établies dans un mélange binaire sans oublier le terme de création par le processus d'évaporation (Escaich [37]). Dans ces circonstances, quel qu'il soit, le support choisi pour la PDF sera discutable mais l'interprétation des résultats obtenus donnera une première idée sur l'adéquation de la forme de PDF choisie. D'autre part, cela nous permettra d'évaluer la compatibilité des modèles de fermetures classiques (dissipation de la variance et estimation du flux d'évaporation n'incluant que les effets de la moyenne) avec la forme de PDF choisie.

Pour comprendre dans un premier temps, les effets d'un changement de phase sur la description du mélange gazeux, un cas élémentaire simplifié est proposé ici. On montre, dans ce cas, une incohérence entre les caractéristiques des formes de PDF présumées (précédemment proposées) avec le modèle de micro mélange classique lorsqu'une phase s'évapore dans un mélange ternaire (Fig.3.8). Cette étude préliminaire consiste à résoudre l'évaporation « contrôlée $\Gamma_1(t)$ » d'une fraction massique liquide dans un gaz homogène non réactif au repos où coexistent initialement les trois fractions de mélange. Par soucis de simplification, la masse volumique du mélange est ici considérée comme constante. Les équations à résoudre (Cf. III.2) se simplifient suivant le système suivant :

$$\frac{d\left(X_1\tilde{\beta}_1\right)}{dt}=0, \qquad \frac{d\left(X_1\tilde{\beta}_1^{"2}\right)}{dt}=-\frac{X_1\tilde{\beta}_1^{"2}}{\tau_t}+\frac{\Gamma_1}{\rho}\left(1-m_1^2\right)\left(\tilde{\beta}_{\Gamma 1}-\tilde{\beta}_1\right)^2$$

$$\frac{d\left(X_1\tilde{\beta}_2\right)}{dt}=0, \qquad \frac{d\left(X_1\tilde{\beta}_2^{"2}\right)}{dt}=-\frac{X_1\tilde{\beta}_2^{"2}}{\tau_t}+\frac{\Gamma_1}{\rho}\left(1-m_2^2\right)\left(\tilde{\beta}_{\Gamma 1}-\tilde{\beta}_1\right)^2$$

$$\frac{d\left(X_1\tilde{\beta}_3\right)}{dt}=\frac{\Gamma_1}{\rho} \qquad \frac{d\left(X_1\tilde{\beta}_3^{"2}\right)}{dt}=-\frac{X_1\tilde{\beta}_3^{"2}}{\tau_t}+\frac{\Gamma_1}{\rho}\left(1-m_3^2\right)\left(\tilde{\beta}_{\Gamma 1}-\tilde{\beta}_1\right)^2$$

$$\frac{d\left(X_2\right)}{dt}=-\frac{\Gamma_1}{\rho} \qquad X_1+X_2=1$$

Les termes sources seront justifiés dans le chapitre III.2.7, avec $\beta_{\Gamma 1} = 0$, $\beta_{\Gamma 2} = 0$ et $\beta_{\Gamma 3} = 1$. L'étude sera restreinte au cas d'évaporation rapide pour simplifier l'expression du paramètre m_n valant $S_{\beta n}$ dans ce cas.

Les conditions initiales proposent un mélange arbitraire respectant, à titre d'exemple, les valeurs suivantes :

$$X_1(t=0)=0.8 \qquad X_2(t=0)=0.2$$

$$\tilde{\beta}_1(t=0)=0.25 \qquad \tilde{\beta}_2(t=0)=0.55 \qquad \tilde{\beta}_3(t=0)=0.20$$

$$\tilde{\beta}_1^{"2}(t=0)=0.0825 \qquad \tilde{\beta}_2^{"2}(t=0)=0.0247 \qquad \tilde{\beta}_3^{"2}(t=0)=0.007$$

Ces valeurs ont été choisies pour respecter initialement les corrélations
$Cor_{12}=-1$, $Cor_{23}=1$ et $Cor_{31}=-1$.

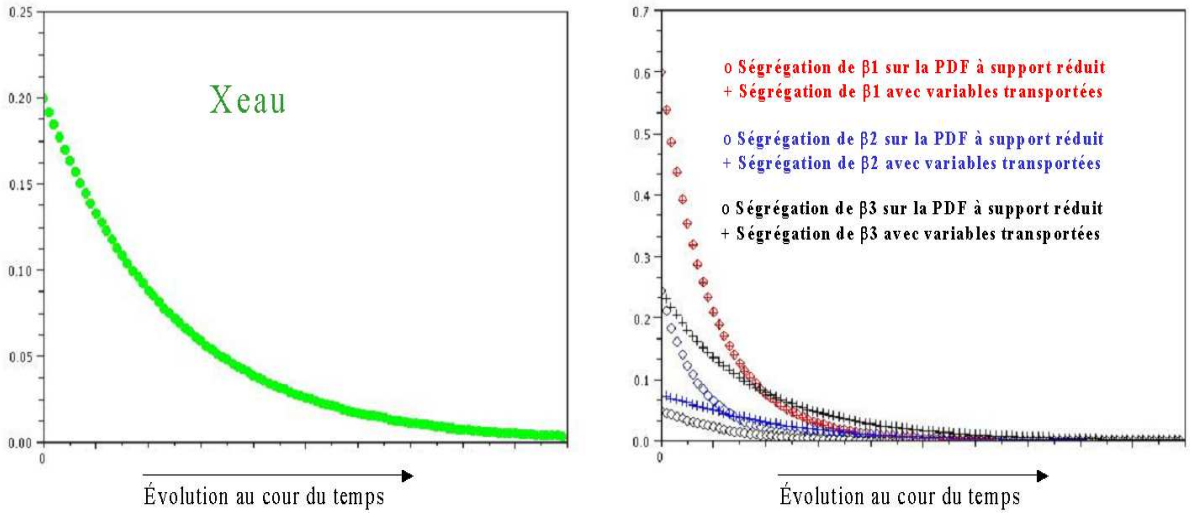


Fig.3.8 - Evolution des ségrégations des trois fractions de mélange dans le cadre d'une fraction massique d'eau s'évaporant près du front de flamme : estimation de l'erreur faite par la PDF à support réduit

Via le transport des variances de chaque fraction de mélange, il est par exemple possible de reconstituer les ségrégations associées à chaque scalaire. A partir d'une forme de PDF choisie, nous pouvons aussi évaluer ces ségrégations. Dans le cas d'un support de PDF dégénéré en une droite unique, la comparaison des ségrégations (Fig.3.8) « transportées » et « déduites » confirme l'incohérence du choix de ce support avec un modèle de micro mélange usuel pour cette configuration. Pour la PDF « bêta généralisé », les ségrégations déduites (toutes égales) ne sont pas plus en accord avec les variances transportées. En ce qui concerne les facteurs de corrélation, les différences sont aussi très notables avec néanmoins un comportement moins désavantageux pour la PDF « bêta généralisée ».

En conclusion, on montre que dans le cas de situation de gouttes d'eau persistant sous forme liquide jusqu'au front de flamme et s'évaporant en présence de comburant et de combustible, il est difficile de combiner une de ces distributions avec des fermetures usuelles pour le micro mélange.

Qu'en est-il sur des configurations plus réalistes d'extinction par brouillard d'eau au-dessus d'un foyer ? Pour répondre à cette question, un second cas test de simulation a fait l'objet d'une étude sur les corrélations. Le cas test simule un feu (injection d'un combustible au sol) au centre d'une pièce avec une double aspersion verticale descendante - injection d'un flux d'air chargé en goutte (% massique = 14% de gouttes) - et une aération horizontale au plafond pour évacuer les fumées (Fig.3.9).

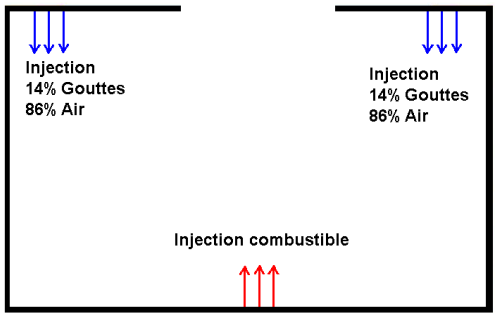


Fig.3.9 - Schématisation du cas test de simulation 2D

Le comportement de l'eau liquide s'évaporant progressivement en altérant les températures de la flamme (Fig.3.10), sera mieux étudié dans la partie IV.3. Dans un premier temps, le feu se développe sans avoir été atteint par le brouillard d'eau avec des niveaux de température élevés (environ 1900 K). Lorsque le brouillard atteint la flamme, il est rapidement entraîné par le panache de fumées et ne diminue que faiblement les températures. Cependant, les fumées chaudes qui s'étalent au plafond et

qui sont entraînées par les jets chargés en gouttes permettent l'évaporation anticipée des gouttes. L'apport d'air appauvri en oxygène (dilué par la vapeur d'eau) et refroidi altère la zone de combustion en provoquant le resserrement des limites d'inflammabilité : le niveau de température chute fortement (1000 K).

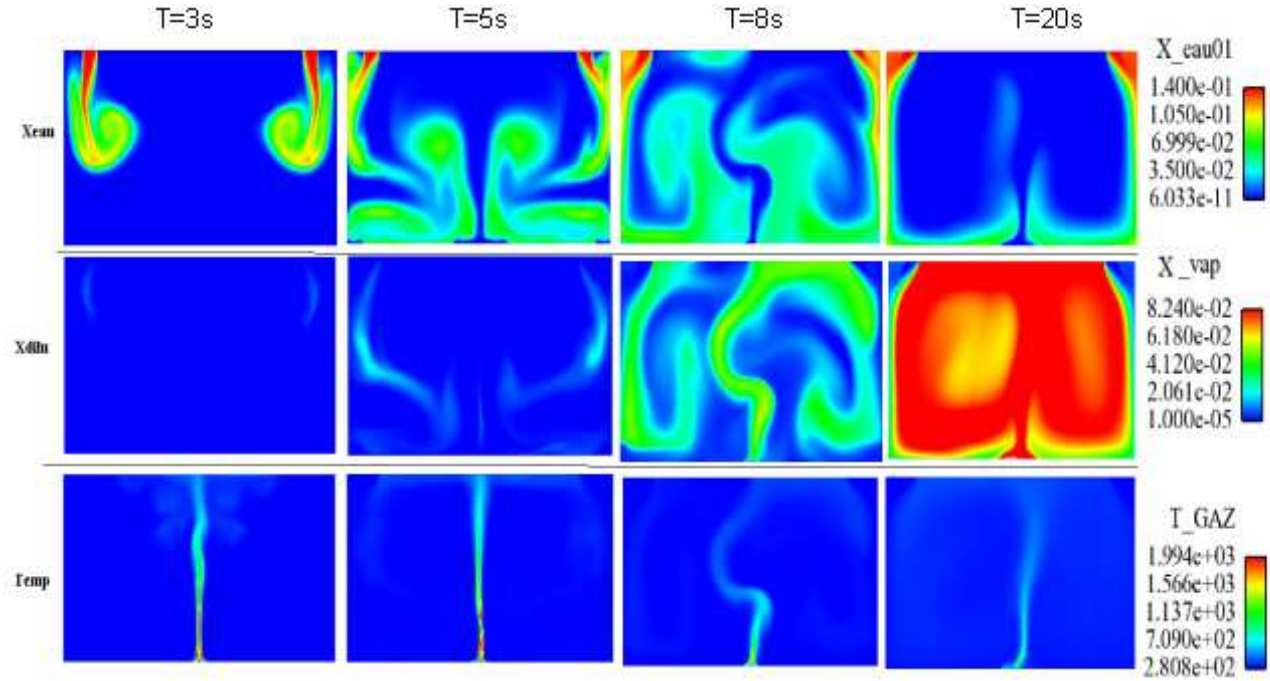


Fig.3.10 - Evolution au cours du temps des champs de fractions massique d'eau, de vapeur et de température

On remarque qu'à la base du foyer où le taux de production n'est pas négligeable (Fig.3.10) l'état de corrélation entre le fuel et la vapeur ainsi que celui entre le fuel et l'air se rapprochent fortement de –1. On remarque aussi que le facteur de corrélation entre la vapeur et l'air dans cette région est très proche de l'unité (Fig.3.11). Le modèle de PDF avec réduction du support sur une droite unique (qui impose des corrélations valant –1 entre le fuel et la vapeur ainsi qu'entre le fuel et l'air et un état de corrélation valant 1 entre l'air et la vapeur) apparaît donc cohérent avec les équations modélisées dans la zone de réaction.

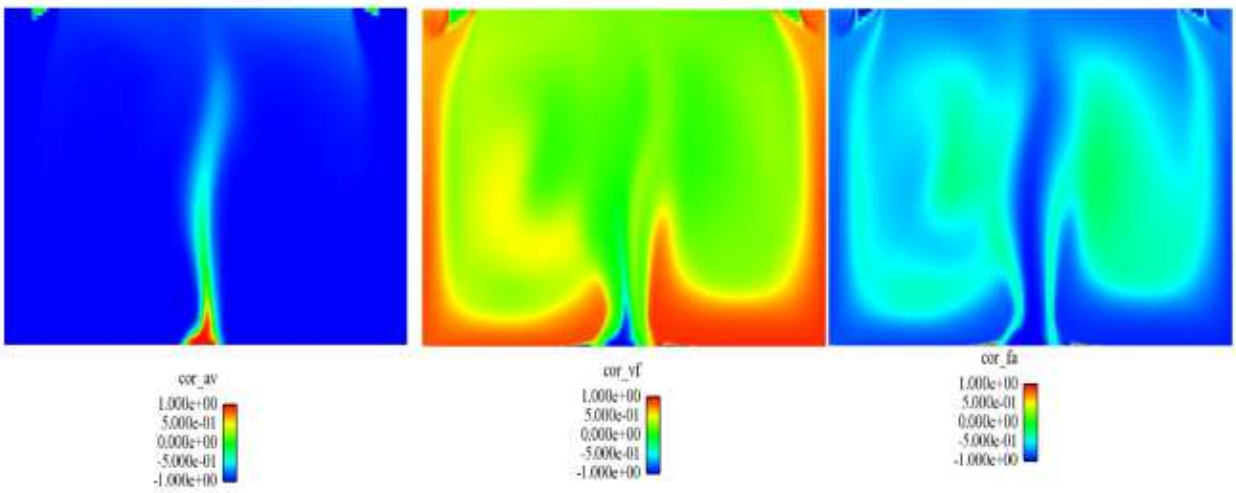


Fig.3.11 - Les champs des corrélations entre les trois couples de fractions de mélange

Finalement, chacune de ces PDF est valide sous certaines conditions et inadéquate dans d'autres cas. Il est vrai que la forme de PDF à support réduit à une droite peut, en première approximation, être retenue dans le cadre de l'étude d'un brouillard d'eau pulvérisé dans de l'air frais loin de la zone de combustion.

Nous proposons dans un premier temps d'établir un modèle général avec une forme quelconque pour la PDF. Dans un second temps, nous proposerons une simplification liée à l'utilisation de la forme de PDF à support réduit (Fig.3.6.b) suggérée par le contexte de la problématique. Il faut noter cependant que le choix de la PDF n'est pas corrélé au modèle établi. Il sera tout de même indispensable de proposer un modèle de micro-mélange en adéquation avec la forme de la PDF choisie.

c. Utilisation des lois instantanées CLI pour déterminer les champs moyens

Nous nous intéresserons ici à la reconstitution des fractions massiques dans le cadre du modèle CLI. Effectivement, l'objectif étant de mettre en évidence les conséquences de la prise en compte des limites d'inflammabilité dans le développement d'une flamme turbulente, nous nous intéresserons d'avantage au modèle CLI. Dans la mesure où il est possible de reconstituer la fonction de densité de probabilité au sens de Favre $p(\beta_1, \beta_2)$, il est possible de connaître les valeurs moyennes des fractions massiques des espèces en intégrant les lois de reconstitution instantanée des espèces.

$$\tilde{y}_K = \int y_K\left(\beta_1, \beta_2, c_{\beta_1\beta_2}\right) p\left(\beta_1, \beta_2\right) d\beta_1 d\beta_2 \qquad (3.48)$$

d. Un schéma ne respectant pas un avancement global croissant

Le modèle CLI, représentant le domaine inflammable, a cependant, le défaut de ne pas respecter l'irréversibilité souhaitée de l'avancement. Ceci s'observe autant avec l'approche instantanée qu'avec l'approche turbulente.

Dans le cas sans turbulence, avec des proportions variables de réactifs introduits, on peut respecter ou non des proportions inflammables au cours du temps. Franchir la frontière d'inflammabilité pour passer du domaine non inflammable au domaine inflammable ne pose en l'occurrence aucun problème pour la loi d'évolution monotone croissante de l'avancement. Par contre, le cas inverse où l'on passe d'un mélange inflammable à un mélange non inflammable est lui contradictoire avec la loi d'évolution de formation des produits. Par exemple, la dilution des fumées par un fort excès d'air ne doit pas entraîner la décomposition des produits pour reformer du combustible. Dans un cadre général, quelle que soit la loi $c_{\beta_1\beta_2}$ présumée (et non déterminée), on aboutira au même problème de réversibilité.

De manière analogue, on va rencontrer le même problème pour un modèle CLI en turbulence. Par soucis de compréhension, on considère ici un mélange non dilué pour lequel les simplifications suivantes (Cf. Chap. 1.5) s'appliquent :

$$\beta_{1S} = \beta_{1S0} = \frac{1}{1+s} \qquad (3.49)$$

$$y_P\left(\beta_1, c_{\beta_1}\right) = \begin{cases} c_{\beta_1}\dfrac{s+1}{s}\left(1-\beta_1\right) & \text{si} \quad \beta_1 > \beta_{1S} \\ c_{\beta_1}\left(s+1\right)\beta_1 & \text{si} \quad \beta_1 < \beta_{1S} \end{cases} \qquad (3.50)$$

$$c_{\beta_1} = \begin{cases} 1 & \text{si} \quad \beta_1 \in \left[0-\beta_{1LI}\right] \cup \left[\beta_{1LS}-1\right] \\ 0 & \text{si} \quad \beta_1 \in \left[\beta_{1LI}-\beta_{1LS}\right] \end{cases}$$

Les limites d'inflammabilité β_{1LI} et β_{1LS} seront posées arbitrairement autour de la fraction de mélange stœchiométrique β_{1S}.
De plus, la relation $\beta_1 + \beta_2 = 1$ introduit des contraintes supplémentaires pour la PDF

$$p(\beta_1, \beta_2) = \delta(1 - \beta_2, \beta_1) p(\beta_1) \tag{3.51}$$

On considère alors $p(\beta_1)$ la distribution pics et rectangle (Eq.1.13) que l'on détermine à partir de la moyenne et de la variance de β_1 uniquement.

Finalement on obtient :

$$\tilde{y}_K = \int y_K \left(\beta_1, c_{\beta_1}\right) p\left(\beta_1\right) d\beta_1 \tag{3.52}$$

On se place dans un volume donné sans mouvement de convection moyen mais avec un taux de turbulence non nul. On se place avec une fraction de mélange moyenne constante. Dans ces circonstances, seule la variance du volume considéré évolue (en diminuant de sa valeur maximale jusqu'à zéro) au cours du temps par le biais des termes sources de dissipation de la variance associés au processus de diffusion moléculaire.

On compare l'évolution de la production des produits moyens en fonction de la variance dans le cas d'une chimie complète (c=1, courbe rouge) et dans le cas du modèle CLI (courbe verte).

Deux cas sont étudiés:

- introduction des réactifs dans des proportions inflammables, (Fig.3.12.a).
- introduction des réactifs dans des proportions non inflammables, (Fig.3.12.b).

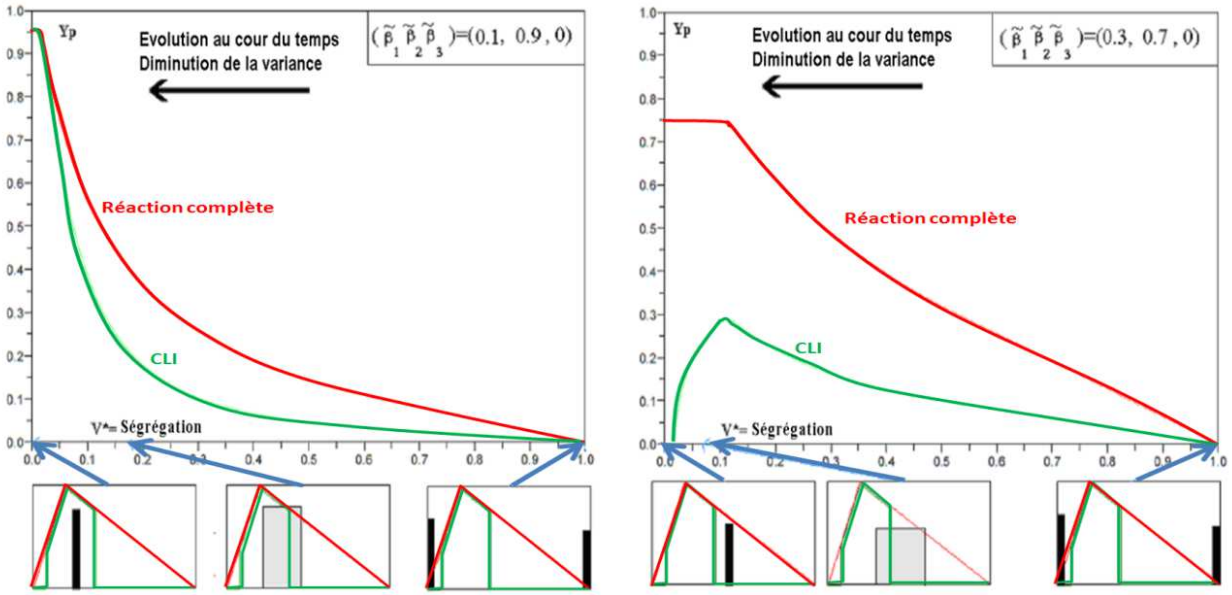


Fig.3.12 - Visualisation de l'évolution des produits moyens lors du mélange intime en prenant ou pas en compte les limites d'inflammabilité lorsque le mélange est introduit dans des proportions inflammables (a) ou non inflammables (b)

Le mélange moyen inflammable est décrit par une PDF dont le support franchit progressivement le domaine d'inflammabilité : la fraction du support incluse dans ce domaine est strictement monotone croissante. Par rapport au cas usuel sans introduction des limites d'inflammabilité, la réaction est certes retardée mais l'avancement global se fait toujours de manière croissante pour atteindre sa valeur maximum valant l'unité.

Le mélange en moyenne ininflammable est décrit par une PDF qui franchit elle-aussi temporairement le domaine d'inflammabilité : la fraction du support incluse dans ce domaine croît puis décroît. Dans ce cas, l'évolution du mélange passe successivement de probabilités d'inflammabilité non nulles à des probabilités d'inflammabilité nulles. La loi de reconstitution des espèces ne tient pas compte des produits antérieurement formés avec l'évolution d'une PDF passant d'un état de ségrégation maximale [Dirac en (β_1,β_2) = (0,1) et en (β_1,β_2) = (1,0)] à un état de mélange intime [Dirac en $(\beta_1,\beta_2)=(\tilde{\beta}_1,\tilde{\beta}_2)$].

Au final, on peut observer la fraction massique globale des produits augmentant puis diminuant, ce qui n'est absolument pas consistant avec une évolution irréversible de la réaction. En conclusion, la loi de reconstitution des espèces doit tenir compte de l'évolution du mélange gazeux. Ce qui n'est pas le cas avec les lois de reconstitution liées au modèle CLI pour le moment. Ce que nous chercherons à faire consistera à introduire un modèle CLI irréversible que l'on nommera par la suite CLI_{irr}.

e. Mise en place du modèle irréversible CLI_{irr}

La solution retenue pour traduire l'hystérésis du phénomène consiste à proposer une équation de transport pour la fraction moyenne de produits qui introduit une fermeture du terme de production en fonction de la fraction massique de produit prédite donnée par le modèle CLI (Eq.3.53) :

$$\tilde{y}_P^{pred}=\int y_P\left(\beta_1,\beta_2,c_{\beta_1\beta_2}\right)p\left(\beta_1,\beta_2\right)d\beta_1 d\beta_2$$
$$\begin{cases} c_{\beta_1\beta_2}=0 \Leftrightarrow (\beta_1,\beta_2)\in NI \\ c_{\beta_1\beta_2}=1 \Leftrightarrow (\beta_1,\beta_2)\in I \end{cases} \quad (3.53)$$

Dans le cas où la fraction massique moyenne des produits est inférieure à cette prédiction, le terme source doit faire évoluer la fraction massique vers sa valeur prédite, Dans le cas contraire où la fraction massique moyenne des produits est supérieure à cette prédiction, le terme source doit être nul.

$$\frac{\partial\overline{\rho}\tilde{y}_P}{\partial t}+\frac{\partial}{\partial x_j}\left(\overline{\rho}\,\tilde{y}_P\tilde{u}_j+\overline{\rho}\widetilde{y_P''u_j''}\right)=-\frac{\partial}{\partial x_j}\left(\rho D\frac{\partial}{\partial x_j}\left(\tilde{y}_P\right)\right)+\overline{\dot{\omega}_P} \quad (3.54)$$

- Si la fraction massique des produits est inférieure à la prédiction, on propose l'expression d'un terme source permettant de faire tendre $\tilde{y}_P$ vers $\tilde{y}_P^{pred}$ via un temps de relaxation τ_r .

$$\overline{\dot{\omega}_P}=\frac{\overline{\rho}}{\tau_r}\left(\tilde{y}_P^{pred}-\tilde{y}_P\right) \quad (3.55)$$

- Si la fraction massique des produits y est supérieure, on annulera le terme source $\overline{\dot{\omega}_P}=0$

On obtient finalement l'expression du terme source de production des produits moyens :

$$\overline{\dot{\omega}_P}=\frac{\overline{\rho}}{\tau_r}\min\left(\left(\tilde{y}_P^{pred}-\tilde{y}_P\right),0\right) \quad (3.56)$$

Pour évaluer le comportement du modèle CLI_{irr}, il est possible de reprendre l'exemple précédent. Dans le cas sans dilution avec des proportions initiales ne respectant pas les limites d'inflammabilité ($\tilde{\beta}_1=cst<\beta_{LI}$), les critères d'évolution du mélange seront arbitrairement donnés par la loi de dissipation de la variance au cours du temps :

$$\tilde{\beta}_1^{n2} = \tilde{\beta}_1\left(1-\tilde{\beta}_1\right)\frac{t_{\max}-t}{t_{\max}} \qquad ; \qquad (t_{\max}=1) \tag{3.57}$$

On trouve alors une équation différentielle à résoudre :

$$\frac{d\tilde{y}_P}{dt} = \Gamma_{Y_P} = \frac{1}{\tau_r}\left(\tilde{y}_P^{pred} - \tilde{y}_P\right) \text{ tant que } \tilde{y}_P < \tilde{y}_{Ppred} \text{ et } \frac{d\tilde{y}_P}{dt} = 0 \text{ sinon.} \tag{3.58}$$

La solution vaut :

$$\tilde{y}_P(t) = \left(\int_0^t \frac{e^{t'/\tau_r}}{\tau_r}\tilde{y}_P^{pred}(t')dt'\right)e^{-t'/\tau_r} \text{ tant que } \tilde{y}_P < \tilde{y}_P^{pred}$$

$\tilde{y}_P(t) = cst$ ensuite.

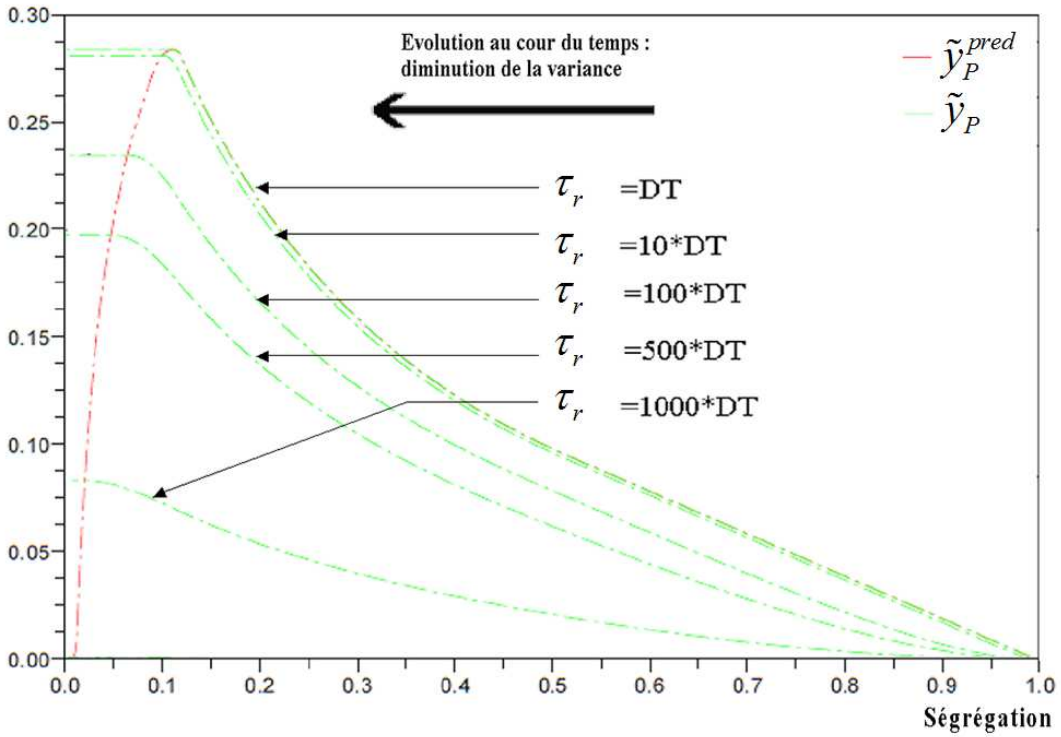


Fig.3.13 - Visualisation de la formation irréversible des produits moyens dans le cas du modèle CLIirr

Pour un temps τ_r comparativement petit par rapport aux autres temps caractéristiques, on retrouve une formation de produits égale à la formation prédite tant que celle-ci croît lors du micro-mélange et se stabilisant à sa valeur maximale si la prédiction de la fraction massique par la loi CLI diminue (Fig.3.13). Cette évolution est bien irréversible et tient compte de l'histoire de la particule. Elle correspond à l'évolution infiniment rapide de la fraction massique des produits vers la valeur prédite si cette prédiction est supérieure aux produits déjà existants.

NB : Les temps caractéristiques τ_r plus grands s'accompagnent d'un retard dans l'évolution des produits jusqu'à la valeur prédite, ce retard pourrait être utilisé pour modéliser une chimie finie à l'intérieur du domaine d'inflammabilité. Dans le cadre de notre étude, nous maintiendrons l'hypothèse d'un temps caractéristique τ_r très petit.

f. Reconstitution des fractions massiques moyennes des espèces

Une fois la fraction massique des produits connus, il est possible de « moyenner » les formulations des fractions de mélange pour déterminer les autres fractions massiques moyennes en passant outre l'explicitation des lois de reconstitution des espèces s'adaptant avec le nouveau modèle :

$$\begin{cases} \tilde{\beta}_1 = \tilde{y}_F + \dfrac{1}{1+s}\tilde{y}_P \\ \tilde{\beta}_2 = \tilde{y}_O + \dfrac{s}{1+s}\tilde{y}_P \\ \tilde{\beta}_3 = \tilde{y}_D \end{cases} \quad \begin{cases} \tilde{y}_F = \tilde{\beta}_1 - \dfrac{1}{1+s}\tilde{y}_P \\ \tilde{y}_O = \tilde{\beta}_2 - \dfrac{s}{1+s}\tilde{y}_P \\ \tilde{y}_D = \tilde{\beta}_3 \end{cases} \tag{3.59}$$

Cependant, la température et le volume massique ne sont pas des expressions linéaires des fractions de mélange et le calcul de leurs moyennes respectives nécessite la connaissance explicite des lois de reconstitution des espèces pour pouvoir intégrer correctement leurs expressions.

Transporter la fraction massique des produits est une façon de connaître l'avancement moyen dépendant de la loi d'avancement $c_{\beta_1\beta_2}$. Nous cherchons à définir une loi d'avancement $c_{\beta_1\beta_2}$ en accord avec l'avancement moyen. L'hypothèse de chimie infiniment rapide à l'intérieur du domaine d'inflammabilité s'accompagne d'un avancement unitaire dans cette région : $c((\beta_1\beta_2) \in I) = 1$. Par contre, la loi d'avancement à l'extérieur des limites d'inflammabilité $c((\beta_1\beta_2) \in NI)$ n'est pas déterminable avec l'unique contrainte qu'impose la détermination de l'avancement moyen. On fera donc l'hypothèse supplémentaire que l'excès des produits estimés se répartit équitablement dans les régions non-inflammables.

$$c((\beta_1,\beta_2) \in NI) = cst = \alpha \tag{3.60}$$

Pour déterminer la valeur de α , on procède tel quel :

$$\tilde{y}_K = \int_{NI} y_K(\beta_1,\beta_2,\alpha)\, p(\beta_1,\beta_2)\, d\beta_1 d\beta_2 + \int_I y_K(\beta_1,\beta_2,1)\, p(\beta_1,\beta_2)\, d\beta_1 d\beta_2$$

$$\begin{aligned} \tilde{y}_K = {} & \int_{NI} \left(\alpha\, y_K(\beta_1,\beta_2,1) + (1-\alpha)\, y_K(\beta_1,\beta_2,0)\right) p(\beta_1,\beta_2)\, d\beta_1 d\beta_2 \\ & + \int_I \left(\alpha\, y_K(\beta_1,\beta_2,1) + (1-\alpha)\, y_K(\beta_1,\beta_2,1)\right) p(\beta_1,\beta_2)\, d\beta_1 d\beta_2 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \tilde{y}_K = {} & \alpha\left(\int_{NI} y_K(\beta_1,\beta_2,1)\, p(\beta_1,\beta_2)\, d\beta_1 d\beta_2 + \int_I y_K(\beta_1,\beta_2,1)\, p(\beta_1,\beta_2)\, d\beta_1\beta_2\right) \\ & + (1-\alpha)\left(\int_{NI} y_K(\beta_1,\beta_2,0)\, p(\beta_1,\beta_2)\, d\beta_1\beta_2 + \int_I y_K(\beta_1,\beta_2,1)\, p(\beta_1,\beta_2)\, d\beta_1 d\beta_2\right) \end{aligned}$$

$$\tilde{y}_K = \alpha \tilde{y}_{K(c=1)} + (1-\alpha)\, \tilde{y}_K^{pred}$$

Finalement, on obtient l'expression de α :

$$\alpha = \frac{\tilde{y}_K - \tilde{y}_K^{pred}}{\tilde{y}_{K(c=1)} - \tilde{y}_K^{pred}} = \frac{\tilde{y}_P - \tilde{y}_P^{pred}}{\tilde{y}_{P(c=1)} - \tilde{y}_P^{pred}} \tag{3.61}$$

Une fois α connu, on retrouve toutes les lois de reconstitution des fractions massiques moyennes des espèces.

$$y_K = y_K\left(\beta_1, \beta_2, c_{\beta_1\beta_2}\right) \tag{3.62}$$

$$c_{\beta_1\beta_2} = \begin{cases} \alpha \Leftrightarrow (\beta_1, \beta_2) \in NI \\ 1 \Leftrightarrow (\beta_1, \beta_2) \in I \end{cases}$$

g. Détermination de la température et du volume massique

Certaines simplifications proposent une capacité calorifique du mélange ne dépendant pas de sa composition, ni de la température. De plus, si on considère le transport d'énergie adiabatique, la température instantanée sera une combinaison linéaire des fractions de mélange et des fractions massiques.

$$T_{\beta_1\beta_2} = T_0 + \frac{\left(\beta_1 h_F^0 + \beta_2 h_O^0 + (1-\beta_1-\beta_2) h_D^0\right) - \sum_K y_K\left(\beta_1, \beta_2, c_{\beta_1\beta_2}\right) \Delta h_K^0}{C_p} \tag{3.63}$$

La valeur moyenne peut alors être déduite des fractions de mélange moyennes et des fractions massiques moyennes sans connaissance explicite des lois de reconstruction du modèle :

$$\tilde{T} = T_0 + \frac{\left(\tilde{\beta}_1 h_F^0 + \tilde{\beta}_2 h_O^0 + \left(1-\tilde{\beta}_1-\tilde{\beta}_2\right) h_D^0\right) - \sum_K \tilde{y}_K \Delta h_K^0}{C_p} \tag{3.64}$$

Cependant cette formulation n'est exacte que sous l'ensemble des hypothèses cité précédemment. Dans le cadre général, il n'est pas possible de considérer la température instantanée comme combinaison linéaire des fractions de mélange. Il sera donc nécessaire de connaître la température instantanée $T_{\beta1\beta2}$ déterminée à partir des lois de reconstitution des espèces $y_K(\beta_1,\beta_2,c_{\beta1\beta2})$ et de l'enthalpie $h_{\beta1\beta2}$ afin de moyenner cette expression.

NB : Dans le cas adiabatique, la loi $h_{\beta1\beta2}$ est connue (Eq.3.15). Par contre, lorsque le transport de l'énergie fait intervenir des termes source (tel l'effet du rayonnement ou les échanges entre les phases), il n'est plus possible de reconstituer $h_{\beta1\beta2}$. Par conséquent, à partir de l'équation de transport de l'énergie moyenne ($\tilde{h}(x,t)$) et, ceci constituera une hypothèse supplémentaire, la répartition de l'énergie, on reconstruit la loi $h_{\beta1\beta2}$.

La température moyenne se détermine à partir de l'intégration suivante :

$$\tilde{T} = \int T_{\beta_1\beta_2}\, p(\beta_1, \beta_2) d\beta_1 d\beta_2 \qquad (3.65)$$

Une fois la loi de température déterminée $T_{\beta1\beta2}$, on peut reconstituer l'expression du volume massique (Eq.3.29) et l'intégrer pour déterminer sa moyenne (au sens de Favre mais qui correspond à l'inverse de la moyenne de Reynolds de la masse volumique) :

$$\left(\frac{\tilde{1}}{\rho}\right) = \frac{1}{\overline{\rho}} = \int \frac{1}{\rho_{\beta_1\beta_2}}\, p(\beta_1, \beta_2)\, d\beta_1 d\beta_2 \qquad (3.66)$$

III.1.3. Dégénérescence du modèle le support réduit de la PDF

a. Position de l'étude dans un souci de simplification lié aux incendies

Dans les configurations d'extinction par brouillard d'eau, il est légitime de supposer que la majeure partie de la vapeur créée lors de l'évaporation des gouttelettes se mélange d'abord avec l'oxydant avant de rencontrer le combustible. Ceci nous conforte dans notre choix quant à l'utilisation de la PDF à support réduit moyennant l'hypothèse de deux étapes successives de mélange (entre le diluant et l'oxydant dans un premier temps, puis entre l'oxydant dilué et le combustible). Effectivement, la plus grande partie des gouttelettes s'évaporent loin de la zone de combustion ce qui permet à la vapeur d'eau de se mélanger intimement avec l'air ambiant avant de rencontrer la zone de combustion. Sans tenir compte des gouttelettes capables de traverser la zone de réaction, cette approche nous permettra d'étudier le refroidissement et l'extinction par dilution du comburant uniquement.

Cependant, il est important de vérifier le bon comportement de cette PDF pour décrire le mélange moyen (composition, masse volumique, température). Dans un premier temps, il est nécessaire d'évaluer le comportement de cette PDF dans la zone où le combustible n'intervient pas. Proche de la zone d'injection du spray, la fraction de mélange liée au combustible est négligeable. Ceci induit un mélange pur non réactionnel entre l'air et la vapeur (β_2 + β_3 = 1). Les espèces, se reconstituent ici linéairement en fonction de la fraction de mélange β_2 (respectivement β_3). En remarquant que les effets liés aux différentes masses molaires et capacités thermiques ne sont pas significatifs dans les milieux non réactifs, il est aussi possible de considérer le volume massique ainsi que la température comme des fonctions quasi linéaires de β_2 (respectivement β_3). Dans ce cas, la masse volumique moyenne, et la température moyenne du gaz seront correctement décrites par cette PDF qui dégénère ici en un pic de Dirac au point de mélange moyen (sans combustible).

Lors d'une aspersion de gouttes loin du foyer, la zone de mélange avec le combustible est bien représenté par cette PDF dans la mesure où les gouttes ne pénètrent pas trop près du front de flamme (Cf. II.1.2.b). En effet, lorsque le fuel pur rencontre l'arrivée d'air chargé en vapeur, l'eau liquide est quasiment inexistante et le mélange intime entre l'air et la vapeur a eu le temps de s'opérer. Cette PDF décrira correctement l'état du mélange dans cette partie du domaine.

Lorsque les fumées sont ré-entraînées vers les injecteurs, il est possible de constater l'évaporation de gouttes dans des gaz brûlés. Dans cette zone, le mélange des trois fractions de mélange ne correspond pas forcement à la forme de la PDF mais c'est alors la réaction qui ne s'y déroule plus (combustion terminée ou mélange froid et dilué).

b. Simplification des lois de reconstitution des fractions massiques

Le mélange préalable des deux espèces nous conduit à proposer une corrélation entre les fractions massiques du diluant et du comburant lors de la combustion. On supposera donc que la proportion de diluant dans le mélange diluant-comburant n'est pas une valeur fluctuante mais reste toujours égale à la proportion qui serait obtenue pour un taux de ségrégation nul.

$$\frac{\beta_3}{\beta_3+\beta_2}=\frac{\tilde{\beta}_3}{\tilde{\beta}_3+\tilde{\beta}_2}=X \tag{3.67}$$

Ceci revient à négliger toute probabilité d'apparition en dehors des couples (β_1,β_2) associés à la droite de mélange :

$$\beta_2=(1-X)(1-\beta_1) \tag{3.68}$$

$$p(\beta_1,\beta_2,\beta_3)=\delta(\beta_3,1-\beta_1-\beta_2)p(\beta_1,\beta_2)=\delta(\beta_3,1-\beta_1-\beta_2)\delta(\beta_2,(1-X)(1-\beta_1))p(\beta_1) \tag{3.69}$$

Cette simplification est considérable et facilite grandement la détermination de la fonction de probabilité. La seule inconnue qui subsiste est la fonction de probabilité $p(\beta_1)$ à variable unique. Une détermination correcte de cette fonction de probabilité peut être envisagée par des fonctions « monomodale » telle que la fonction bêta (Eq.1.4) ou la distribution Rectangle Dirac (Eq.1.13) par exemple facilement déterminé en fonction de la moyenne et la variance de β_1.

c. Utilisation des lois instantanées CLI pour déterminer les champs moyens

Schématiquement, cette simplification est représentée par la reconstitution des espèces sur la coupe des diagrammes établis précédemment avec le plan vertical (Fig.3.14) porté par la droite d'équation $\beta_2 = (1 - X)(1 - \beta_1)$ qu'on nommera la droite de dilution moyenne.

$$y_K = y_K\left(\beta_1,\beta_2,c_{\beta_1,\beta_2}\right)=y_K\left(\beta_1,c_{\beta_1}\right) \tag{3.70}$$

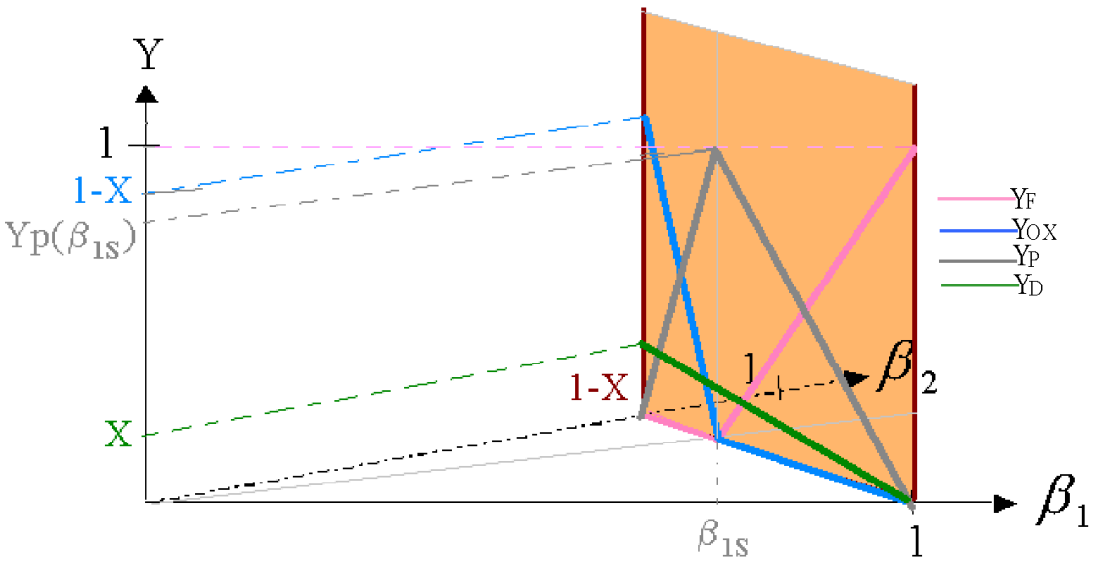


Fig.3.14 - Schéma explicatif de la dégénérescence des lois de reconstruction sur le support de PDF réduit. Exemple donné pour la reconstitution des espèces en chimie infiniment rapide : $c_{\beta_1}=1$

Dans un premier temps il est nécessaire de calculer la fraction de mélange stœchiométrique β_{1S} qui correspond à l'intersection de la droite stœchiométrique et de la droite de dilution moyenne.

$$\begin{cases} \beta_{2S} = (1-X)(1-\beta_{1S}) \\ \dfrac{\beta_{1S}}{\beta_{2S}} = \dfrac{1}{s} \end{cases}$$

d'où $$\beta_{1S} = \frac{1}{1+\dfrac{s}{1-X}} \qquad (3.71)$$

NB1 : Cette expression pour la fraction de mélange stœchiométrique peut facilement être retrouvée si l'on considère le diluant faisant partie du comburant dans les proportions X diluant et 1-X comburant et en utilisant l'équation 2 .35 avec κ_1 =1 (combustible non dilué) et κ_2 =X.

NB2 : On retrouve évidemment la fraction stœchiométrique non diluée en posant X=0

$$\beta_{1S0} = \frac{1}{1+s} = f_s \qquad (3.72)$$

De manière analogue à l'expression Eq.2.24, on peut définir la fraction de mélange stœchiométrique comme une fonction de X et de β_{1S0} (Fig.3.15, Eq.3.73)

$$\beta_{1S} = \frac{1}{1+\left(\dfrac{1}{\beta_{1S0}}-1\right)\dfrac{1}{1-X}} \qquad (3.73)$$

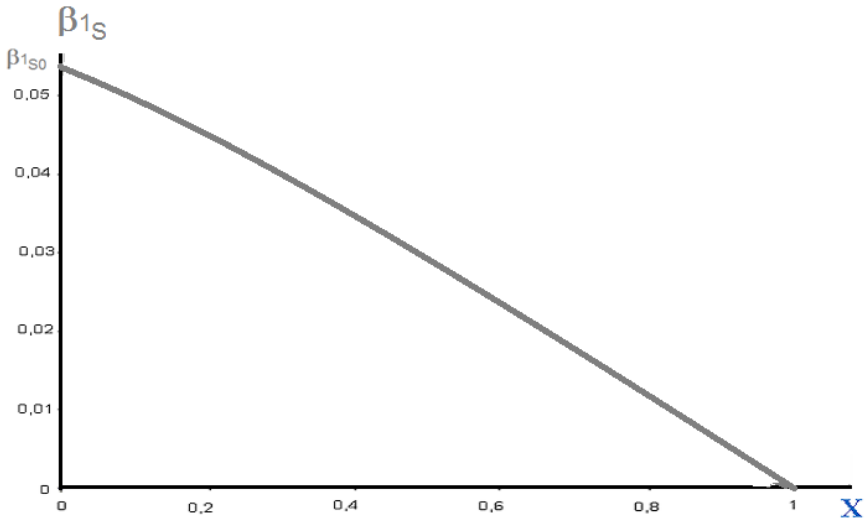


Fig.3.15 - Evolution de la fraction de mélange stœchiométrique en fonction du taux de dilution X

Pour déterminer les lois simplifiées de reconstitution des espèces, on remplace β_2 par (1 – X)(1 – β_1) dans les lois $y_K(\beta_1, \beta_2, c)$.

On obtient finalement :

Mélange riche $\beta_1 > \beta_{1S}$

$y_P = c(s+1)\beta_{1S}\frac{1-\beta_1}{1-\beta_{1S}}$	$y_F = \beta_1 - c\beta_{1S}\frac{1-\beta_1}{1-\beta_{1S}}$	$y_O = (1-c)s\beta_{1S}\frac{1-\beta_1}{1-\beta_{1S}}$	$y_D = X(1-\beta_1)$

Mélange pauvre $\beta_1 < \beta_{1S}$

$y_P = c(s+1)\beta_{1S}\frac{\beta_1}{\beta_{1S}}$	$y_O = s\beta_{1S}\frac{1-\beta_1}{1-\beta_{1S}} - sc\beta_1$	$y_F = (1-c)\beta_{1S}\frac{\beta_1}{\beta_{1S}}$	$y_D = X(1-\beta_1)$

d. Simplification du domaine d'inflammabilité et du modèle CLI_{irr}

Sous ces hypothèses, le domaine d'inflammabilité est réduit à un intervalle. Sur la droite $\beta_2 = (1 - X)(1 - \beta_1)$, il est possible de déterminer les limites d'inflammabilité en résolvant le système (Fig.3.16, Eq.3.74)

$$\left\{\begin{array}{l} F(\beta_1,\beta_2)=0 \\ \beta_2=(1-X)(1-\beta_1) \end{array}\right\} \quad (3.74)$$

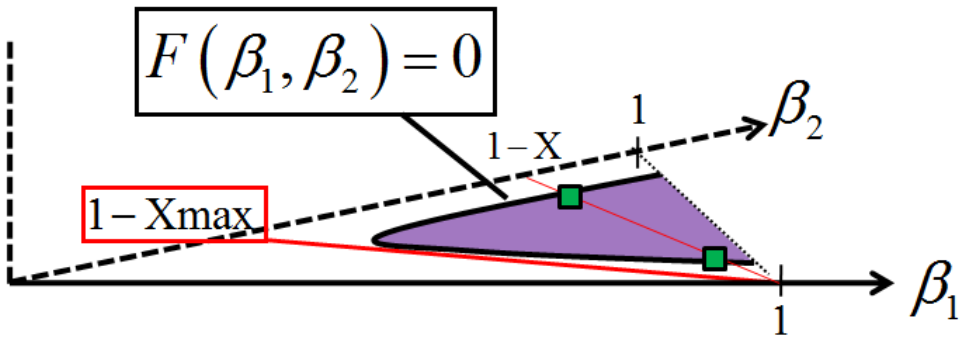


Fig.3.16 - Schématisation de la dégénérescence du domaine d'inflammabilité à un intervalle d'inflammabilité

Le nombre de solutions de ce système dépend de X. On considère le taux de dilution critique du comburant Xmax. On appelle aussi Xmax le point de stabilité de la flamme, c'est à dire le taux de diluant maximum dans le mélange diluant-oxydant, pour que la flamme soit susceptible de se maintenir.

Si $X>X_{max}$
Pas de solution : le mélange n'est pas inflammable.

$$\tilde{y}_K = \tilde{y}_K\left(\beta_1, c=0\right)$$

Si $X \leq X_{max}$
Deux solutions β_{1LI} et β_{1LS} qui définissent un domaine d'inflammabilité au sein duquel la combustion se produit. La fraction massique en produit prédite $\tilde{y}_P^{pred}$ est évaluée par la loi ci-dessous :

$$c_{\beta_1} = \begin{cases} 0 \Leftrightarrow \beta_1 \notin \left[\beta_{1LI}, \beta_{1LS}\right] \\ 1 \Leftrightarrow \beta_1 \in \left[\beta_{1LI}, \beta_{1LS}\right] \end{cases}$$

$$\tilde{y}_P^{pred} = \int_0^{\beta_{1LI}} y_P\left(\beta_1, 0\right) p\left(\beta_1\right) d\beta_1 + \int_{\beta_{1LI}}^{\beta_{1LS}} y_P\left(\beta_1, 1\right) p\left(\beta_1\right) d\beta_1 + \int_{\beta_{1LS}}^{1} y_P\left(\beta_1, 0\right) p\left(\beta_1\right) d\beta_1 \qquad (3.75)$$

Cette prédiction sert de la même manière au modèle de fermeture du terme de production de la fraction massique moyenne des produits (Eq.3.56) afin de déterminer la loi de reconstitution des espèces du modèle CLI_{irr} :

$$c_{\beta_1} = \begin{cases} 1 \Leftrightarrow \beta_1 \in \left[\beta_{1LI}, \beta_{1LS}\right] \\ \alpha \Leftrightarrow \beta_1 \notin \left[\beta_{1LI}, \beta_{1LS}\right] \end{cases} \qquad (3.76)$$

Le paramètre α se détermine toujours suivant l'équation Eq.3.61. Visuellement, on tombe sur des lois de constitution décrites par la figure 3.17.

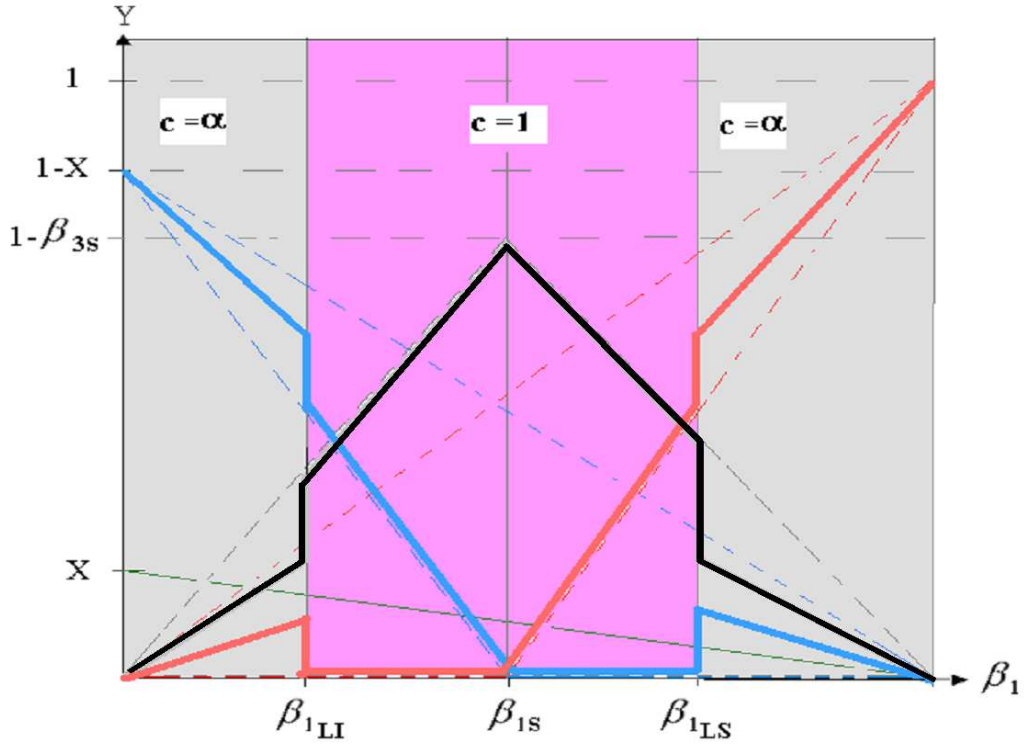


Fig.3.17 - Reconstruction des fractions massiques du comburant, du combustible, des produits et du diluant dans le schéma simplifié

En ce qui concerne la reconstitution de la température et du volume massique, on retrouve le même type de simplification du calcul. Avec l'hypothèse de réduction du support à la droite de dilution moyenne, et dans la mesure où il est possible de reconstituer la loi $h_{\beta 1}$.

Dans le cadre d'un transport de l'énergie non adiabatique lié à un échange entre les phases, la détermination de $h_{\beta 1}$ nécessite une hypothèse supplémentaire quant à la répartition de l'énergie du mélange. Cependant, l'hypothèse de non coexistence entre la phase liquide et le combustible permet de conclure sur la question de répartition de l'énergie en n'introduisant une perte énergétique que pour le mélange air – vapeur (Fig.3.18).

Remarque : la mise en place des transferts radiatifs nécessitera une répartition de l'énergie plus complexe.

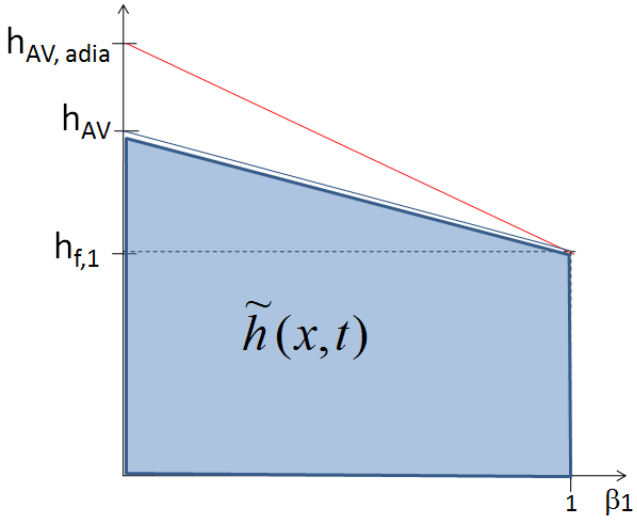


Fig.3.18 - Répartition de l'énergie du gaz dans le cadre des échanges thermiques entre la phase liquide et le mélange air-vapeur

Dans ce cas, la répartition de l'énergie est donnée par la relation : $h_{\beta 1} = \beta_1 h_{F,1} + (1 - \beta_1) h_{AV}$.
L'égalité de l'intégrale de cette répartition par la PDF et de l'énergie moyenne $\tilde{h}(x,t)$ du gaz transportée, permet de déterminer de $h_{AV}\left(=\left(\tilde{h}(x,t)-\tilde{\beta}_1 h_{F,1}\right)\Big/\left(1-\tilde{\beta}_1\right)\right)$.

Une fois connue la répartition de l'énergie (adiabatique ou non-adiabatique), il est possible de reconstituer la température sur la droite de mélange.

$$T\left(\beta_1, c_{\beta_1}\right) = TAB_{\beta_1}^{-1}\left(h_{\beta_1} - \sum\nolimits_k y_k\left(\beta_1, c_{\beta_1}\right)\Delta h_k^0\right) \tag{3.77}$$

La température moyenne s'exprime alors :

$$\tilde{T} = \int T\left(\beta_1, c_{\beta_1}\right) p(\beta_1) d\beta_1 \tag{3.78}$$

Enfin, pour le volume massique, on obtient

$$\left(\frac{\tilde{1}}{\rho}\right) = \frac{1}{\overline{\rho}} = \int \left(1/\rho_{\beta_1}\right) p(\beta_1) d\beta_1 \tag{3.79}$$

III.2. Un formalisme eulérien-eulérien homogène avec glissement

Un mélange hétérogène (Fig.3.19) peut souvent être régi par des lois de comportement variées, et les quantités telles que la masse volumique et la température peuvent présenter de forts gradients spatiaux. Il est souvent très difficile de considérer ces fortes variations sans que cela induise des coûts de calcul importants (taille de maille très petite) et on recourt à un modèle de description multi-fluides, supposant que le mélange peut être subdivisé en régions purement monophasiques, où les grandeurs physiques obéissent aux équations de bilan locales de la mécanique des milieux continus, et séparées par des frontières mobiles (interfaces), où s'opèrent des échanges entre les différentes phases. L'hypothèse forte est de considérer ces interfaces d'épaisseur et de masse négligeables. Cette écriture permet d'obtenir des équations bilan locales des grandeurs et des relations de saut au niveau des interfaces pour éviter de représenter les forts gradients. Nous développerons ici le modèle bi-fluide constitué d'un mélange de deux phases (la phase liquide, et la phase gazeuse).

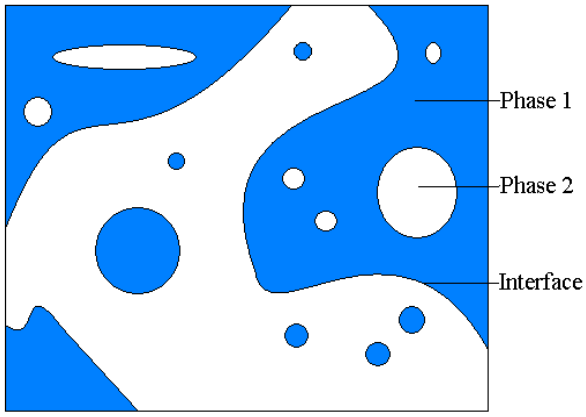


Fig.3.19 - Visualisation d'un champ à deux phases séparées par une interface

On applique ensuite un opérateur de moyenne de phase, pour enfin retrouver la formulation des équations de transport (sur le volume rapporté au mélange) pour chacune des grandeurs associées à la phase liquide et la phase gazeuse (Viollet et Simonin [140])

III.2.1. Equations locales instantanées

a. Forme générale des équations locales instantanées

Nous allons tout d'abord rappeler les équations locales nécessaires au développement de la modélisation des écoulements réactifs (Kuo [69] ou de Williams [128])

Dans le cadre d'un mélange, à N espèces réactives, nous repérerons les variables via des coordonnées spatio-temporelles, (x_i,t) pour des variables pouvant représenter la j^{eme} composante de la vitesse u_j, la masse volumique ρ, la pression p, et l'enthalpie du mélange h et h_K l'enthalpie des N espèces de fraction massique y_K.

On notera J_j^{ψ} la j^{eme} composante du flux de diffusion de la grandeur ψ. Les quantités A_{ext}^{ψ}, A_{int}^{ψ} et A_{chim}^{ψ} désigneront les différents termes de production du scalaire (interaction à distance avec l'extérieur, production ou dissipation interne, et terme source associé à la chimie).

Alors, il est possible d'écrire des équations bilan pour la grandeur considérée sous la forme :

$$\frac{\partial \rho \psi}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_j}\left(\rho \psi u_j\right) = -\frac{\partial}{\partial x_j}\left(J_j^{\psi}\right) + A_{ext}^{\psi} + A_{\text{int}}^{\psi} + A_{chim}^{\psi} \tag{3.80}$$

	Quantité ψ	Flux J_j^{ψ}	A_{ext}^{ψ}	A_{int}^{ψ}	A_{chim}^{ψ}
Masse	1	0	0	0	0
Fraction massique des espèces	y_K	J_j^K	0	0	$\dot{\omega}_K$
Quantité de mouvement	u_i	$-\sigma_{ij}$	ρg_i	0	0
Energie	e	$q_j + \sum_k h_k J_j^K$	s_R	$\sigma_{ij}\frac{\partial}{\partial x_j}(u_i)$	0

Tab.3.3 - Récapitulatif des termes introduits dans les équations locales

b. Fermeture des flux diffusifs

- **Transfert diffusif pour la quantité de mouvement**

En ce qui concerne l'équation de la quantité de mouvement, il est nécessaire de déterminer le tenseur des contraintes pour caractériser l'aspect moléculaire visqueux de l'équation de transport. Dans le contexte général d'un écoulement Newtonien à viscosité dynamique (μ), on définira le tenseur des contraintes de la manière suivante :

$$\sigma_{ij} = \tau_{ij} - p\delta_{ij} = \left(-\frac{2}{3}\mu\frac{\partial u_k}{\partial x_k}\delta_{ij} + \mu\left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i}\right)\right) - p\delta_{ij} \tag{3.81}$$

- **Transfert diffusif d'une espèce**

En ce qui concerne la diffusion des espèces, la fermeture associée est la loi de Fick qui introduit un transfert des zones en forte concentration vers les zones peu concentrée.

$$J_j^K = -\rho D_K \frac{\partial}{\partial x_j}\left(y_K\right) \tag{3.82}$$

- **Transfert diffusif pour la chaleur**

En ce qui concerne l'énergie, il existe bien évidemment une diffusion liée directement à la diffusion des espèces et de l'énergie chimique (liaisons moléculaires) qui leur est associée ($\sum h_K J_j^K$).

D'après Fourier, il existe un autre transfert de chaleur des zones chaudes vers les zones froides.

$$q_j = -\lambda\frac{\partial}{\partial x_j}(T) \tag{3.83}$$

En règle générale, on revient souvent à la forme simplifiée :

$$q_j = -\frac{\lambda}{C}\frac{\partial}{\partial x_j}(h) = -\rho D_{th}\frac{\partial}{\partial x_j}(h) \tag{3.84}$$

Remarque : Il est possible de transporter l'enthalpie plutôt que l'énergie pour ne plus tenir compte de la création d'énergie interne par le gradient de pression.

$$\frac{\partial \rho h}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_j}\left(\rho h u_j\right) = -\frac{\partial}{\partial x_j}\left(J_j^h\right) + A_{ext}^h + A_{\text{int}}^h + A_{chim}^h \tag{3.85}$$

avec :

$$A_{ext}^h = S_R \qquad A_{\text{int}}^h = \tau_{ij}\frac{\partial}{\partial x_j}(u_i) \qquad A_{chim}^h = 0 \qquad J_j^h = -\rho D_{th}\frac{\partial h}{\partial x_j}$$

c. Détermination de nombres caractéristiques

En règle générale, il est assez déterminant de connaître le rapport des coefficients de diffusion pour relativiser l'importance des propriétés visqueuses, diffusives, et thermiques du fluide.

Le rapport entre la diffusion de chacune des espèces et la diffusion de la quantité de mouvement fixe la valeur des nombres de Schmidt :

$$Sc_K = \frac{\nu}{D_K} \tag{3.86}$$

La différence entre la diffusion de la chaleur et de la quantité de mouvement s'évalue par l'intermédiaire du nombre de Prandtl :

$$\text{Pr} = \frac{\nu}{\left(\lambda/\rho C\right)} = \frac{\nu}{D_{th}} \tag{3.87}$$

Enfin on introduit les nombres de Lewis évaluant le rapport de la diffusion des espèces et de la température :

$$Le_K = \frac{\left(\lambda/\rho C\right)}{D_K} = \frac{D_{th}}{D_K} = \frac{Sc_K}{\text{Pr}} \tag{3.88}$$

d. Récapitulatif

	Quantité ψ	Flux J_j^{ψ}	A_{ext}^{ψ}	A_{int}^{ψ}	A_{chim}^{ψ}
Masse	1	0	0	0	0
Fraction massique des espèces	y_k	$-\rho D_k \frac{\partial}{\partial x_j}(y_k)$	0	0	$\dot{\omega}_k$
Quantité de mouvement	u_i	$-\left[\left(-\frac{2}{3}\mu\frac{\partial u_k}{\partial x_k}\delta_{ij}+\mu\left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j}+\frac{\partial u_j}{\partial x_i}\right)\right)-p\delta_{ij}\right]$	ρg_i	0	0
Enthalpie	h	$-\rho D_{th}\frac{\partial}{\partial x_j}(h)$	s_R	$\tau_{ij}\frac{\partial}{\partial x_j}(u_i)$	0

Tab.3.4 - Récapitulatifs des termes introduits pour les équations locales après la modélisation des flux laminaires

III.2.2. Lois d'état

Dans le cadre d'un écoulement bi-fluide eau-gaz, nous distinguons les deux lois associées à ces deux phases.

a. Loi d'état pour les gaz

On se place dans le cadre de nombres de Mach faibles. La pression thermodynamique, supposée constante, restera suffisamment modérée pour employer la loi des gaz parfaits.

$$p_K = \rho_K \frac{R}{W_K} T \tag{3.89}$$

Si nous considérons la pression totale ($p = \sum_{k=1}^{N} p_k$), la masse volumique ($\rho = \sum_{k=1}^{N} \rho_k$) et la masse molaire globale ($\frac{1}{W} = \sum_{k=1}^{N} \frac{y_k}{W_k}$), on « récupère » la loi d'état globale :

$$p = \rho \frac{R}{W} T \tag{3.90}$$

b. Loi d'état pour l'eau liquide

L'eau sera considérée comme un liquide incompressible et sa variation de volume en fonction de la température et de la pression restera infinitésimale :

$$\rho = cst = \rho_{eau} \tag{3.91}$$

III.2.3. Utilisation de l'opérateur moyenne phasique

Dans le contexte d'un milieu sub-divisible en deux milieux continus, les champs scalaires peuvent être considérés comme des fonctions des coordonnées spatiales dérivables « presque partout». Effectivement, la dérivation ne peut s'opérer au niveau des interfaces siège de discontinuité des champs (relation de saut) (Lance [70], Drew [34], Kataoka [63]). C'est pourquoi il sera préférable d'utiliser un formalisme de distribution (Schwartz [129]) pour étendre les résultats locaux à l'ensemble du domaine et faire apparaître les conditions de saut.

a. Opérateur « moyenne »

La définition de l'opérateur statistique sur la variable ψ est donnée par la relation suivante :

$$\langle \psi \rangle_S (x_i,t) = \lim_{N_R \to \infty} \frac{1}{N_R} \sum_{k=1}^{N_R} \psi_k (x_i,t) \tag{3.92}$$

Connue pour respecter les axiomes de Reynolds : Linéarité / Idempotence / Commutativité avec opérateur de dérivation et d'intégration.

Cependant, en pratique, il n'est pas possible d'utiliser cet opérateur et on utilisera l'opérateur de moyenne volumique qui ne respecte pas systématiquement ces axiomes.

$$\langle \psi \rangle_V (x_i,t) = \frac{1}{V} \iiint_V \psi(x_i,t) dV \tag{3.93}$$

b. Définition de la « moyenne phasique »

De manière rigoureuse, pour un calcul polydisperse à *Nc* classe de gouttes, il est nécessaire de prendre en compte *Nc* + 1 phases (*Nc* phase pour chaque classe + 1 phase pour le gaz). Cependant, pour la clarté de l'exposé, l'établissement du modèle se fera pour deux phases (c'est-à-dire une unique classe de goutte).

Pour ϕ = 1 ou ϕ = 2, on pose la fonction $\chi_\phi(x_i,t)$ la fonction indicatrice de la phase ϕ valant 1 dans cette phase et zéro ailleurs. On pose $\alpha_\phi(x_i,t) = \langle \chi_\phi(x_i,t) \rangle$ le taux de présence de la phase ϕ.

On a l'égalité suivante :

$$\alpha_1 + \alpha_2 = 1 \tag{3.94}$$

On peut alors définir 2 types de moyenne phasique :

- La moyenne phasique classique (c'est le pendant de la moyenne de Reynolds)

$$\bar{\psi}_\phi = \frac{\langle \psi \chi_\phi \rangle}{\alpha_\phi} \tag{3.95}$$

La décomposition suivante cette moyenne s'écrira $\psi_\phi = \bar{\psi}_\phi + \psi_\phi'$

- La moyenne phasique pondérée par la masse volumique (c'est le pendant de la moyenne de Favre)

$$\tilde{\psi}_\phi = \frac{\langle \psi \rho \chi_\phi \rangle}{\bar{\rho}_\phi \alpha_\phi} \tag{3.96}$$

Dont la décomposition s'écrit $\psi_\phi = \tilde{\psi}_\phi + \psi_\phi''$

c. Quelques propriétés de l'opérateur « moyenne phasique »

Au sens des distributions, la fonction caractéristique $\chi_\phi(x_i,t)$ vérifie les égalités suivantes :

$$\frac{\partial \chi_\phi}{\partial t}+u_{sj}\frac{\partial \chi_\phi}{\partial x_j}=0 \text{ et } \frac{\partial \chi_\phi}{\partial x_j}=-n_{\phi,j}\delta_\phi \tag{3.97}$$

$u_{s,j}$ représente la j^{ieme} composante de la vitesse de l'interface, $n_{\phi,j}$ ($n_{1,j}$ =- $n_{2,j}$) la j^{ieme} composante du vecteur normal sortant de la phase ϕ et δ_ϕ la distribution Dirac volumique associée à l'interface.

Alors on obtient les relations suivantes (au sens des distributions) :

$$\begin{aligned}\frac{\partial \psi}{\partial t}\chi_\phi &= \frac{\partial \psi\chi_\phi}{\partial t}-\psi u_{sj}n_{\phi,j}\delta_\phi \\ \frac{\partial \psi}{\partial x_i}\chi_\phi &= \frac{\partial \psi\chi_\phi}{\partial x_i}+\psi n_{\phi,j}\delta_\phi\end{aligned} \tag{3.98}$$

Dans le cadre de la moyenne volumique, les termes supplémentaires sont des intégrales de surface sur l'interface qui vont caractériser les échanges aux interfaces.

$$\left\langle \psi u_{sj}n_{\phi,j}\delta_\phi \right\rangle = \frac{1}{V}\iint_{S_{\text{int}}}\psi u_{sj}n_{\phi,j}dS \qquad \left\langle \psi n_{\phi,j}\delta_\phi \right\rangle = \frac{1}{V}\iint_{S_{\text{int}}}\psi n_{\phi,j}dS \tag{3.99}$$

d. Moyenne phasique des équations locales instantanées

De manière générale, l'équation de transport locale d'une grandeur ψ s'écrit suivant l'expression 3.80. Pour établir l'équation de transport moyennée, trois étapes sont nécessaires. Celles si sont :

- La multiplication de l'équation locale par la fonction de présence.
- L'introduction de la fonction de présence dans les opérateurs dérivés.
  Cette opération introduira toujours un terme supplémentaire au second membre de la forme :

$$\gamma_{\psi\phi}=-\left[\rho\left(u_j-u_{sj}\right)\psi+J_j^\psi\right]n_{\phi,\text{j}}\delta_\phi \tag{3.100}$$

- L'application de l'opérateur moyenne volumique $< >$ défini dans l'expression 3.93 pour faire apparaître l'équation de transport moyennée de la forme.

$$\begin{aligned}&\frac{\partial\left(\alpha_\phi\overline{\rho}_\phi\tilde{\psi}_\phi\right)}{\partial t}+\frac{\partial}{\partial x_j}\left(\alpha_\phi\overline{\rho}_\phi\tilde{u}_{\phi,j}\tilde{\psi}_\phi\right) \\ &=-\frac{\partial}{\partial x_j}\left(\alpha_\phi\overline{J_{j\phi}^\psi}+\alpha_\phi\overline{\rho}_\phi\widetilde{\psi_\phi''u_{j\phi}''}\right)+\alpha_\phi\left(\overline{A_{ext\,\phi}^\psi}+\overline{A_{\text{int}\,\phi}^\psi}+\overline{A_{chim\,\phi}^\psi}\right)+\Gamma_{\psi\phi}\end{aligned} \tag{3.101}$$

$\Gamma_{\psi\phi}$ représentant ici le terme d'échange moyen de la quantité ψ à l'interface :

$$\Gamma_{\psi\phi}=\left\langle\gamma_{\psi\phi}\right\rangle=\left\langle-\left[\rho\left(u_j-u_{sj}\right)\psi+J_j^\psi\right]n_{\phi,\text{j}}\delta_\phi\right\rangle \tag{3.102}$$

- **Bilan de masse moyenné sur la phase ϕ**

En ce qui concerne l'équation de continuité, on trouve

$$\frac{\partial\left(\alpha_\phi\overline{\rho}_\phi\right)}{\partial t}+\frac{\partial}{\partial x_j}\left(\alpha_\phi\overline{\rho}_\phi\tilde{u}_{\phi,j}\right)=\Gamma_\phi$$
$$\Gamma_\phi=\left\langle-\rho\left(u_j-u_{sj}\right)n_{\phi,\mathrm{j}}\delta_\phi\right\rangle \tag{3.103}$$

Remarque : L'hypothèse d'une interface sans accumulation de masse nous permet d'égaliser $u_{1,j}$ et $u_{2,j}$ au niveau de l'interface et de trouver $\Gamma_1=-\Gamma_2$

- **Bilan de masse d'une espèce k et plus particulièrement celui des produits**

En ce qui concerne les fractions massiques des espèces, dans le cadre du modèle de combustion, seule la moyenne de l'équation de transport des produits (n'apparaissant que dans le gaz) sera nécessaire (on notera $\tilde{y}_{P1}=\tilde{y}_P$). L'expression de l'équation de transport moyenne des produits dans le gaz est la suivante :

$$\frac{\partial\left(\alpha_1\overline{\rho}_1\tilde{y}_P\right)}{\partial t}+\frac{\partial}{\partial x_j}\left(\alpha_1\overline{\rho}_1\tilde{u}_{1,j}\tilde{y}_P\right)=-\frac{\partial}{\partial x_j}\left(\alpha_1\overline{J_{j1}^{y_P}}+\alpha_1\overline{\rho}_1\widetilde{y_P''u_{j1}''}\right)+\Gamma_{P1}+\alpha_1\overline{\dot{\omega}_P} \tag{3.104}$$

Sous l'hypothèse que les produits ne se dissolvent pas dans la phase liquide, nous supposerons $\Gamma_{P1}=0$

Le terme moyen de production chimique des produits est évalué via le modèle de combustion à limite d'inflammabilité introduit dans la partie III.1 :

$$\alpha_1\overline{\dot{\omega}_P}=\frac{\overline{\rho}}{\tau_r}\min\left(\left(X_1\tilde{y}_P^{pred}-X_1\tilde{y}_P\right),0\right) \tag{3.105}$$

.

- **Bilan de quantité de mouvement**

L'expression de l'équation moyenne du transport de la quantité de mouvement s'écrit :

$$\frac{\partial\left(\alpha_\phi\overline{\rho}_\phi\tilde{u}_{i,\phi}\right)}{\partial t}+\frac{\partial}{\partial x_j}\left(\alpha_\phi\overline{\rho}_\phi\widetilde{u_{i\phi}u_{j\phi}}\right)=-\frac{\partial}{\partial x_j}\left(-\alpha_\phi\overline{\sigma}_{ij\phi}\right)+\alpha_\phi\overline{\rho}_\phi g_i+I_{i\phi} \tag{3.106}$$

Cette expression fait intervenir le tenseur moyenné des contraintes $\overline{\sigma}_{ij\phi}=-\overline{p}_\phi\delta_{ij}+\overline{\tau}_{ij\phi}$, et le transfert de quantité de mouvement entre les phases, $I_{i\phi}=-\left\langle\left[\rho\left(u_j-u_{sj}\right)u_i-\sigma_{ij\phi}\right]n_{\phi,\mathrm{j}}\delta_\phi\right\rangle$.

Comme l'interface est sans masse, on peut toujours supposer l'équilibre :

$$I_{i1}+I_{i2}=0$$

Dans le cas des écoulements liquide-gaz, on considérera l'égalité des pressions moyennées dans chaque phase $\overline{p}_1=\overline{p}_2$ (tension interfaciale négligée).

- **Bilan d'enthalpie**

$$\frac{\partial\left(\alpha_\phi \bar{\rho}_\phi \tilde{h}_\phi\right)}{\partial t}+\frac{\partial}{\partial x_j}\left(\alpha_\phi \bar{\rho}_\phi \tilde{u}_{j,\phi} \tilde{h}_\phi\right)=-\frac{\partial}{\partial x_j}\left(\alpha_\phi \bar{J}_{j\phi}^{h}+\alpha_\phi \bar{\rho}_\phi \widetilde{h_\phi'' u_{j\phi}''}\right)+\alpha_\phi \bar{s}_{R\phi}+\Pi_\phi \tag{3.107}$$

Avec $\Pi_\phi=-\left\langle\left[\rho_\phi\left(u_j-u_{sj}\right)h_\phi+J_j^h\right]n_{\phi,j}\delta_\phi\right\rangle$

De la même manière, on aura la somme des échanges de chaleur interfaciaux nulle pour l'ensemble des deux phases ($\Pi_1+\Pi_2=0$).

- **Bilan de la moyenne et de la variance d'un scalaire gazeux inerte**

Dans le cadre d'un écoulement réactif, le modèle à multi-fractions de mélange nous permet de reconstituer des scalaires inertes β_n dont nous pouvons transporter la moyenne et la variance. Il faut remarquer que les espèces gazeuses n'intervenant que dans la phase gaz, l'établissement des équations n'ont de sens que dans cette phase.

On notera par la suite $\tilde{\beta}_{n1}=\tilde{\beta}_n$ et $\widetilde{\beta_{n1}''^2}=\widetilde{\beta_n''^2}$

Equation pour la moyenne :

$$\frac{\partial\left(\alpha_1 \bar{\rho}_1 \tilde{\beta}_n\right)}{\partial t}+\frac{\partial}{\partial x_j}\left(\alpha_1 \bar{\rho}_1 \tilde{\beta}_n \tilde{u}_{j1}\right)=-\frac{\partial}{\partial x_j}\left(\alpha_1 \overline{J_j^{\beta_n}}\right)+\Gamma_{\beta n} \tag{3.108}$$

$$\gamma_{\beta_n}=-\left[\rho\beta_n\left(u_j-u_{sj}\right)+J_j^{\beta_n}\right]n_{1,j}\delta_1 \qquad \Gamma_{\beta n}=\left\langle\gamma_{\beta n}\right\rangle$$

Equation pour la variance :

L'établissement de l'équation de transport de la variance de ce scalaire doit se décomposer en plusieurs étapes (Annexe B).

$$\begin{aligned}\frac{\partial\left(\alpha_1 \bar{\rho}_1 \widetilde{\beta_n''^2}\right)}{\partial t}+\frac{\partial}{\partial x_j}\left(\alpha_1 \bar{\rho}_1 \tilde{u}_{j1} \widetilde{\beta_n''^2}\right)=&-\frac{\partial}{\partial x_j}\left(\alpha_1 J_j^{\widetilde{\beta_n''^2}}+\alpha_1 \bar{\rho}_1 \widetilde{\beta_n''^2 u_j''}\right)\\ &-2\alpha_1 \bar{\rho}_1 D \widetilde{\frac{\partial \beta_n''}{\partial x_j}\frac{\partial \beta_n''}{\partial x_j}}\\ &-2\alpha_1 \bar{\rho}_1 \widetilde{\beta_n'' u_j''}\frac{\partial \tilde{\beta}_n}{\partial x_j}\\ &+\Gamma_{\widetilde{\beta_n''^2}}\end{aligned} \tag{3.109}$$

Avec un terme de création de variance de la forme :

$$\Gamma_{\widetilde{\beta_n''^2}}=2\left(\left\langle\beta_n\gamma_{\beta n}\right\rangle-\tilde{\beta}_n\left\langle\gamma_{\beta n}\right\rangle\right)+\tilde{\beta}_n^2\left\langle\gamma_1\right\rangle-\left\langle\beta_n^2\gamma_1\right\rangle \tag{3.110}$$

III.2.4. Etablissement des équations de transport

Dans le cadre d'un modèle de « Drift », la résolution se fait suivant 3 étapes importantes :

- Résolution de la vitesse moyenne gaz + liquide
- Introduction d'une vitesse de déviation
- Transport des quantités attachées au gaz par la vitesse du gaz et celles attachées au liquide par la vitesse du liquide

a. Définition de la masse volumique et de la vitesse moyenne du mélange gaz + liquide

Il est possible de définir une masse volumique moyenne et une vitesse moyenne pour le mélange de la façon suivante :

$$\begin{aligned} &\bar{\rho} = \alpha_1 \bar{\rho}_1 + \alpha_2 \bar{\rho}_2 \\ &\bar{\rho} \tilde{u}_j = \alpha_1 \bar{\rho}_1 \tilde{u}_{1,j} + \alpha_2 \bar{\rho}_2 \tilde{u}_{2,j} \end{aligned} \qquad (3.111)$$

Remarque : il est possible de définir les fractions massiques de gaz et d'eau par kilogramme de suspension :

$$X_1 = \frac{\langle \rho \chi_1 \rangle}{\bar{\rho}} \text{ et } X_2 = \frac{\langle \rho \chi_2 \rangle}{\bar{\rho}}$$

Soit

$$\alpha_1 \bar{\rho}_1 = \bar{\rho} X_1 \qquad \alpha_2 \bar{\rho}_2 = \bar{\rho} X_2 \qquad (3.112)$$

Grâce à ces définitions, il est possible de montrer facilement les propriétés suivantes :

$$X_1 + X_2 = 1 \qquad \frac{1}{\bar{\rho}} = \frac{X_1}{\bar{\rho}_1} + \frac{X_2}{\bar{\rho}_2} \qquad \tilde{u}_j = X_1 \tilde{u}_{1,j} + X_2 \tilde{u}_{2,j} \qquad (3.113)$$

b. Décomposition des vitesses de chaque phase

D'autres part, il est possible de décomposer les vitesses $\tilde{u}_{i,1}$ et $\tilde{u}_{i,2}$:

$$\begin{aligned} \tilde{u}_{i,1} &= \tilde{u}_i + U_{i,1}^g + U_{i,1}^d \\ \tilde{u}_{i,2} &= \tilde{u}_i + U_{i,2}^g + U_{i,2}^d \end{aligned} \qquad (3.114)$$

Dans cette décomposition, nous tenons compte de la déviation des vitesses phasiques par rapport à la vitesse moyenne liée au poids de la goutte ($U_{i,1}^g, U_{i,2}^g$) et à la dispersion ($U_{i,1}^d, U_{i,2}^d$).

Les déviations liées à la dispersion doivent être consistantes avec l'homogénéisation des vitesses :

$$X_1 U_{i,1}^d + X_2 U_{i,2}^d = 0$$

En introduisant une vitesse de séparation des phases liée à la dispersion ($V_i^d = U_{i,2}^d - U_{i,1}^d$), on obtient les déviations suivantes :

$$\begin{aligned} U_{i,1}^d &= -X_2 V_i^d \\ U_{i,2}^d &= X_1 V_i^d \end{aligned} \qquad (3.115)$$

De la même manière, pour les déviations liées au glissement, la consistance avec l'homogénéisation des phases impose :

$$X_1 U_{i,1}^g + X_2 U_{i,2}^g = 0$$

Si de plus on introduit la vitesse de séparation des phases liée au glissement ($U_{i,2}^g - U_{i,1}^g = V_i^g$), on obtient :

$$\begin{aligned} U_{i,2}^g &= X_1 V_i^g \\ U_{i,1}^g &= -X_2 V_i^g \end{aligned} \qquad (3.116)$$

c. Homogénéisation des phases pour le calcul de la vitesse moyenne du mélange

- **Homogénéisation des bilans de masse moyennés**

En reprenant les expressions 3.103 pour la phase 1 et la phase 2 et en les sommant on obtient :

$$\begin{aligned} &\frac{\partial\left(\alpha_1\overline{\rho}_1 + \alpha_2\overline{\rho}_2\right)}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_j}\left(\alpha_1\overline{\rho}_1\tilde{u}_{1,j} + \alpha_2\overline{\rho}_2\tilde{u}_{2,j}\right) = \Gamma_1 + \Gamma_2 = 0 \\ &\frac{\partial\left(\overline{\rho}\right)}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_j}\left(\overline{\rho}\tilde{u}_j\right) = 0 \end{aligned} \qquad (3.117)$$

Nous retrouvons l'équation de continuité moyenne homogénéisée (sur le mélange gaz+liquide)
.

- **Homogénéisation des transports de quantités de mouvement**

En reprenant les expressions 3.106 pour la phase 1 et la phase 2 et en les sommant, on obtient :

$$\begin{aligned} &\frac{\partial\left(\alpha_1\overline{\rho}_1\tilde{u}_{i,1} + \alpha_2\overline{\rho}_2\tilde{u}_{i,2}\right)}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_j}\left(\alpha_1\overline{\rho}_1\widetilde{u_{i1}u_{j1}} + \alpha_2\overline{\rho}_2\widetilde{u_{i2}u_{j2}}\right) = \\ &\frac{\partial}{\partial x_j}\left(\alpha_1\left(-\overline{p}_1\delta_{ij} + \overline{\tau}_{ij1}\right) + \alpha_2\left(-\overline{p}_2\delta_{ij} + \overline{\tau}_{ij2}\right)\right) + \alpha_1\overline{\rho}_1 g_i + \alpha_2\overline{\rho}_2 g_i + I_{i1} + I_{i1} \end{aligned} \qquad (3.118)$$

L'hypothèse d'égalité des pressions et d'équilibre de l'interface, permet de simplifier cette expression :

$$\frac{\partial\left(\overline{\rho}\tilde{u}_i\right)}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_j}\left(\alpha_1\overline{\rho}_1\widetilde{u_{i1}u_{j1}} + \alpha_2\overline{\rho}_2\widetilde{u_{i2}u_{j2}}\right) = -\frac{\partial\overline{p}}{\partial x_i} + \frac{\partial}{\partial x_j}\left(\alpha_1\overline{\tau}_{ij\,1} + \alpha_2\overline{\tau}_{ij\,2}\right) + \overline{\rho}g_i \qquad (3.119)$$

En utilisant la décomposition des vitesses phasiques en fonction de la vitesse moyenne et des déviations, il est possible de réduire encore cette expression sous la forme :

$$\begin{aligned} &\frac{\partial\left(\overline{\rho}\tilde{u}_i\right)}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_j}\left(\overline{\rho}\tilde{u}_j\tilde{u}_i\right) = \\ &-\frac{\partial\overline{p}}{\partial x_i} + \frac{\partial}{\partial x_j}\left(\overline{\tau_{ij}}\right) - \frac{\partial}{\partial x_j}\left(\widetilde{u_i''u_j''} + \overline{\rho}X_1X_2\left(V_i^g + V_i^d\right)\left(V_j^g + V_j^d\right)\right) + \overline{\rho}g_i \end{aligned} \qquad (3.120)$$

d. Etablissement des équations de transports des fractions massiques X_1 et X_2

En introduisant les déviations dans les équations de continuité 3.103, on obtient :

$$\begin{aligned}&\frac{\partial\left(\bar{\rho}_\phi X_\phi\right)}{\partial t}+\frac{\partial}{\partial x_j}\left(\bar{\rho} X_\phi\left(\tilde{u}_j+U_{j,\phi}^g+U_{j,\phi}^d\right)\right)=\Gamma_\phi\\&\frac{\partial\left(\bar{\rho}_\phi X_\phi\right)}{\partial t}+\frac{\partial}{\partial x_j}\left(\bar{\rho} X_\phi\left(\tilde{u}_j+U_{j,\phi}^g\right)\right)=-\frac{\partial}{\partial x_j}\left(\bar{\rho} X_\phi U_{j,\phi}^d\right)+\Gamma_\phi\end{aligned} \tag{3.121}$$

e. Transport moyen d'une quantité ψ

En introduisant les déviations dans le transport moyen d'une quantité ψ dans la phase ϕ, on obtient :

$$\begin{aligned}&\frac{\partial\left(\bar{\rho} X_\phi\tilde{\psi}_\phi\right)}{\partial t}+\frac{\partial}{\partial x_j}\left(\bar{\rho} X_\phi\left(\tilde{u}_j+U_{j,\phi}^g\right)\tilde{\psi}_\phi\right)\\&=-\frac{\partial}{\partial x_j}\left(\alpha_\phi\overline{J_{j\phi}^\psi}+\bar{\rho} X_\phi U_{j,\phi}^g\tilde{\psi}_\phi+\alpha_\phi\bar{\rho}_\phi\widetilde{\psi_\phi^{"}u_{j\phi}^{"}}\right)+\alpha_\phi\left(\overline{A_{ext\,\phi}^\psi}+\overline{A_{int\,\phi}^\psi}+\overline{A_{chim\,\phi}^\psi}\right)+\Gamma_{\psi\phi}\end{aligned} \tag{3.122}$$

III.2.5. Fermeture des flux de glissement

a. Les flux de glissement liés à la dispersion des phases

Généralement, la dispersion des phases est donnée par une loi gradient permettant aux gouttes et au gaz de diffuser (via des coefficients de diffusion laminaire D_{12} et turbulent D_t) vers les zones où ils sont (réciproquement) en quantités plus faibles.

$$V_i^d=-\frac{D_{12}+D_{12t}}{X_1X_2}\frac{\partial X_2}{\partial x_i}=\frac{D_{12}+D_{12t}}{X_1X_2}\frac{\partial X_1}{\partial x_i} \tag{3.123}$$

Les vitesses de déviation $U_{i,\phi}^d$ sont alors données par la relation suivante :

$$\begin{aligned}U_{i,1}^d&=-\frac{D_{12}+D_{12t}}{X_1}\frac{\partial X_1}{\partial x_i}\\U_{i,2}^d&=-\frac{D_{12}+D_{12t}}{X_2}\frac{\partial X_2}{\partial x_i}\end{aligned} \tag{3.124}$$

b. Les flux de glissement liés à la pesanteur

Comme expliqué dans la partie phénoménologie, nous supposons que le glissement entre les deux phases est égal à une vitesse u_∞ prédéterminée en fonction du diamètre de la goutte et des caractéristiques de l'écoulement.

$$V_i^d = u_{i\infty} \tag{3.125}$$

Les vitesses de déviation $U_{i,\phi}^g$ sont alors données par la relation suivante :

$$\begin{aligned} U_{i,1}^g &= -X_2 u_{i\infty} \\ U_{i,2}^g &= X_1 u_{i\infty} \end{aligned} \tag{3.126}$$

III.2.6. Fermeture des flux turbulents

a. Présentation du modèle usuel (à ce jour utilisé) pour la description des flux turbulents

(i) Le flux turbulent de l'équation de quantité de mouvement

Le modèle *k* - ***ε*** reposant sur le concept de viscosité turbulente consiste à modéliser les tensions de Reynolds par analogie avec le tenseur des contraintes visqueuses (τ_{ij}). Dans le cadre d'un milieu diphasique dispersé, la turbulence n'est portée que par la phase continue et annulée dans la phase dispersée ; seul le tenseur de Reynolds de la phase gaz est modélisé via la formulation de Boussinesq :

$$\widetilde{u_i'' u_j''} - \frac{1}{3}\widetilde{u_l'' u_l''} = \upsilon_t \left(-\left(\frac{\partial \tilde{u}_i}{\partial x_j} + \frac{\partial \tilde{u}_j}{\partial x_i} \right) + \frac{2}{3}\frac{\partial \tilde{u}_l}{\partial x_l} \right) \tag{3.127}$$

On définit l'énergie cinétique turbulente k comme la demi-trace du tenseur de Reynolds $\left(\widetilde{u_i'' u_j''}\right)_{ij}$.

$$k = \frac{1}{2}\widetilde{u_l'' u_l''} \tag{3.128}$$

La formulation de Boussinesq devient :

$$\widetilde{u_i'' u_j''} = \nu_t \left(-\left(\frac{\partial \tilde{u}_i}{\partial x_j} + \frac{\partial \tilde{u}_j}{\partial x_i} \right) + \frac{2}{3}\frac{\partial \tilde{u}_l}{\partial x_l} \right) + \frac{2}{3}k \tag{3.129}$$

ν_t est le coefficient de viscosité turbulente du mélange et se détermine en fonction de l'énergie turbulente *k* et le taux de dissipation ***ε*** de la phase gazeuse via la constante C_μ de Launder et Spalding.

$$\nu_t = \mathrm{C}_\mu \frac{k^2}{\varepsilon} \tag{3.130}$$

(ii) Le flux turbulent d'un scalaire

Par analogie avec la diffusion moléculaire, il est possible d'exprimer les flux turbulents des scalaires par une loi gradient (équivalent de la loi de Fick).

$$\widetilde{\psi_\phi'' u_{j\phi}''} = -D_{\psi t} \frac{\partial \tilde{\psi}_\phi}{\partial x_j} \tag{3.131}$$

On introduit le nombre de Schmidt turbulent comme le rapport de la viscosité turbulente et le coefficient de diffusion turbulente des scalaires.

$$Sc_{\psi t} = \frac{\upsilon_t}{D_{\psi t}} \tag{3.132}$$

(iii) Transport de k et ε

Avec cette approche, la modélisation des flux turbulents nécessite la connaissance explicite de k et **ε** . Dans le cadre d'un mélange où la fraction massique d'eau reste faible, nous négligerons l'énergie turbulente et le taux de dissipation turbulente dans la phase liquide ($k = X_1\, k_1$, $\boldsymbol{\varepsilon} = X_1\, \boldsymbol{\varepsilon}_1$) pour ne considérer que l'énergie turbulente et le taux de dissipation de la phase gaz.

- L'équation de transport de $X_1\, k_1$ dans la phase gaz s'écrit

$$\frac{\partial\left(\alpha_1 \bar{\rho}_1 k_1\right)}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_j}\left(\alpha_1 \bar{\rho}_1 k_1 \tilde{u}_{j1}\right) = -\frac{\partial}{\partial x_j}\left(\alpha_1 J_{j1}^k + \alpha_1 J_{t,j1}^k\right) + \alpha_1 \bar{\rho}_1 P^k + \alpha_1 \bar{\rho}_1 H^k - \alpha_1 \bar{\rho}_1 \varepsilon_1 + \alpha_1 \Gamma_1^k \tag{3.133}$$

Le flux laminaire et le flux turbulent de k_1 sont aussi fermés par des lois gradient :

$$J_{j1}^k = -D_k \frac{\partial \tilde{k}_1}{\partial x_j}$$
$$J_{t,j1}^k = -D_{kt} \frac{\partial \tilde{k}_1}{\partial x_j} \tag{3.134}$$

Le terme de production de la turbulence s'écrit de la manière suivante :

$$P^k = -\widetilde{u_i'' u_j''} \frac{\partial \tilde{u}_i}{\partial x_j} \tag{3.135}$$

Le terme H^k représente la création/destruction de la turbulence lié au gradient de pression :

$$H^k = G^k + \Theta^k = -\overline{u_{j1}''} \frac{\partial \bar{p}}{\partial x_j} - 2\overline{u_j''} \frac{\partial p'}{\partial x_j} \tag{3.136}$$

Remarque 1 : le terme Θ^k sera par la suite négligé.
Remarque 2 : le terme d'échange de l'énergie turbulente ne sera lui aussi pas pris en compte grâce à l'hypothèse d'une énergie turbulente négligée dans la phase liquide.

- L'équation de transport de X_1 $\boldsymbol{\varepsilon_1}$ dans la phase gaz s'écrit :

$$\frac{\partial\left(\bar{\rho}X_1\varepsilon_1\right)}{\partial t}+\frac{\partial}{\partial x_j}\left(\bar{\rho}X_1k_1\tilde{u}_{j1}\right)=-\frac{\partial}{\partial x_j}\left(\alpha_1J_{j1}^{\varepsilon}+\alpha_1J_{t,j1}^{\varepsilon}\right)$$
$$+\alpha_1\bar{\rho}_1\left(C_\varepsilon^1\frac{\varepsilon_1}{k_1}P^k-C_\varepsilon^2\bar{\rho}_1\frac{\varepsilon_1^2}{k_1}+C_\varepsilon^3\frac{\varepsilon_1}{k_1}H^k\right)+\Gamma_1^{\varepsilon} \quad (3.137)$$

Le terme d'échange Γ_1^{ε} sera lui aussi négligé.

Les constantes du modèle k-**ε** sont données dans le tableau ci contre :

Constantes	C_μ	C_ε^1	C_ε^2	C_ε^3
Valeur	0.009	1.44	1.92	1.44

Tab.3.5 - Valeurs des constantes du modèle k-ε

b. Présentation d'un modèle amélioré prenant compte de l'expansion thermique dans le transport turbulent dans les écoulements réactifs non prémélangés

Dans les conditions représentatives de celles rencontrées dans un incendie, le concept de viscosité turbulente retenu dans les approches de type k-ε a permis de modéliser simplement le flux turbulent par analogie avec la loi de diffusion moléculaire. Cette méthode a l'avantage d'être simple et très robuste car elle augmente le terme de diffusion du scalaire et contribue ainsi à la stabilité des méthodes de résolution numérique. Néanmoins, les lois de type "gradient" utilisées pour représenter les transports turbulents ne sont valables que dans certains cas très simples tels que les écoulements de couches minces cisaillées. Effectivement, ce formalisme consistant à substituer un tenseur (tenseur de Reynolds) par un scalaire (viscosité turbulente) ne peut formellement s'appliquer qu'aux turbulences isotropes .Certains écoulements académiques tel que le jet pariétal (parallèle à une paroi plane et donc dissymétrique) est un très bon exemple qui met en défaut cette approche en gradient. En particulier, les écoulements réactifs sont sujets à de fortes variations de masse volumique qui affectent de manière significative les transports d'espèces chimiques et de quantité de mouvement. Ces phénomènes sont d'autant plus importants que les variations de masse volumique considérées ont lieu dans des zones très fines comparées aux structures turbulentes ; ce qui est souvent le cas dans les écoulements réactifs turbulents. Ainsi, les flux turbulents obtenus à partir des lois de type "gradient" peuvent être opposés aux flux mesurés expérimentalement. Par exemple, les variations de masse volumique dans les écoulements réactifs parfaitement prémélangés, qui ont été très largement étudiés depuis plusieurs décennies, conduisent aux phénomènes bien connus de diffusion turbulente à contre-gradient et à la production de turbulence par la flamme. Dans ces écoulements, les variations de masse volumique affectent d'une part le champ de vitesse, via l'équation de continuité, et d'autre part le champ scalaire, via l'équation d'état. L'équation d'état permet toujours de relier la valeur de la masse volumique à la valeur du scalaire que ce soit dans un écoulement non réactif, un écoulement réactif parfaitement prémélangé ou un écoulement réactif non prémélangé. Ainsi, quel que soit l'écoulement considéré, les fluctuations de vitesse et de scalaire sont fortement corrélées aux fluctuations de masse volumique. Ce sont ces relations que nous allons chercher à établir dans les paragraphes suivants.

Une partie des effets de production de turbulence par les variations de masse volumique et de pression peut être prise en compte via le terme G^k apparaissant dans l'équation de transport pour l'énergie cinétique turbulente. Nous cherchons à proposer, dans un premier temps, une relation entre la moyenne des fluctuations de vitesse $\overline{u''}$ et le flux turbulent d'un scalaire [121] dont dépend la masse volumique. Dans le cadre des flammes non-prémélangé, l'étude se restreindra tout d'abord au modèle à fraction de mélange unique représentant un mélange binaire combustible-comburant. Les limites de cette approche nous conduiront également à proposer une méthode de décomposition du champ de vitesse qui généralisera l'approche pour décrire l'ensemble des flux turbulents. La méthodologie se base sur des travaux récents développés dans le cadre des flammes parfaitement prémélangées [122], [123].

(i) Mise en évidence d'une corrélation vitesse - scalaire - masse volumique

Pour des raisons de simplicité des notations, nous introduisons une variable qui représente l'inverse de la masse volumique : *F=1/ρ*. La moyenne s'écrit $\overline{\rho F} = \overline{\rho}\ \widetilde{F} = 1$ amenant à l'égalité : $\widetilde{F} = 1/\overline{\rho}$.

Cette variable permet aussi d'exprimer la moyenne des fluctuations de vitesse $\overline{u"}$ de la façon suivante :

$$\overline{u"} = \overline{\left(\frac{\rho u"}{\rho}\right)} = \overline{\rho u" F} = \overline{\rho}\widetilde{u"F"} \qquad (3.138)$$

En dépit de son apparente simplicité, cette relation originale établit clairement que le terme $\overline{u"}$ n'est finalement rien d'autre que le flux turbulent du scalaire représentant l'inverse de la masse volumique *F*. De plus, que ce soit dans un écoulement non réactif ou un écoulement réactif parfaitement prémélangés, la loi d'état permet de relier linéairement la variable *F* au scalaire considéré :

$$F = a + b\ \xi$$

avec a = $a = 1/\rho_1$ et $b = 1/\rho_2 - 1/\rho_1$ (3.139)

Dans le cas d'un mélange sans réaction, ρ_1 et ρ_2 sont les masses volumiques respectivement dans chaque écoulement et ξ la fraction de mélange. Dans le cas des flammes parfaitement prémélangées, ρ_1 et ρ_2 sont les masses volumiques respectivement dans les gaz frais et les gaz brûlés et ξ un scalaire réactif représentant l'avancement de la réaction. Finalement, la moyenne des fluctuations de vitesse est directement reliée au flux turbulent du scalaire :

$$\overline{u"} = \overline{\rho}\widetilde{u"F"} = \overline{\rho} b\ \widetilde{u"\xi"} \qquad (3.140)$$

Notons que dans le cadre de modèle du second ordre, les termes de pression des équations de transport pour le flux turbulent scalaire $\widetilde{u"\xi"}$ font intervenir la moyenne des fluctuations du scalaire $\overline{\xi"}$. Ce terme peut être exprimé en utilisant l'équation 3.139 :

$$\overline{\xi"} = \overline{\left(\frac{\rho\xi"}{\rho}\right)} = \overline{\rho\xi" F} = \overline{\rho}\widetilde{\xi" F"} = \overline{\rho} b\ \widetilde{\xi"^2} \qquad (3.141)$$

Le terme $\overline{\xi"}$ n'est finalement rien d'autre que la corrélation croisée entre le scalaire et l'inverse de la masse volumique *F*.

Dans le cas des flammes non-prémélangées, les relations 3.139, 3.140 et 3.141 ne sont plus utilisables car même si le scalaire considéré est passif, la loi d'état ne permet pas de relier linéairement *F* et *ξ*. En effet, si on considère le cas simplifié où la flamme non-prémélangée est composée de flammelettes de diffusion, alors *F* passe par un maximum pour une valeur de fraction de mélange *ξ* proche de la valeur à la stœchiométrie (pour les températures les plus fortes).

Si la fonction *F(ξ)* est connue alors le terme $\overline{u"}$ pourra être relié au flux turbulent $\widetilde{u"\xi"}$ mais aussi à des moments d'ordre supérieur $\widetilde{u"\xi"^n}$ si *F(ξ)* est un polynôme ou aux flux turbulents conditionnés par des valeurs de *ξ* si *F(ξ)* est une fonction linéaire par morceaux [121]. Néanmoins, l'évaluation de ces termes d'ordre supérieur, comme celle des flux turbulents conditionnés, est beaucoup trop compliquée pour être envisagée ici. Une solution simple consiste à relier le terme $\overline{u"}$ au flux turbulent du scalaire via la relation 3.140 mais où on introduit une fonction B au lieu de la constante b :

$$\overline{u"} = \overline{\rho}\widetilde{u"F"} = \overline{\rho} B\ \widetilde{u"\xi"} \qquad (3.142)$$

Si on considère maintenant que la même fonction peut être utilisée dans la relation 3.141 :

$$\overline{\xi''} = \bar{\rho}\widetilde{\xi''F''} = \bar{\rho}B\,\widetilde{\xi''^2} \tag{3.143}$$

alors le terme $\overline{u''}$ s'écrit :

$$\overline{u''} = \bar{\rho}\widetilde{u''F''} = \frac{\overline{\xi''}}{\widetilde{\xi''^2}}\widetilde{u''\xi''} \tag{3.144}$$

Cette dernière expression (3.144) qui a été proposée initialement par Jones [62] a l'avantage de dégénérer naturellement vers la relation exacte (3.140) dès lors que F est une fonction linéaire de ξ.

Utiliser la même fonction *B* dans les relations 3.142 et 3.143 signifie que la moyenne des fluctuations de vitesse $\overline{u''}$ et la moyenne du scalaire $\overline{\xi''}$ sont directement corrélées. Cela semble tout à fait justifié dans les écoulements non réactifs où les fluctuations du scalaire comme celles de vitesse sont uniquement induites par le mélange turbulent. Néanmoins, dans les situations qui nous intéressent, les fluctuations de vitesse, via l'équation de continuité, sont aussi fortement affectées par les variations de masse volumique. Il semblerait donc plus judicieux d'utiliser la fonction B pour exprimer la moyenne des fluctuations $\overline{F''}$ plutôt que pour exprimer la moyenne des fluctuations de $\overline{\xi''}$:

$$\overline{F''} = \overline{\left(\frac{\rho F''}{\rho}\right)} = \overline{\rho F''F} = \bar{\rho}B\widetilde{F''\xi''} \tag{3.145}$$

Finalement, le terme $\overline{u''}$ s'écrit :

$$\overline{u''} = \bar{\rho}\widetilde{u''F''} = \frac{\overline{F''}}{\widetilde{F''\xi''}}\widetilde{u''\xi''} \tag{3.146}$$

Notons que la relation 3.146 est absolument équivalente à la relation 3.140 dès lors que *F* est une fonction linéaire de *ξ*. La relation 3.146 est donc très similaire à celle proposée par Jones mais permet de prendre en compte certains effets dus aux variations de masse volumique spécifiques aux flammes non prémélangées alors que la formule de Jones, utilisée dans ces écoulements, ne prend en compte que des effets induits par le mélange turbulent.

(ii) Première analyse montrant la désorientation des flux turbulent

En pratique, la relation (3.146) permet d'établir un modèle où les effets des variations de masse volumique sur la turbulence, via le terme $\overline{u''}$ dans l'équation pour *k*, et sur le transport du scalaire, via $\widetilde{u''\xi''}$ sont consistants. Dès lors qu'un modèle de fermeture est défini pour l'un de ces deux termes, alors l'autre terme est également fermé. Il ne reste donc plus qu'à choisir sur quel terme nous allons concentrer nos efforts de modélisation : $\widetilde{u''F''}$ ou bien $\widetilde{u''\xi''}$?

En conservant la loi gradient pour les flux turbulents $\widetilde{u''\xi''}$ (3.147), qui semble appropriée pour représenter le mélange turbulent du scalaire passif ξ, il est possible d'évaluer la production de turbulence à l'aide de la relation 3.146.

$$\widetilde{u''\xi''} = -\frac{\nu_t}{Sc_t}\nabla\tilde{\xi} \tag{3.147}$$

Outre l'incapacité de cette loi gradient à représenter les accélérations locales dues aux variations de masse volumique proche de la frontière stœchiométrique, la relation 3.146 fait apparaître une singularité au sein du front de flamme turbulent ; là où la corrélation $\widetilde{F"\xi"}$ peut éventuellement changer de signe. Cette caractéristique est due au changement du signe de la pente de la fonction *F(ξ)* qui est positif côté pauvre et négatif côté riche, voir par exemple [121].

La deuxième solution simple consiste à utiliser une loi gradient pour le flux turbulent $\widetilde{u"F"}$:

$$\widetilde{u"F"} = -\frac{\nu_t}{Sc_t}\nabla\widetilde{F} \qquad (3.148)$$

Ce choix semble plus difficile à justifier car *F* n'est pas un scalaire passif. Pourtant, dans la plupart des simulations, ce terme est modélisé par une loi gradient pour évaluer le terme de production G^k (approche SGDH, par exemple [136])

Le flux turbulent $\widetilde{u"\xi"}$ est alors fermé par la relation (3.146) qui se réécrit :

$$\widetilde{u"\xi"} = \frac{\widetilde{F"\xi"}}{\widetilde{F"^2}}\widetilde{u"F"} \qquad (3.149)$$

On constate que le flux turbulent du scalaire $\widetilde{u"\xi"}$ peut éventuellement changer de signe et donc contredire le résultat qui serait obtenu par le biais d'une loi gradient. Néanmoins, comme la loi gradient utilisée pour modéliser $\widetilde{u"F"}$ change également de signe à la traversée de la flamme avec un volume massique $\widetilde{F}$ maximum - les zones éventuelles où le flux $\widetilde{u"\xi"}$ est contre gradient seront restreintes et localisées au voisinage de la zone stœchiométrique. Ce comportement peut s'interpréter de la manière suivante : si on considère qu'une structure de flamme de diffusion sépare le combustible du comburant, alors le mélange, comme dans une flamme de diffusion, ne s'opère qu'entre le combustible et les gaz brûlés stœchiométriques d'une part et entre le comburant et les gaz brûlés stœchiométriques d'autre part. Ainsi, le mélange direct du combustible et du comburant n'est pas permis. Ce comportement apparaît donc consistant avec la limite des flammes de diffusion.

La figure 3.20 schématise les flux turbulent modélisés avec ou sans la prise en compte de l'expansion thermique dans le cadre unidirectionnel d'une flamme de diffusion (sans diluant), où le scalaire ξ est ici la fraction de mélange associée au combustible β_1. Le comportement de la nouvelle fermeture montre des flux semblables loin de la zone de combustion mais différents dans la zone de combustion.

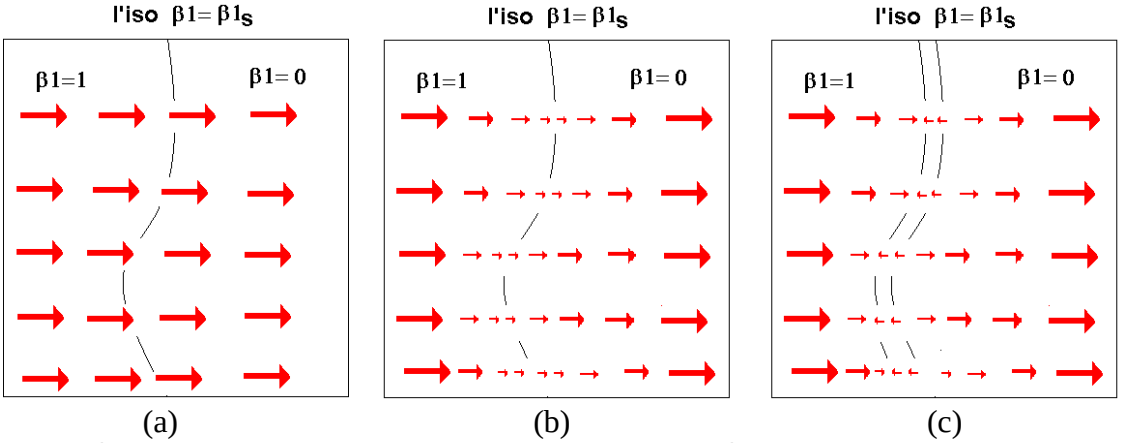


Fig.3.20 - Schématisation unidirectionnelle des flux turbulents de la fraction de mélange - (a) fermeture du flux turbulent par une loi gradient usuel. (b, c) fermeture tenant compte de l'expansion thermique avec ou sans inversion du sens des flux

Pour illustrer, justement la différence de la fermeture classique « loi gradient » et celle prenant compte de l'expansion thermique, nous proposons de les comparer sur le cas d'une flamme jet où les flux turbulents sont assez importants, (Kent [64]). Les premiers résultats (Fig.3.21) montrent que l'évolution des termes $\widetilde{F''\beta_1''}$ et $\widetilde{F''^2}$ ainsi que le gradient de la masse volumique changent l'orientation suivie par le flux turbulent de la fraction de mélange β_1 dans une zone localisée proche du front de flamme.

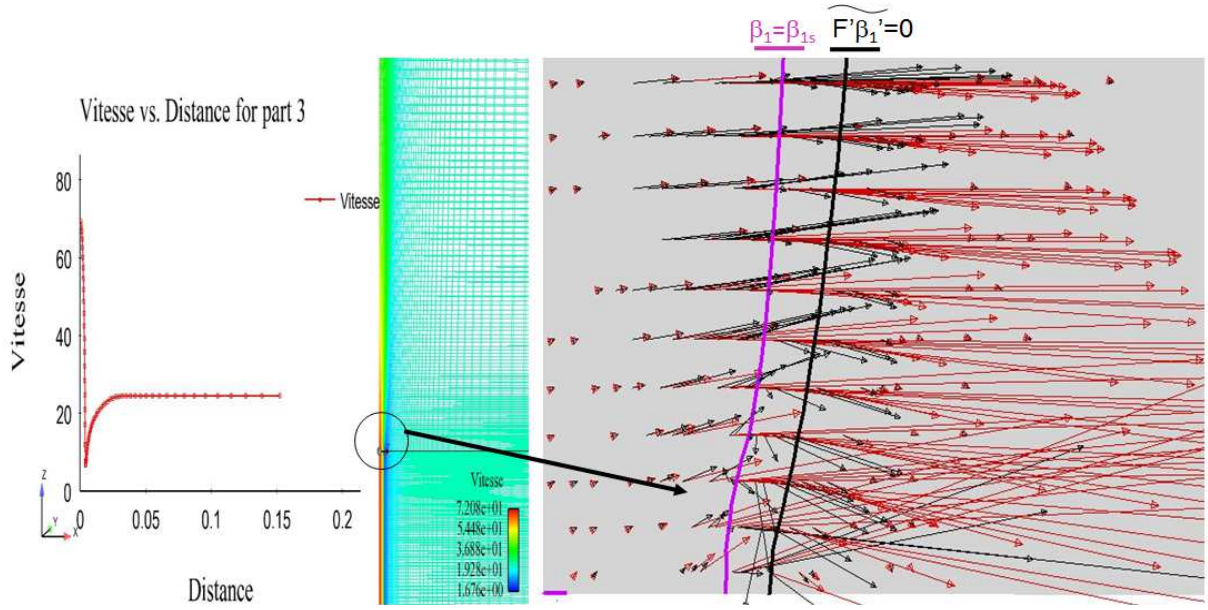


Fig.3.21 - Visualisation des flux turbulents de la fraction de mélange avec un modèle de fermeture usuel de gradient (flèches rouges) et avec le nouveau modèle de fermeture proposé (flèches noires) pour une configuration de flamme jet

NB: Dans ce calcul, les équations de transport ont utilisé les fermetures classiques « loi gradient » pour les flux turbulents. Les flux turbulents via les deux fermetures ont été déterminés en post-traitement, pour être comparés. Le couplage entre la nouvelle fermeture du flux turbulent de la fraction de mélange et l'écoulement n'a pas été mise en œuvre car cette analyse ne rend pas compte des modifications des flux turbulents des autres scalaires ni de celle de la variance de β_1.

Il faut noter que cette analyse ne semble pas prendre en compte le mélange turbulent qui peut mélanger à grande échelle le combustible et le comburant même si localement une structure de flamme de diffusion les sépare. De plus, compte tenu des accélérations locales engendrées par le dégagement de chaleur, la loi gradient n'est probablement adaptée ni à la modélisation du flux turbulent pour le scalaire passif $\widetilde{u''\xi''}$ ni à celle du flux turbulent $\widetilde{u''F''}$. Nous allons donc introduire ci-dessous une approche originale permettant d'identifier séparément les effets du mélange turbulent et des variations de masse volumique. Cette approche est basée sur une décomposition du champ de vitesse introduite récemment ([122], [123]) pour décrire les effets de variations de masse volumique dans les flammes prémélangées.

(iii) Décomposition du champ de vitesse

On considère que le champ de vitesse peut être séparé en deux contributions :

$$u = \mathrm{v} + \mathrm{w} \qquad (3.150)$$

La vitesse *w* est le champ résultant de l'accélération locale directement induite, via l'équation de continuité, par une variation de masse volumique. On considère donc que la norme de ce vecteur augmente de manière proportionnelle à l'inverse de la masse volumique :

$$\|\mathrm{w}\| = \mathrm{k} + \mathrm{sF} \tag{3.151}$$

La valeur maximale de cette norme est atteinte lorsque la masse volumique est la plus faible, c'est-à-dire à la stœchiométrie. Notons que cette affirmation peut-être mise en défaut dans certains cas particuliers tel que celui d'une flamme d'hydrogène dans l'air. La quantité s introduite dans l'équation (3.151) est homogène à un taux de combustion ($kg.m^{-2}.s^{-1}$). Dans le cas de flammes prémélangées la vitesse de réaction est $\rho_r S_L$ [123]. Dans le cas des flammes de diffusion, la vitesse de réaction est proportionnelle à la dissipation scalaire (ou au taux d'étirement) et peut être évalué analytiquement dans certains cas particuliers [78], [79], [110]. Un logiciel de cinétique chimique, par exemple CHEMKIN II, permettrait également de créer une tabulation de la quantité s en fonction du taux de dissipation scalaire. Notons que dans le cas limite des flammes de diffusion étirées à la limite d'extinction, la flamme de diffusion présente certaines similitudes avec la flamme prémélangée stœchiométrique. La vitesse de réaction peut alors être évaluée par le biais de $\rho_{rst} S_{Lst}$ dans ce cas particulier. La relation (3.151), exprimée pour les flammes de diffusion, permet ainsi de retrouver le cas limite d'une flamme de prémélange stœchiométrique et est donc consistante avec les développements déjà établis dans [122], [123] :

$$\|\mathrm{w}\| = \mathrm{k} + \rho_{rst} S_{Lst} F = \mathrm{k} + \frac{\rho_{rst}}{\rho} S_{Lst} = k + S_{Lst}\left(1 + \tau_{st} S_{Lst} c\right). \tag{3.152}$$

La constante k est égale à 0 et $-S_{Lst}$ respectivement dans les études précédentes [122] et [123].

Nous choisissons ici k = 0 afin de simplifier les écritures :

$$\|\mathrm{w}\| = \mathrm{s}\, F \tag{3.153}$$

Finalement, la norme $\|\mathrm{w}\|$, exprimée par la relation (3.153) représente l'accélération induite par la variation de masse volumique due à la réaction chimique.

Nous introduisons maintenant un vecteur unitaire m_w qui caractérise l'orientation du vecteur w :

$$\mathrm{w} = \|\mathrm{w}\|\, m_{\mathrm{w}} \tag{3.154}$$

Pour représenter les effets de l'expansion, sa direction est la même et son sens opposé au gradient local de masse volumique :

$$m_{\mathrm{w}} = \frac{-\nabla\rho}{\|\nabla\rho\|} = \frac{\nabla F}{\|\nabla F\|} \tag{3.155}$$

Finalement, la décomposition proposée ici est formellement identique à celle proposée dans [123]. Les conséquences de cette décomposition sont donc les mêmes. Deux effets de l'expansion sont ainsi identifiés : l'effet direct via le champ de vitesse w et l'effet indirect qui représente l'accélération induite sur le champ v par les courbures des lignes de courant. Dans les flammes de diffusion considérées ici, comme le champ de vecteur w du côté combustible et le champ de vecteur *w* du côté comburant convergent tous les deux vers la zone de réaction (stœchiométrie), alors les courbures des lignes de courant risquent d'être très importantes dans cette zone. L'effet indirect de l'expansion est donc susceptible d'être très important et ne peut en aucun cas être négligé.

Cette méthode de décomposition du champ de vitesse à l'avantage de séparer les effets sur le champ de vitesse du mélange turbulent et de l'expansion thermique. En pratique, cette méthode permet aussi de proposer un modèle algébrique simple prenant en compte la production de turbulence et la modification des flux turbulents scalaires induites par les variations de masse volumique. Le modèle le plus abouti a été proposé dans le cas des flammes parfaitement prémélangées. Dans le cas des flammes non prémélangées, ce modèle est présenté sur la figure 3.22. Ainsi, le flux turbulent scalaire $\widetilde{u''\xi''}$ et l'augmentation d'énergie cinétique turbulente due à la flamme peuvent être évalués par des modèles algébriques simples. Ils nécessitent néanmoins de transporter la variance du scalaire passif $\widetilde{\xi''^2}$ et de connaître la PDF *P(ξ)* ainsi que la loi d'état *F(ξ)* qui permettront de calculer les corrélations $\widetilde{F''^2}$ et $\widetilde{F''\xi''}$.

Notons que les flux turbulents apparaissant dans l'équation pour la variance : $\widetilde{u''\xi''^2}$ peuvent également être fermés en utilisant la même méthodologie.

Le flux turbulent du scalaire est finalement modélisé par :

$$\widetilde{u''\xi''} = \frac{\nu_t}{\sigma_t}\nabla\tilde{\xi} + s\lambda\left(1 + \psi\right)\widetilde{F''\xi''}M \tag{3.156}$$

où s représente le taux de consommation unitaire par unité de surface de flamme, *ψ* est une constante de modélisation représentant la part de l'effet indirect sur le flux, *λ* caractérise les fluctuations d'orientation des vecteurs et *M* est un vecteur unitaire définissant l'orientation de la part du flux qui est due aux effets de l'expansion (on a fait l'hypothèse que $\lambda M = \tilde{m} = \tilde{m}_v = \tilde{m}_w$). Plus de détails concernant ce paramètre sont fournis dans les références [123] et [124]. De la même manière, l'énergie cinétique turbulente s'écrit :

$$\tilde{k} = \tilde{k}_{vT} + \frac{1}{2}s^2\left(1+\psi^2\right)\left[\widetilde{F''^2} + \tilde{F}^2\left(1-\lambda^2\right)\right] \tag{3.157}$$

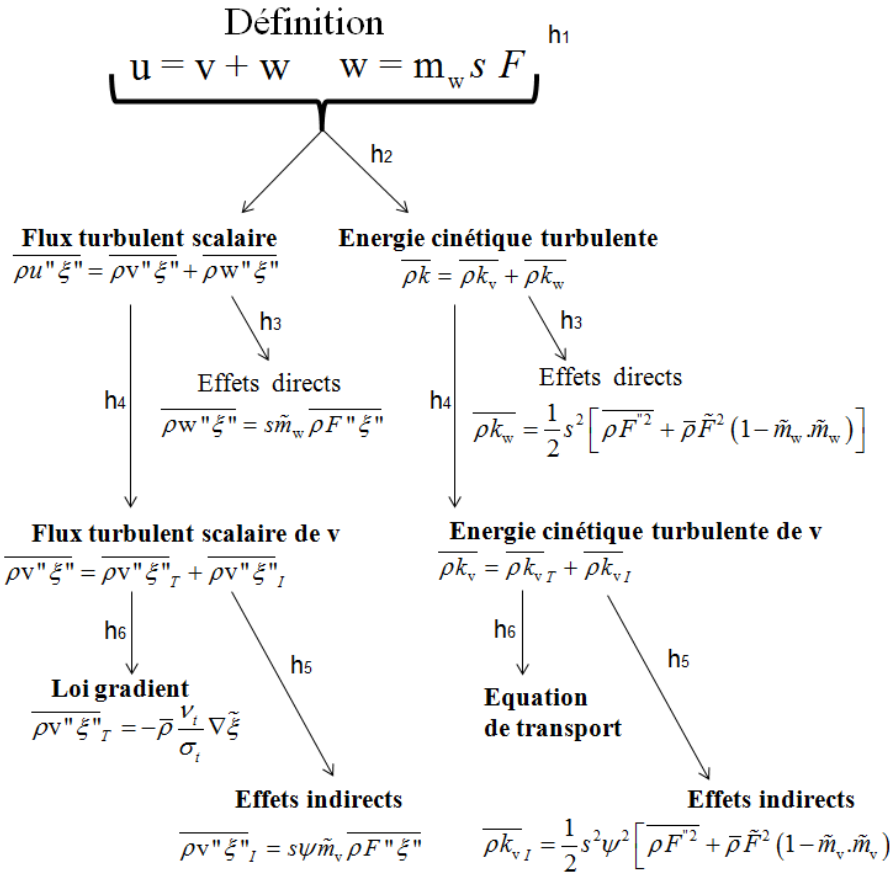
où k_{vT} est résolue par une équation de transport qui utilise les mêmes fermetures que celles des écoulements non réactifs. Le terme de flux turbulent associé au transport de la variance du scalaire est donc :

$$\widetilde{u''\xi''^2} = \frac{\nu_t}{\sigma_t}\nabla\widetilde{\xi''^2} + s\lambda\left(1 + \psi\right)\widetilde{F''\xi''^2}M \tag{3.158}$$

Ce modèle de flamme turbulente non prémélangée fournit finalement une fermeture algébrique complète et consistante des différents termes de transports turbulents inconnus apparaissant dans les équations moyennes. Ce modèle est capable de prendre en compte les effets de l'expansion aussi bien sur les flux scalaires que sur l'énergie cinétique turbulente.

L'équation (3.157) permet de calculer directement l'augmentation d'énergie cinétique turbulente.
Néanmoins, il peut s'avérer préférable d'évaluer cette augmentation en modifiant les termes de pression dans l'équation pour *k* (ce qui est proposé dans le paragraphe précédent) plutôt qu'en utilisant une formule algébrique. Dans, ce cas nous devons aussi exprimer le flux turbulent $\widetilde{u''F''}$ (cf.III.2.6.b.ii). La méthodologie proposée ici conduit à :

$$\widetilde{u''F''} = \frac{\nu_t}{\sigma_t}\nabla\tilde{F} + s\lambda\left(1 + \psi\right)\widetilde{F''^2}M \tag{3.159}$$



Hypothèses
h1 : Régime de flammelettes de diffusion, s : taux de combustion unitaire
h2 : Corrélation croisée $\widetilde{v''w''}$ *négligeable*
h3 : Corrélations croisées $\widetilde{c''m''}$, $\widetilde{c''s''}$, $\widetilde{s''m''}$ *et* $\widetilde{c''m''s''}$ *négligeables*
h4 : Décomposition du flux turbulent scalaire turbulent k_v *en partie turbulente (T) et partie d'expansion indirecte (I)*
h5 : Analogie avec les effets directs, ψ est une constante de modélisation
h6 : Analogie avec le transport turbulent à masse volumique constante

Fig.3.22 - Modèle de transport turbulent dans les flammes non prémélangées

Notons que si nous négligeons le premier terme des membres de droite des équations (3.156) et (3.159) (les lois gradients qui représentent le mélange turbulent) pour ne conserver que les effets de l'expansion sur les flux turbulents, alors le rapport de ces deux équations conduit à :

$$\frac{\widetilde{u''F''}}{\widetilde{u''\xi''}} = \frac{s\lambda(1+\psi)\widetilde{F''^2}M}{s\lambda(1+\psi)\widetilde{F''\xi''}M} = \frac{\widetilde{F''^2}}{\widetilde{F''\xi''}}$$

ce qui se réécrit :

$$\overline{u''} = \frac{\overline{F''}}{\widetilde{F''\xi''}}\widetilde{u''\xi''} \qquad (3.160)$$

Cette méthodologie permet donc de confirmer la cohérence de la relation (3.146) établie au paragraphe précédent.

Le modèle décrit dans ce paragraphe possède l'avantage d'être facile à mettre en œuvre car les fermetures proposées sont algébriques. De plus, les différents termes de transport turbulent sont ainsi consistants et compatibles avec la limite des flammes de diffusion. Le modèle permet donc d'évaluer simplement la production de turbulence par la flamme comme les effets éventuels de diffusion turbulente à contre gradient. La désorientation du flux turbulent du scalaire montre par la même occasion que la fermeture classique loi gradient, sur-prédit le terme de création de variance. L'expansion thermique peut aboutir à une réduction de ce terme de production, voir, dans le cas de flux turbulent à contre gradient, de diminuer la variance. Néanmoins, un certain nombre d'hypothèses simplificatrices ont été nécessaires pour aboutir à ce modèle et différents paramètres de modélisation ont été introduits. Des travaux sont donc encore nécessaires pour améliorer cette représentation et relier ces paramètres à des quantités connues. La difficulté la plus importante de cette approche reste l'évaluation de l'orientation des vecteurs que ce soit au niveau local, via m_w, ou au niveau moyen, via M. En effet, la définition introduite par l'équation (3.155) ne permet pas de déterminer cette orientation du vecteur w en dehors des zones de variation de la masse volumique alors que la norme de ce vecteur n'est pas nulle dans ces zones. L'orientation moyenne M reste elle-aussi très difficile à évaluer car ce vecteur est affecté aussi bien par l'expansion thermique dans la zone de combustion que par les modifications des lignes de courant induites par la présence de parois (confinement). Une approche envisageable serait d'introduire un potentiel de vitesse (Strahle [133]) caractérisant les effets de l'expansion.

Dans le cadre de l'étude global introduite par nos travaux sur la modélisation de l'interaction d'une flamme et d'un brouillard d'eau, cette approche, nécessitant un travail d'approfondissement, ne sera pas mis en œuvre. Mais, elle nous permet de proposer certaines conclusions très intéressantes.

- Dans un écoulement à masse volumique variable, l'équation de continuité et l'équation d'état imposent que les fluctuations de vitesse, de masse volumique (ou son inverse) et de scalaire sont fortement corrélées.

- Dans le cas particulier où la loi d'état F(ξ) est une fonction linéaire, la formule de Jones (3.144) [62] permet de relier le flux turbulent du scalaire ξ au flux turbulent du volume massique F.

- Lorsque la fonction F(ξ) est quelconque, la formule (3.146), plus générale que celle de Jones, permet d'évaluer les relations entre ces flux turbulents.

- La méthode de décomposition du champ de vitesse permet d'identifier et de traiter séparément les effets dus au mélange turbulent d'une part et les effets dus au dégagement de chaleur d'autre part.

- Ce modèle peut être introduit pour l'ensemble des transports moyens en reliant l'ensemble des flux turbulents à la vitesse de réaction des flammes locales considérées mais aussi au taux de dissipation scalaire.

III.2.7. Fermeture des termes sources liés aux échanges interfaciaux

a. Les termes sources interfaciaux pour les fractions massiques

Dans l'équation des fractions massiques X_1 et X_2, le flux de masse $\Gamma_1 = -\Gamma_2$ peut être modélisé via l'étude préliminaire de l'évaporation d'une goutte unique et isolé (Chapitre Phénoménologie).
L'équation 2.37 définit le débit d'évaporation d'une goutte isolée. Si N_p représente le nombre de gouttes par kilogramme de mélange, il est donc possible de déterminer le flux de masse égal à :

$$\begin{aligned}\Gamma_2 = N_p \dot{m}_p &= -2\pi N_p R_p \rho_f D_{vap} Sh \ \ln\left(1+B_M\right) \\ &= \frac{-6D_{vap}}{4R_p^2}\frac{\rho_f}{\rho_p} Sh \ \ln\left(1+B_M\right) X_2\end{aligned} \qquad (3.161)$$

b. Les termes sources interfaciaux pour les fractions de mélange

En ce qui concerne les équations de transport des fractions de mélange $\tilde{\beta}_1, \tilde{\beta}_2$, il est possible (au même titre que pour les produits) de négliger les transferts de combustible et de comburant à l'interface. Cela suppose que $\Gamma_{\beta 1} = \Gamma_{\beta 2} = 0$

En ce qui concerne le transport de $\tilde{\beta}_3$, les échanges interfaciaux de vapeur d'eau issue de l'évaporation peuvent s'exprimer suivant l'expression 3.108 :

$$\begin{aligned}\Gamma_{\beta_3} = \left\langle \gamma_{\beta_3} \right\rangle &= \left\langle -\left[\rho \beta_n \left(u_j - u_{sj} \right) + J_j^{\beta_n} \right] n_{1,\mathrm{j}} \delta_1 \right\rangle \\ &= \left\langle -\left[\beta_1 \gamma_1 + J_j^{\beta_1} \right] n_{1,\mathrm{j}} \delta_1 \right\rangle \\ &= \iint \left(\beta_n \gamma_1 + J_j^{\beta_n} \right) n_{2,\mathrm{j}} dS\end{aligned}$$

(3.162)

Si on suppose la contribution de chaque goutte comme la résolution d'un problème isolé à symétrie sphérique, cette expression se simplifie ainsi :

$$\Gamma_{\beta_3} = \left\langle \gamma_{\beta_3} \right\rangle = N_p \left(\beta_3 \Gamma_1 - 4\pi R_p^2 \rho_f D_{vap} \frac{\partial y_{vap}}{\partial r} \right)_{R_p} \tag{3.163}$$

Or l'expression 2.40 permet de définir exactement le second membre de cette expression :

$$\Gamma_{\beta_3} = N_p \dot{m}_{vap} = \Gamma_1 \tag{3.164}$$

En conclusion nous proposerons une formulation plus générale,

$$\Gamma_{\beta_n} = \Gamma_1 \beta_{\Gamma n} \tag{3.165}$$

Avec dans notre cas $\beta_{\Gamma 1} = 0,\ \beta_{\Gamma 2} = 0,\ \beta_{\Gamma 3} = 1$.

Remarque : nous aurions pu permettre au combustible et au comburant de franchir l'interface et, dans ce cas les constantes $\beta_{\Gamma 1}, \beta_{\Gamma 2}, \beta_{\Gamma 3}$ auraient été modifiées. Seule leur somme doit rester unitaire pour être conservatif.

c. Les termes sources interfaciaux pour les variances

En reprenant l'expression 3.110 et en l'intégrant sur la surface de chaque goutte (attention à la direction de la normale), il est possible de formuler l'expression suivante :

$$\begin{aligned}\Gamma_{\widetilde{\beta_n''^2}} &= -\left(2\Gamma_{\beta n} \left(\beta_n^{cl} - \tilde{\beta}_n \right) + \Gamma_1 \left(\tilde{\beta}_n^2 - \left(\beta_n^{cl} \right)^2 \right) \right) \\ &= 2\Gamma_1 \beta_{\Gamma n} \left(\tilde{\beta}_n - \beta_n^{cl} \right) + \Gamma_1 \left(\beta_n^{cl} - \tilde{\beta}_n \right) \left(\tilde{\beta}_n + \beta_n^{cl} \right) \\ &= \Gamma_1 \left(\tilde{\beta}_n - \beta_n^{cl} \right) \left(\tilde{\beta}_n - 2\beta_{\Gamma n} + \beta_n^{cl} \right)\end{aligned} \tag{3.166}$$

Ici, la valeur β_n^{cl} représente la valeur de la fraction de mélange sur l'interface.

Remarque : compte tenu que β_n^{cl} est compris entre $\tilde{\beta}_n$ et $\beta_{\Gamma n}$, il est possible d'écrire :

$$\beta_n^{cl} = m\tilde{\beta}_n + (1-m)\beta_{\Gamma n} \tag{3.167}$$

Dans ce cas, m est compris entre zéro et l'unité et le terme de production de la variance est toujours positif :

$$\Gamma_{\widetilde{\beta_n''^2}} = \Gamma_1 \left(1-m^2\right)\left(\beta_{\Gamma n} - \tilde{\beta}_n\right)^2 \tag{3.168}$$

Dans la partie phénoménologie, l'étude de l'évaporation d'une goutte isolée nous permet d'évaluer β_n^{cl} (analogie avec la résolution d'un flux de vapeur avec un nombre de Lewis égal à l'unité) :

$$\beta_n^{cl} = \beta_{\Gamma n} - (\beta_{\Gamma n} - \tilde{\beta}_n) e^{\frac{-\dot{m}}{ShR_p \rho_1 D_{\beta n}}} \tag{3.169}$$

Dans ce cas, la valeur du paramètre m vaut :

$$m = e^{\frac{-\dot{m}}{ShR_p \rho_1 D_{\beta n}}}$$

Il est nécessaire de bien mettre en évidence le défaut de cette fermeture. En effet pour donner une valeur à β_n^{cl}, l'intégration utilise une valeur de β_n à l'infini (en dehors de la couche limite diffusionelle) égal à $\tilde{\beta}_n$. Or, lorsque la ségrégation est forte dans le gaz, chaque goutte d'eau est entourée d'un gaz composé de paquets dissociés de carburant, de comburant et de diluant. Si on suppose le temps caractéristique du mélange turbulent très petit par rapport au temps caractéristique de l'évaporation, cette hypothèse sera consistante. Cependant, pour de fort taux d'évaporation, cette hypothèse n'est plus valide et génère une production trop forte de variance et une ségrégation susceptible d'être telle que la ségrégation dépasse l'unité.

C'est pour cette raison que sous hypothèse de diffusion turbulente, nous proposons une correction pour la fermeture de β_n^{cl} en introduisant s_{β_n} la ségrégation de β_n dans la formulation du paramètre m :

$$m = e^{\frac{-\dot{m}}{ShR_p \rho_1 D_{\beta n}}} \sqrt{1 - s_{\beta n}^2 \left(1 - e^{\frac{2\dot{m}}{ShR_p \rho_1 D_{\beta n}}}\right)} \tag{3.170}$$

Dans ce cas, le terme source de la variance s'écrit :

$$\Gamma_{\widetilde{\beta_n''^2}} = \Gamma_1 \left(1 - e^{\frac{-2\dot{m}}{ShR_p \rho_1 D_{\beta n}}}\right)\left(1 - s_{\beta n}^2\right)\left(\beta_{\Gamma n} - \tilde{\beta}_n\right)^2 \tag{3.171}$$

Remarque :

- A ségrégation nulle, nous retombons bien sur la formulation du terme source pour la variance en diffusion laminaire.
- Plus la ségrégation tend vers 1, plus le terme source tend vers zéro, ce qui empêche la ségrégation de dépasser l'unité (sous réserve d'impliciter ce terme source)

d. Les termes sources interfaciaux pour les enthalpies

En ce qui concerne les équations de transport des enthalpies massiques de l'eau et du gaz $\tilde{h}_1, \tilde{h}_2$, les échanges interfaciaux s'expriment suivant l'expression 3.107. Le terme Π_2 représente l'apport d'énergie permettant l'échauffement de la goutte. C'est-à-dire l'ensemble de l'énergie apportée moins l'énergie perdue pour transformer l'eau liquide en eau vapeur. Effectivement cette dernière énergie n'est pas comptabilisée car elle se retrouve finalement dans la phase gaz portée par la vapeur formée.

D'après l'étude thermique d'une goutte isolée (Eq.2.41), il est possible d'évaluer ce terme avec l'expression suivante :

$$\begin{aligned}\Pi_2 &= N_p \dot{Q}_l = N_p(\dot{Q}_p - \dot{m}_{vap} h_{vap}(T_2)) \\ &= 2\pi R_p N_p \lambda_f Nu \frac{\ln(1+B_T)}{B_T}(T_\infty - T_s) - N_p \dot{m}_{vap} h_{vap}(T_2) \\ &= 6\frac{X_2}{4R_p^2}\lambda_f Nu \frac{\ln(1+B_T)}{B_T}(T_\infty - T_s) - \Gamma_1 h_{vap}(T_2)\end{aligned} \quad (3.172)$$

Remarque : le terme Π_1 nécessaire au transport de la phase gaz est égale à l'opposé de Π_2

III.2.8. Récapitulatif des variables transportées

Une fois les modèles de fermetures établies, moyennant l'égalisation des coefficients de diffusion scalaire et de dispersion phasique ($D_{\psi t} = D_{12t}, D_\psi = D_{12}$), il est possible de choisir de transporter les variables $\Psi_X = X_\phi \tilde{\psi}_\phi$ en résolvant les équations définies ainsi :

$$\frac{\partial(\bar{\rho}\,\Psi_X)}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_j}\left(\bar{\rho}\left(\tilde{u}_j + U^g_{j,\phi}\right)\Psi_X\right) = \frac{\partial}{\partial x_j}\left(\bar{\rho}(D + D_t)\frac{\partial \Psi_X}{\partial x_j}\right) + TS_{\Psi_X} \quad (3.173)$$

Remarque 1 : Le nombre de gouttes par kilogramme de suspension est nécessaire à la reconstitution du diamètre des gouttes, si nous négligeons les coalescences et les fragmentations, cette équation de transport ne fait intervenir aucun terme source. Ce scalaire est transporté par la phase liquide, son transport s'écrit donc de la manière suivante :

$$\frac{\partial(\bar{\rho} N_p)}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_j}\left(\bar{\rho} N_p\left(\tilde{u}_j + U^g_{j,\phi}\right)\right) = \frac{\partial}{\partial x_j}\left(\bar{\rho}(D + D_t)\frac{\partial N_p}{\partial x_j}\right) \quad (3.174)$$

Remarque 2 : Dans le récapitulatif des variables transportées, nous généralisons la méthode à un spray polydisperse contenant *Nc* classe de gouttes.

	Quantité Ψ_X	Convection	Terme source TS_{Ψ_X}
Phase liquide			
Fraction massique de la classe c par kg de suspension	X_2^c	$\tilde{u}_j + u_{j\infty}^c - \sum_k X_2^k u_{j\infty}^k$	$\Gamma_2^c = \frac{-6D_{vap}}{4R_p^2}\frac{\rho_f}{\rho_p} Sh \ \ln(1+B_M) X_2$
Nombre de gouttes de la classe c par kg de suspension	N_p^c		0
Enthalpie de la classe c	$X_2^c \ \tilde{h}_2^c$		$\Pi_2^c = \Gamma_{h2diff}^c + \Gamma_{h2vap}^c$ $6\frac{X_2^c}{(4R_p^c)}\lambda_f Nu \frac{\ln(1+B_T)}{B_T}(T_1 - T_2^c) + \Gamma_2^c h_{vap}(T_2^c)$
Phase gaz			
Fraction de mélange moyenne de combustible	$X_1 \ \tilde{\beta}_1$	$\tilde{u}_j - \sum_k X_2^k u_{j\infty}^k$	$\Gamma_1 \beta_{\Gamma 1} = -\beta_{\Gamma 1}\sum_c \Gamma_2^c = 0$ $\beta_{\Gamma 1} = 0$
Fraction de mélange moyenne de comburant	$X_1 \ \tilde{\beta}_2$		$\Gamma_1 \beta_{\Gamma 2} = -\beta_{\Gamma 2}\sum_c \Gamma_2^c = 0$ $\beta_{\Gamma 2} = 0$
Fraction de mélange moyenne de diluant	$X_1 \ \tilde{\beta}_3$		$\Gamma_1 \beta_{\Gamma 3} = -\beta_{\Gamma 3}\sum_c \Gamma_2^c$ $\beta_{\Gamma 3} = 1$
variance du combustible	$X_1 \ \widetilde{\beta_1''^2}$		$\Gamma_{\widetilde{\beta_n''^2}} = \Gamma_1(1-m^2)(\beta_{\Gamma n} - \tilde{\beta}_n)^2$; $Ts_{prod}^{\widetilde{\beta_n''^2}} = 2\bar{\rho} X_1 D_t \left(\frac{\partial \tilde{\beta}_n}{\partial x_j}\right)^2$; $Ts_{diss}^{\widetilde{\beta_n''^2}} = -\bar{\rho}\frac{X_1 \ \widetilde{\beta_n''^2}}{\tau_t}$
variance du comburant (optionnelle)	$X_1 \ \widetilde{\beta_2''^2}$		
variance du diluant (optionnelle)	$X_1 \ \widetilde{\beta_3''^2}$		
Fraction massique des produits par kg de suspension	$X_1 \ \tilde{y}_P$		$\alpha_1 \overline{\dot{\omega}_P} = \frac{\bar{\rho}}{\tau_r}\min\left(\left(X_1 \tilde{y}_P^{pred} - X_1 \tilde{y}_P\right), 0\right)$
Enthalpie du gaz	$X_1 \ \tilde{h}_1$		$\Pi_1 = -\sum_c \Pi_2^c$

Tab.3.6 - Récapitulatifs des termes introduits pour les équations locales après la modélisation des flux laminaires

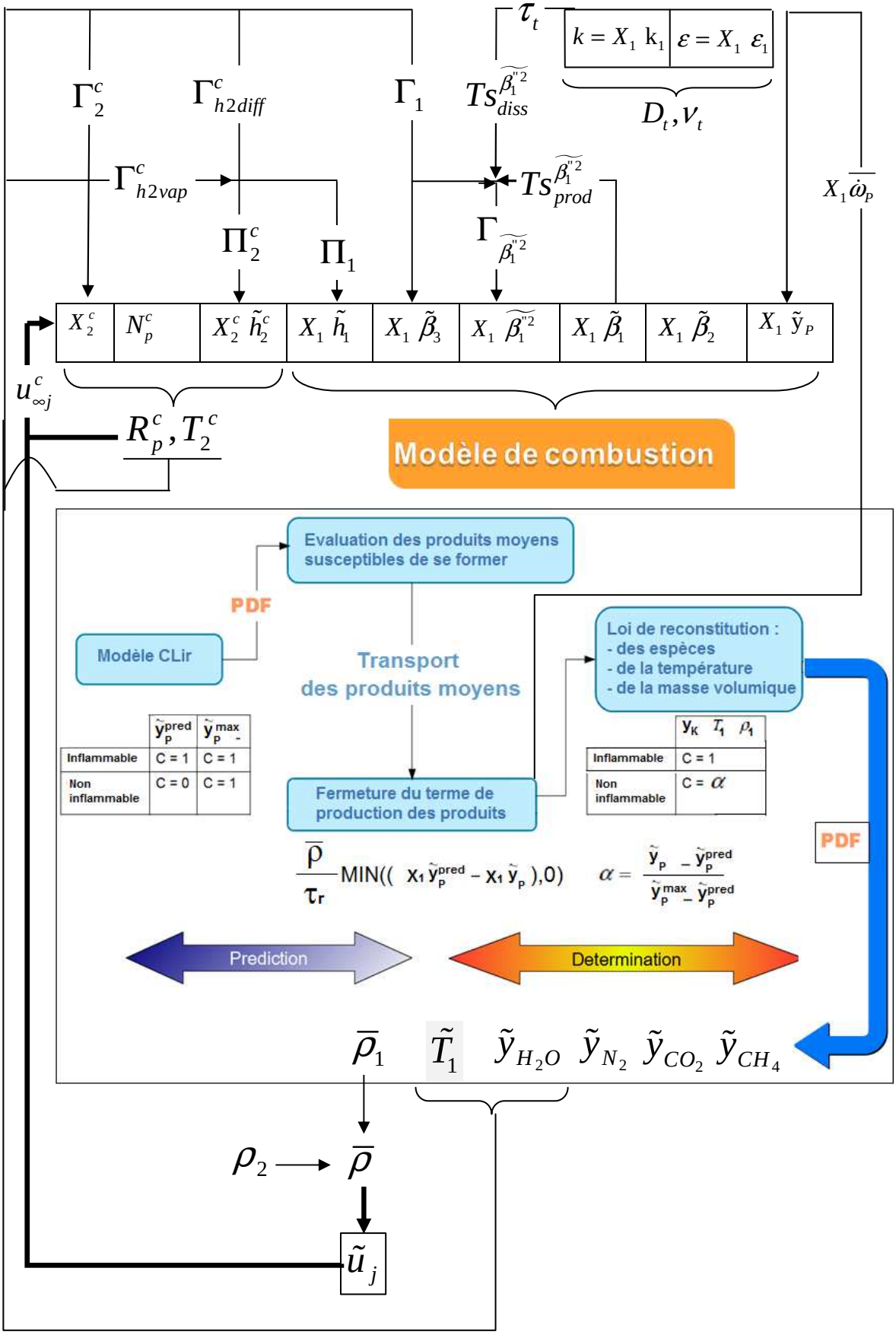


Fig.3.23 - Schéma représentatif du modèle global décrivant l'interaction entre la phase liquide et le modèle de combustion

IV. RESULTATS

IV.1. Cas tests unitaires de validation des physiques introduites

Dans un premiers temps, nous cherchons à vérifier que le modèle reproduit correctement le comportement désiré. C'est pourquoi des études de cas tests unitaires sont un pré-requis nécessaire à la validation des développements introduits. Dans le but d'évaluer séparément les effets de chaque phénomène physique mis en jeu, chacun des cas tests se focalise sur un phénomène unique. Ceci nous permettra de comprendre les effets dissociés de chacun de ces phénomènes physiques régissant l'extinction lors de la pulvérisation d'un spray en présence d'un foyer incendie. En particulier, nous analyserons les effets des limites d'inflammabilité introduites dans le modèle de combustion, le comportement des transferts de masse, de chaleur ainsi que le taux de pénétration des gouttes en fonction de leur taille.

IV.1.1. Evaluation du modèle de combustion à limite d'inflammabilité

Dans l'élaboration du modèle de combustion, certaines hypothèses ont permis d'établir un critère d'inflammabilité en fonction d'une température de cross-over. Pour évaluer le comportement de ce modèle, il convient de répondre à certaines interrogations :

- Quelles sont les modifications apportées par ce modèle de combustion comparativement au modèle à chimie infiniment rapide?
- Quelles phénoménologies ce modèle est-il capable de représenter?
- Quel est le comportement du modèle de combustion lorsque le taux de dilution augmente?
- Quelle est le rôle de la nature du diluant?
- Qu'en est-il du comportement du modèle lorsque les réactifs sont introduits à des températures différentes?

a. Présentation des cas tests

Dans le cadre d'une validation, nous nous appuierons sur des cas tests unitaires où la dynamique est régie par la convection forcée. L'analyse se fera sur des flammes de jets co-courants et contre-courants de méthane (CH4) et d'air plus ou moins dilué en vapeur d'eau ou en azote. Ces cas tests numériques sont effectués sur un domaine axisymétrique dont les caractéristiques sont décrites dans la figure ci-dessous.

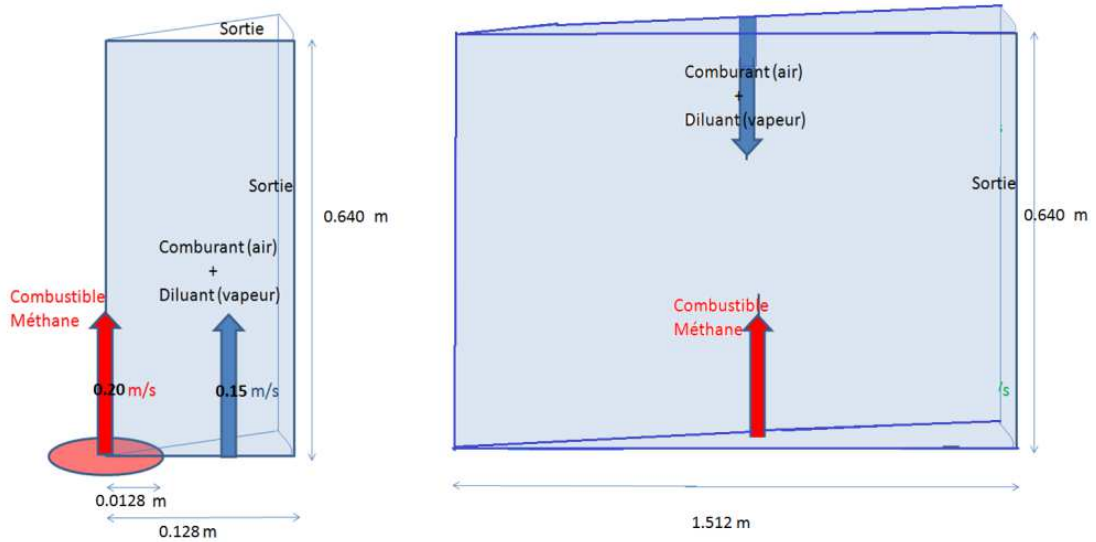


Fig.4.1 - Schématisation des cas test unitaires de flamme de diffusion en configuration « co-courant » et « contre-courant »

En ce qui concerne la configuration co-courant, le profil de vitesse sera considéré uniforme dans chacune des entrées avec une vitesse égale à 0.20 $m.s^{-1}$ dans l'injecteur combustible de rayon 0.0128 m et de 0.15 $m.s^{-1}$ pour le « co-flow » situé entre son rayon interne de 0.0128 m et son rayon externe de 0.128m. Les conditions de symétrie axiale seront respectées sur les faces latérales et des conditions de sortie seront imposées sur l'extérieur du canal et au niveau de la partie supérieure du canal à une altitude de 0.640 m. La taille du domaine est de 0.128 m × 0.640 m avec un maillage dont on définira la taille (nombre et taille des cellules) après une étude paramétrique de convergence en maillage.

En ce qui concerne la configuration contre-courant, la partie inférieure du canal est le lieu d'une injection ascendante de combustible dilué à l'azote pour superposer l'iso-fraction de mélange stœchiométrique avec le plan de stagnation. La partie supérieure (altitude de 0.640 m) est une injection « comburant (air)» avec un profil de vitesse descendant. Les conditions de symétrie axiale seront au niveau des surfaces latérales et une condition de sortie sera imposée sur l'extérieur du canal. La dilution du comburant sera dans ces deux configurations, homogène en espace et fixera la valeur des limites d'inflammabilité dans le mélange réactionnel. Cela étant, nous cherchons à bien comprendre les effets de dilution et de température des réactifs sur la cinétique (comportement des limites d'inflammabilité) ainsi que les effets de la dynamique sur le micro-mélange. Les résultats nous permettront d'analyser le comportement du modèle sur la flamme.

b. Comportement du modèle

- **Convergence en maillage**

Pour bien évaluer les caractéristiques du modèle établi, une première étape consiste à vérifier la convergence en maillage du modèle de combustion à limite d'inflammabilité. La configuration co-courante sera choisie avec un maillage homogène dont les cellules seront de taille 0.0128 m, 0.0064 m, 0.0032 m, 0.0016 m, 0.0008 m et 0.0004 m. L'entrée comburante sera dans ce cas de l'air non dilué et le carburant du méthane pur.

Configuration « co-courant » Fig.4.1							
		Cas 1	Cas 2	Cas 3	Cas 4	Cas 5	Cas 6
$n_x \times n_y$		10×50	20×100	40×200	80×400	160×800	360×1600
Δx (m)		0,0128 m	0,0064 m	0,0032 m	0,0016 m	0,0008 m	0,0004 m
Entrée combustible (CH4)	U	0,20 m/s					
	k, ε	$2.16\ 10^{-2}\ m^2s^{-2}$ $6.2\ 10^{-1}\ m^2s^{-3}$					
	$\beta_1\ \beta_2\ \beta_3$	1 0 0					
	T_1	300 K					
Entrée oxydant (air)	U	0,15 m/s					
	k, ε	$7.6\ 10^{-4}\ m^2s^{-2}$ $8.2\ 10^{-4}\ m^2s^{-3}$					
	$\beta_1\ \beta_2\ \beta_3$	0 1 0					
	T_1	300 K					

Tab.4.1 - Caractéristiques de l'ensemble des cas liés à l'étude de convergence en maillage

Nous comparerons, pour estimer la convergence, les résultats suivants :

- les profils de ségrégation du combustible aux altitudes respectives : 0.1 m, 0.2 m et 0.3 m.
- les profils de vitesse aux mêmes altitudes.

On remarque dans la figure 4.2 que les profils de vitesse convergent vers des profils donnés pour une taille de maille relativement large (0,0064 m). Pourtant, la résolution de la vitesse est directement reliée au calcul de la masse volumique, elle-même dépendante du transport de la fraction de mélange et de sa variance. Cette configuration co-courante est régie principalement par les effets de convection forcée, ce qui explique cette diminution rapide de l'erreur pour un maillage relativement grossier.

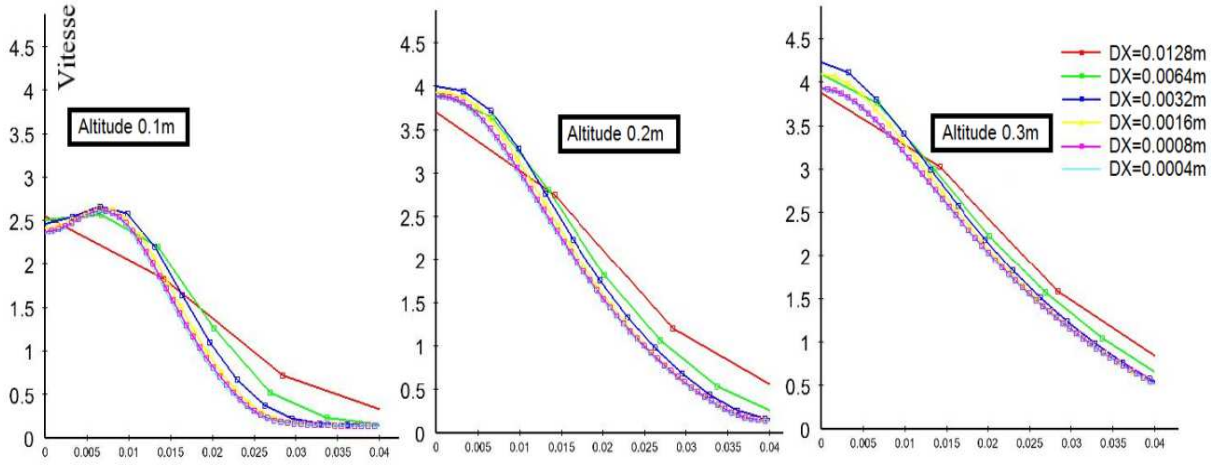


Fig.4.2 - Résultats numériques de la composante verticale de la vitesse aux altitudes 0.1 m, 0.2 m et 0.3 m d'une flamme de diffusion en configuration co-courante (avec raffinement de maillage)

On constate que les profils de la ségrégation (normalisation de la variance par la variance maximale) dans la figure 4.3, ont aussi tendance à converger lorsque la taille de maille diminue. Ceci atteste bien de la convergence en maillage pour les scalaires transportés (ici un moment du second ordre). Pour les altitudes les moins élevées, la convergence est moins évidente. Ceci s'explique par des termes de création et dissipation de la variance dominant à la base du co-flow, là où le cisaillement est le plus important et là où les erreurs sur le gradient influeront de manière plus conséquente sur le calcul. En conclusion, il est nécessaire, dans cette configuration, d'avoir des mailles d'une taille maximum de 8.10^{-4} m (8% du diamètre hydraulique) pour que le maillage n'est plus trop d'influence sur les résultats. Cela veut dire que la règle pratique de mettre 10 points dans un jet constitue bien une bonne mesure pour les critères de convergence.

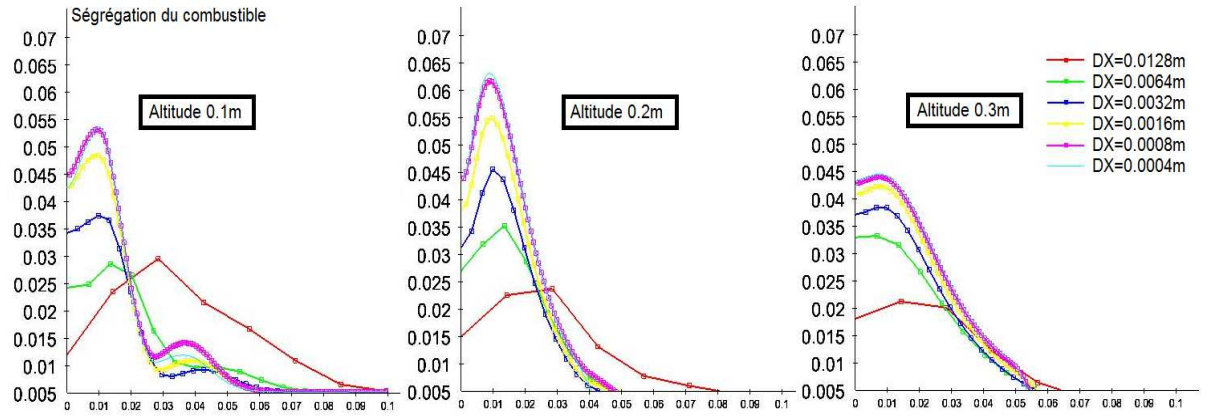


Fig.4.3 - Résultat numérique de la ségrégation de la fraction de mélange combustible aux altitudes 0.1 m, 0.2 m et 0.3 m d'une flamme de diffusion en configuration co-courante (avec raffinement de maillage)

- **Comportement de la flamme face à la dynamique**

Le taux de dissipation de la variance et les champs des scalaires transportés dépendent fortement de la dynamique et des niveaux de turbulence. Nous proposons de vérifier sur la configuration « contre courant » (Fig.4.4), qu'une dépendance forte existe entre la combustion et l'aérodynamique. En effet, nous allons dans cette configuration, augmenter les vitesses d'injection dans les entrées (0,05 m/s, 0,5 m/s, 1,5 m/s puis 5 m/s) pour évaluer le comportement de la flamme.

Configuration « contre courant » Fig.4.1					
		Cas a	Cas b	Cas c	Cas d
$n_x \times n_y$ (Δx non constant)		128×160			
Entrée combustible (5,8%CH4) (94,2%N2) pour avoir β_{1S}=0.5	U	0,05 m/s	0,5 m/s	1,5 m/s	5,0 m/s
	k ε	$5{,}4.10^{-3}$ m^2s^{-2} $3{,}1.10^{-1}$ m^2s^{-3}	$5{,}4.10^{-1}$ m^2s^{-2} $3.1.10^{2}$ m^2s^{-3}	4,9 m^2s^{-2} $8{,}3.10^{4}$ m^2s^{-3}	$5{,}4.10^{1}$ m^2s^{-2} $3.1.10^{5}$ m^2s^{-3}
	$\beta_1, \beta_2, \beta_3$	1 0 0			
	T_1	300 K			
Entrée comburant (air)	U	0,05 m/s	0,5 m/s	1.5 m/s	5,0 m/s
	k ε	$5{,}4.10^{-3}$ m^2s^{-2} $3{,}1.10^{-1}$ m^2s^{-3}	$5{,}4.10^{-1}$ m^2s^{-2} $3.1.10^{2}$ m^2s^{-3}	4,9 m^2s^{-2} $8{,}3.10^{4}$ m^2s^{-3}	$5{,}4.10^{1}$ m^2s^{-2} $3.1.10^{5}$ m^2s^{-3}
	$\beta_1, \beta_2, \beta_3$	0, 1, 0			
	T_1	300 K			

Tab.4.2 - Caractéristiques de l'ensemble des cas de flammes à jets contre courants

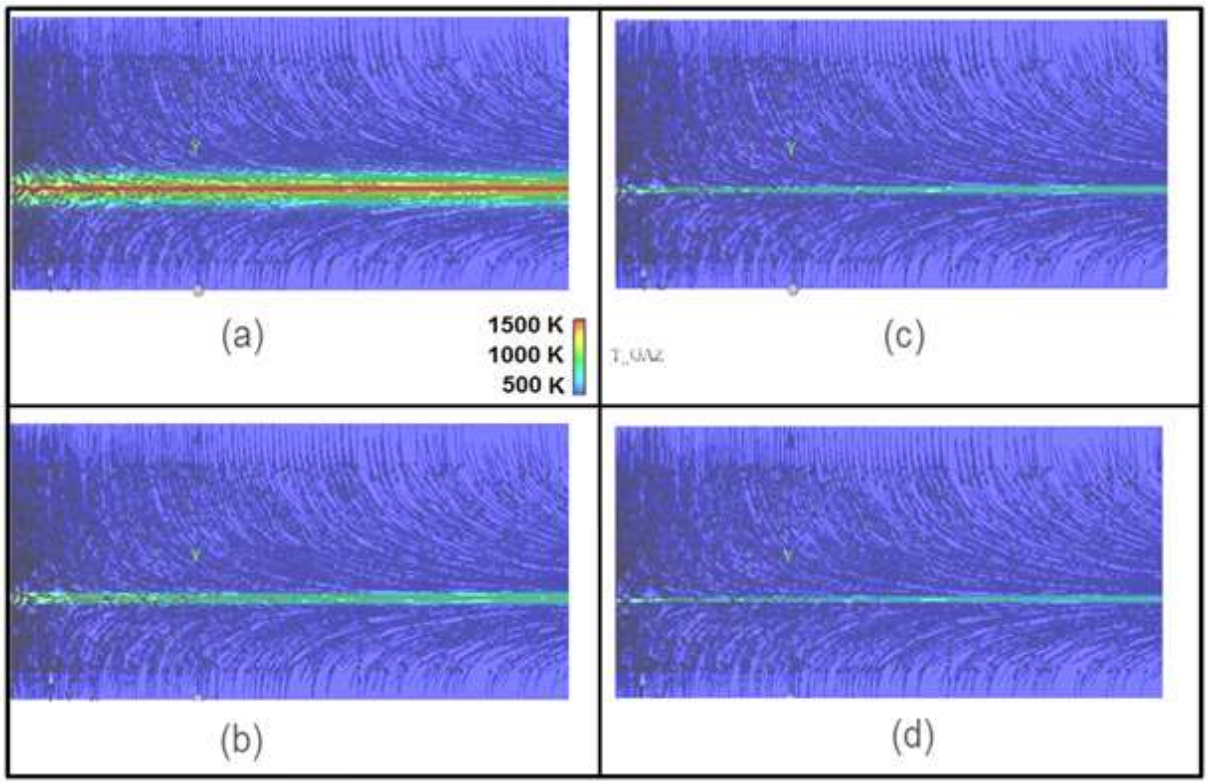


Fig.4.4 - Cartographies des champs de température d'une flamme de diffusion à contre-courant avec des vitesses d'injection des réactifs de 0.05 m/s (a), de 0.5 m/s (b), de 1.5 m/s (c) et de 5 m/s (d)

En comparant le comportement de la flamme obtenu pour différentes configurations, il est possible de montrer que le micro-mélange est principalement régi par la dynamique de l'écoulement et la turbulence. La comparaison des profils de température dans la figure 4.5, montre que l'augmentation des vitesses d'injection a tendance à éteindre la flamme dans cette configuration.

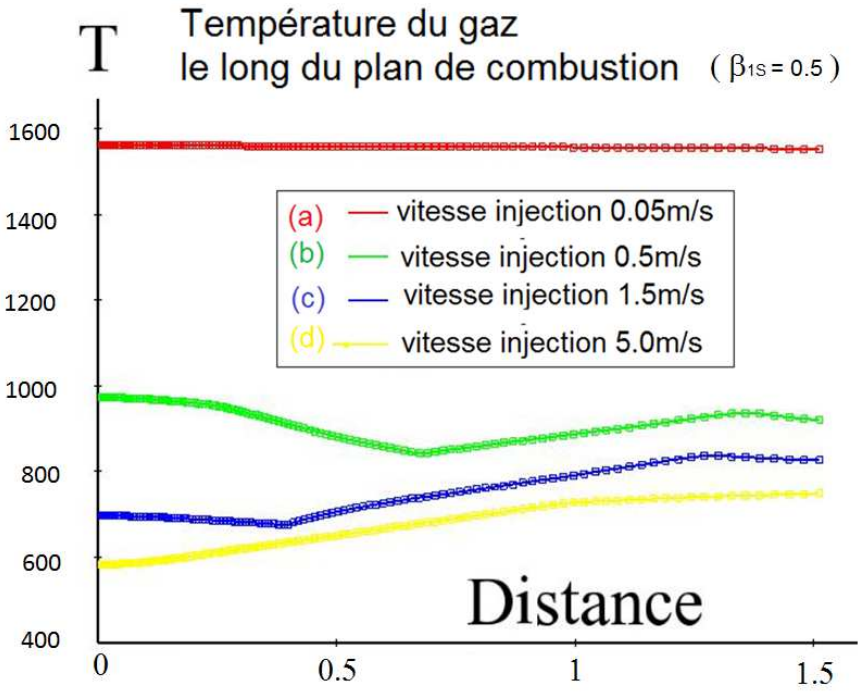


Fig.4.5 - Comparaison des profils de température le long du plan de combustion pour les cas d'injection à 0.05 m/s, 0.5 m/s, 1,5 m/s et 5 m/s

En effet, l'augmentation des vitesses d'injection induit un transport convectif prédominant face au transport diffusif. Ceci a pour effet de diminuer l'épaisseur caractéristique de la zone de mélange (zone de variation de la fraction de mélange – Fig.4.6) et favorise donc l'augmentation du gradient correspondant dans cette zone de réaction.

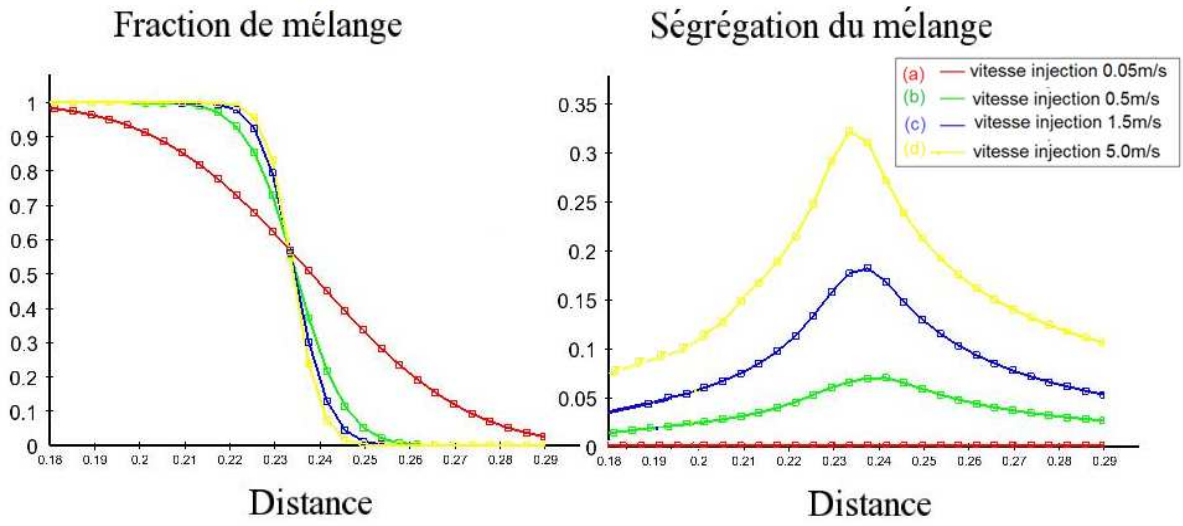


Fig.4.6 - Profil (le long d'un axe vertical situé à 50 cm de l'axe de symétrie d'une flamme de diffusion à contre courant) de la fraction de mélange et de la ségrégation du combustible dans les cas d'injection à 0.05 m/s (a), 0.5 m/s (b), 1.5 m/s (c) et 5 m/s (d)

Bien que l'accroissement des vitesses favorise la dissipation de la variance via la création d'énergie turbulente, l'augmentation du terme de production de variance déplace l'équilibre production - dissipation vers un état de mélange à ségrégation plus élevée. Les réactifs seront dans ce cas, moins bien mélangés et donc moins aptes à réagir. Dans un cadre général, l'augmentation de la variance tend à diminuer le nombre Damköhler (Eq.2.21) et à privilégier les effets de la cinétique chimique. Un modèle à chimie infiniment rapide n'aura pas la capacité de prendre ce phénomène en compte. Bien que notre modèle soit basé sur une hypothèse simple d'un temps caractéristique de réaction infini ou nul en fonction des proportions du mélange, il serait intéressant de savoir s'il est capable de rendre en partie compte des effets de la cinétique chimique qui entrent en jeu lorsque l'intensité du mélange est faible dans la zone de réaction.

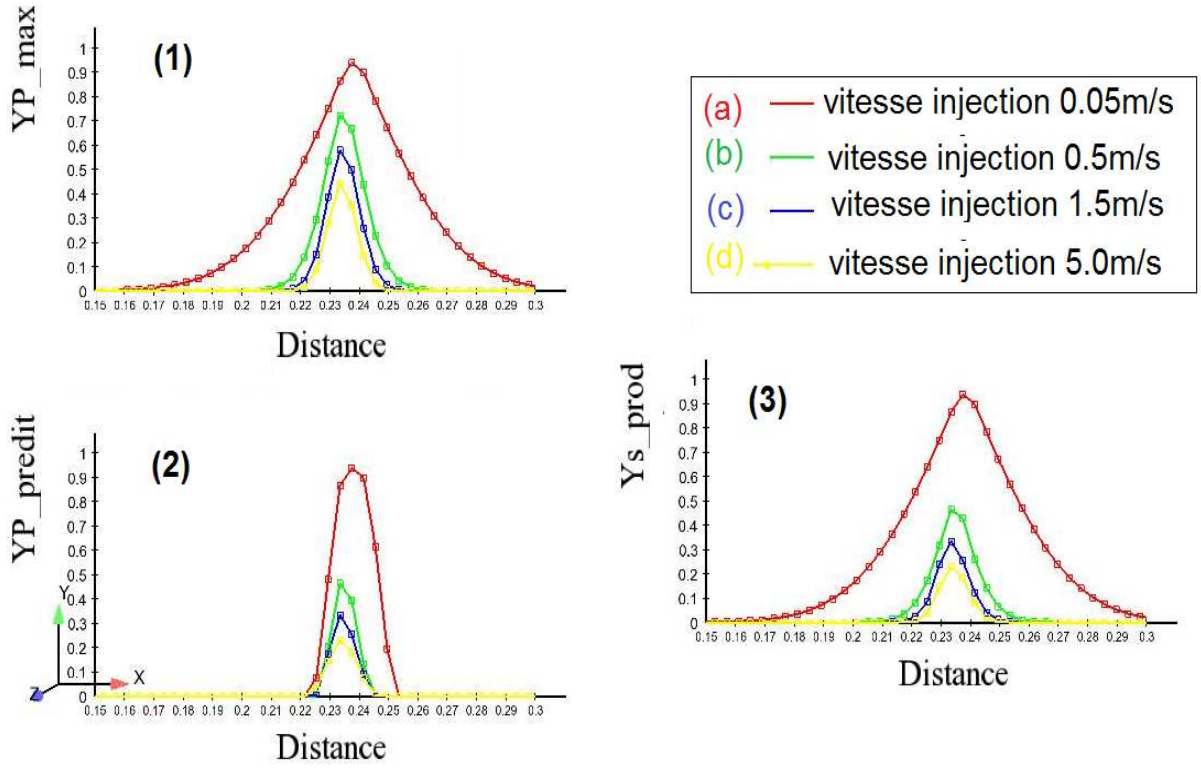


Fig.4.7 - Profil (le long d'un axe vertical situé à 50 cm de l'axe de symétrie d'une flamme de diffusion à contre courant) des fractions massiques de produit prédites (2) et transportée s (3) par le modèle CLIirr en comparaison avec le profil de la fraction massique des produits calculées via le schéma de chimie infiniment rapide (1) dans les cas d'injection à 0.05 m/s (a), 0.5 m/s (b), 1.5 m/s (c) et 5 m/s (d)

Dans la figure 4.7, le graphe (2) présente la fraction massique prédite des produits susceptibles de se former. On constate que le modèle numérique restitue une réduction de l'épaisseur de la zone de réaction. Effectivement, dans le cadre du modèle à chimie infiniment rapide (Fig.4.7 graphe (1)), les produits de réaction se forment dans la zone de mélange des réactifs. Le modèle CLIirr introduit la contrainte supplémentaire des proportions inflammables. Le transport turbulent permet ensuite aux produits de diffuser vers les zones non inflammables. Dans la suite nous distinguerons successivement quatre zones : la zone de réaction (zone 1) où une partie du mélange respecte les conditions d'inflammabilité (très proches de la stœchiométrie) ; la zone 2 où le mélange n'est pas inflammable mais où les produits ont pu diffuser, la zone 3 où le mélange est non inflammable et qui ne contient pas de produits de combustion et enfin, la zone 4, la plus éloignée, où les réactifs sont purs.

Lorsque la zone de réaction n'est pas altérée par les limites d'inflammabilité (le mélange est toujours inflammable), la prédiction des produits dans la zone de réaction correspond à une cinétique infiniment rapide (comparaison du graphe 1 et du graphe 2 de la figure 4.7 dans le cas a). Dans ce

cas, la diffusion turbulente permet de transporter les produits vers la zone de mélange non inflammable. Ainsi, la troisième zone n'existe pas et la détermination des produits via le modèle CLIirr est identique à la résolution via un schéma à chimie infiniment rapide (comparaison des graphes 1 et 3 de la figure 4.7 dans le cas a). On remarquera, que si la diffusion turbulente était moins importante, les produits auraient moins tendance à diffuser vers la zone non inflammable en diminuant l'épaisseur de la flamme avec l'existence de la troisième zone.

Lorsque le micro-mélange devient encore plus faible dans la zone de réaction, on s'aperçoit que la combustion est directement altérée par les limites d'inflammabilité avec une sous prédiction des produits formés en comparaison avec le modèle à chimie infiniment rapide (comparaison des graphes 1 et 2, cas b - cas c - cas d). Ceci a pour conséquence de prendre en compte des effets de non inflammabilité dans la zone de réaction. Même si la diffusion des produits est possible vers la zone de non inflammabilité, le taux de production ne permet pas une réaction totale et il existera des imbrûlés. Lorsque le ralentissement du micro-mélange tend à séparer les paquets de combustible et de comburant dans la zone de réaction, l'ensemble du mélange se déplace progressivement à l'extérieur du domaine d'inflammabilité en diminuant progressivement la zone de réaction. L'extinction se produit lorsque le mélange ne permet plus l'inflammabilité dans les environs de la frontière stœchiométrique (zone de réaction inexistante).

En conclusion, ce modèle à chimie rapide « conditionnée » permet de retrouver un comportement de seuil critique d'étirement.

- **Comportement de la flamme en fonction du taux de dilution**

Pour mieux comprendre les différences de comportement qui existent entre le modèle de combustion à limites d'inflammabilité (CLIirr) et celui à chimie infiniment rapide, nous nous proposons maintenant de comparer ces modèles pour des taux de dilution en vapeur d'eau croissants dans l'entrée comburante. Cette étude paramétrique en taux de dilution du comburant sera conduite sur la configuration « co-courant ».

Configuration « contre courant » avec comburant dilué en vapeur																					
$n_x \times n_y$		160×800																			
Δx		0,0008 m																			
Entrée CH4	U	0,05 m/s																			
	k, ε	$5{,}4.10^{-3}$ m^2s^{-2} $3{,}1.10^{-1}$ m^2s^{-3}																			
	β_1 β_2 β_3	1 0 0																			
	T_1	300 K																			
Entrée Air + vapeur	U	0,2 m/s																			
	k, ε	$2.16\ 10^{-2}$ m^2s^{-2} $6.2\ 10^{-1}$ m^2s^{-3}																			
		Sans limites d'inflammabilité										Avec limites d'inflammabilité									
	β_1 β_2 β_3	0 1 0	0 0.9 0.1	0 0.8 0.2	0 0.7 0.3	0 0.6 0.4	0 0.5 0.5	0 0.4 0.6	0 0.3 0.7	0 0.2 0.8	0 0.1 0.9	0 0 1	0 1 0	0 0.95 0.05	0 0.9 0.1	0 0.85 0.15	0 0.75 0.25	0 0.65 0.35	0 0.4 0.6	0 0.5 0.5	0 0 1
	T_1	300 K																			

Tab.4.3 - Caractéristiques de l'ensemble des cas représentant une flamme jets co-courants progressivement diluée en vapeur d'eau

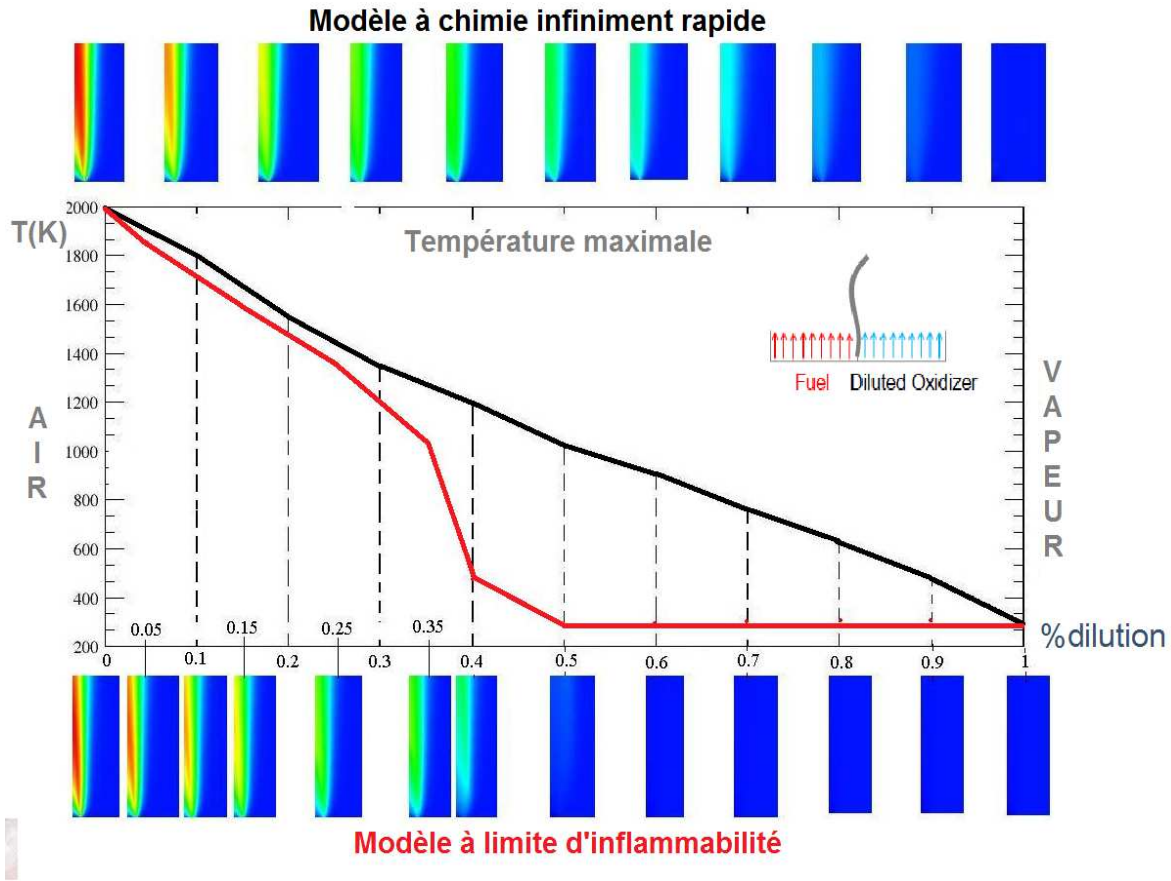


Fig.4.8 - Visualisation de la température maximale dans la flamme de diffusion en configuration co-courante pour un taux de dilution croissant du comburant en vapeur d'eau - Comparaison entre le modèle CLIirr et le modèle à chimie infiniment rapide

Lorsque que le taux de dilution du comburant croît, les produits de réaction se raréfient (du à une baisse en oxygène), la température finale décroît dû à la diminution des produits de réaction en faveur de l'inertant. Le modèle à chimie infiniment rapide tiendra compte de la diminution de la température par cette asphyxie de la flamme en O_2. Ce modèle ne tient compte que de la dilution lors de la reconstitution des espèces dans un schéma de réaction complète. Dans ce cas, même si le taux de dilution est important, il y aura toujours réaction pour faire réagir le peu d'oxygène existant. La flamme disparait totalement lorsque la dilution atteint les 100%, c'est-à-dire quand il ne reste plus du tout d'oxygène. Dans le cas du modèle CLIirr, un phénomène supplémentaire s'ajoute à l'asphyxie de la flamme : c'est l'inhibition de la réaction. Effectivement, plus le taux de dilution est important, plus la température des produits, « susceptibles » de se former, diminue. Ce qui engendre un resserrement de l'intervalle d'inflammabilité. Les limite inférieure (β_{1LI}) et supérieure (β_{1LS}) se resserrent autour de la stœchiométrie (β_{1S}). Ainsi, le mélange est moins inflammable et la réaction globale limitée. On dira que la flamme est altérée. Au bout d'un certain seuil de dilution (le point critique), la température maximum des produits (« susceptibles » de se former) ne dépasse plus la température de cross-over et rend le mélange non inflammable, c'est l'extinction.

La figure 4.8 illustre une étude paramétrique de la température maximale de la flamme pour chacun des modèles (Chimie infiniment rapide - CLIirr) avec des taux de dilution variables dans l'entrée comburante. En comparant ces températures maximales, on remarque que les deux modèles ont un comportement faiblement différent pour des taux de dilution limités. En effet, même si le modèle CLIirr introduit des limites d'inflammabilité, ces dernières restent assez éloignées (à faible dilution) pour ne pas altérer la zone de réaction. Seul un léger retard à la formation des produits résulte de l'introduction des limites d'inflammabilité. En revanche, les modèles se comportent très différemment pour des taux de dilution plus importants. En effet, la contrainte d'inflammabilité altère progressivement la zone de réaction jusqu'à l'extinction lorsque le taux massique de dilution en vapeur d'eau devient supérieur à 50%.

L'effet de la dilution est caractérisé par le rétrécissement de l'intervalle des limites d'inflammabilité [β_{1LI}- β_{1LS}] encadrant la stœchiométrie β_{1S} lorsque le taux de dilution X en vapeur d'eau augmente (Fig.4.9). Le point critique d'extinction se trouve pour un taux massique en vapeur d'eau dans l'air de 50%. Ceci représente un taux de dilution volumique de 62% en vapeur d'eau.

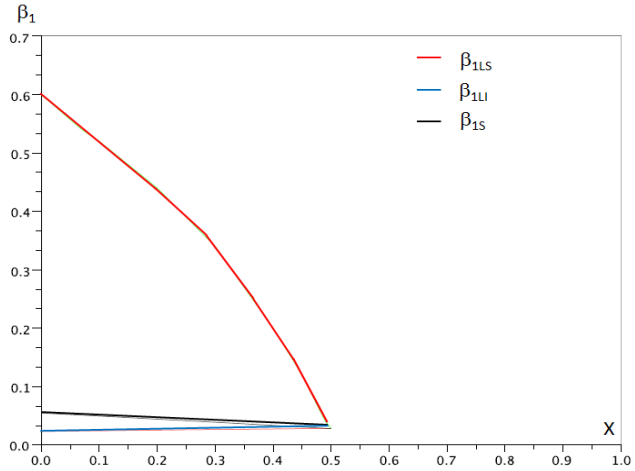


Fig.4.9 - Evolution des limites d'inflammabilité β_{1LI} et β_{1LI} avec un taux de dilution (X) croissant en vapeur d'eau dans l'entrée comburante

On constate ainsi que l'extinction totale de la flamme dans la configuration « co-courant » simulée précédemment n'a lieu que lorsque les limites inférieure et supérieure se rejoignent pour une fraction massique de 50% en vapeur d'eau dans le jet d'air. Or la figure 4.8 montre que la température maximale de la flamme chute à la température des réactifs pour cette même fraction massique de dilution en vapeur. Dans la configuration donnée de cette flamme jets co-courants, il existe donc toujours un endroit où le mélange respecte en partie les proportions stœchiométriques (PDF(β_{1S}) ≠ 0) capable de brûler jusqu'au point critique d'extinction. Notons que pour un taux de ségrégation plus important, l'extinction pourrait avoir lieu alors que les limites d'inflammabilité ne se rejoignent pas.

- **Rôle du diluant**

Le modèle se place dans le cadre d'un diluant « non-actif » et ne prévoit pas la catalyse ou l'inhibition de la réaction par une action directe sur la réaction. Par exemple, les effets de catalyse par la vapeur d'eau en présence limitée n'est pas pris en compte dans le calcul d'un éventuel élargissement de l'intervalle réactionnel. Cependant, les effets de capacité thermique du diluant sont bien mis en jeu dans ce modèle. Effectivement, plus grande est la capacité thermique du diluant, moins la température des produits est élevée. Par conséquent, le critère d'inflammabilité sera plus difficile à respecter et le diluant à plus forte capacité thermique aura un caractère inhibant plus important. On se propose de comparer l'évolution des limites d'inflammabilité pour une dilution de l'air par de la vapeur d'eau ou par de l'azote.

On remarque dans la figure 4.10 que la capacité thermique plus faible de l'azote (comparativement à celle de la vapeur d'eau) entraine un resserrement des limites d'inflammabilité pour des valeurs plus grandes du taux de dilution. Le point critique d'extinction se place à un taux massique de dilution de l'air en azote à 63% (taux volumique de 65%). Cette étude comparative montre bien l'importance de la nature du diluant et de son pouvoir inhibiteur lié à sa capacité thermique. La capacité thermique de la vapeur d'eau a tendance à diminuer les températures instantanées de la flamme. Ceci explique, dans un premier temps, la diminution plus importante des températures moyennes du gaz lorsque l'on introduit de la vapeur d'eau plutôt que de l'azote. De plus, la diminution de la température a tendance à accentuer le rétrécissement de l'intervalle d'inflammabilité. En conclusion, un diluant agit à la fois sur la température de la flamme et sur les limites d'inflammabilité. Les effets sont fortement corrélés à la capacité thermique du diluant utilisé.

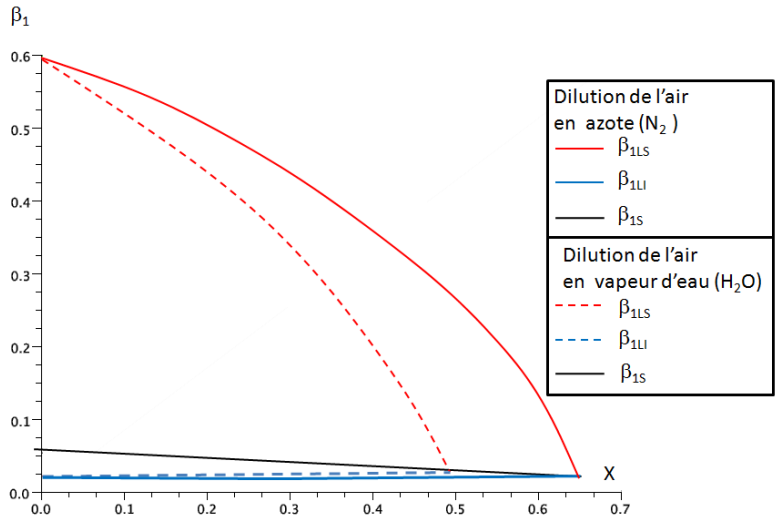


Fig.4.10 - Comparaison de l'évolution des limites d'inflammabilité β_{1LI} et β_{1LI} en fonction du taux de dilution (X) de l'air pour la dilution en vapeur d'eau et en azote

- **Comportement du modèle face à la modification de la température des réactifs.**

Le critère d'inflammabilité est un critère sur la température des produits susceptibles de se former. Les températures des réactifs influent sur la température des produits et par conséquent, sur l'intervalle inflammable. On s'attend à voir un mélange de plus en plus inflammable lorsque la température des réactifs augmente. Nous proposons ici de mettre en évidence l'élargissement du domaine d'inflammabilité pour des températures croissantes des réactifs (l'entrée combustible et une entrée diluant-carburant introduite à une même température - Fig.4.11).

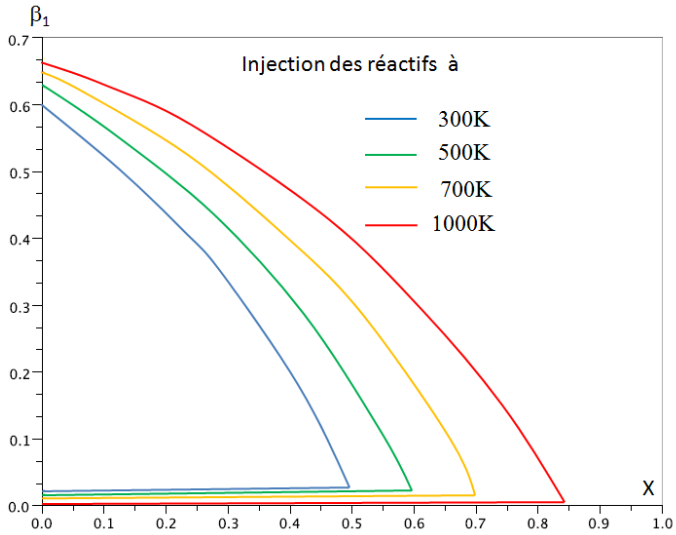


Fig.4.11 - Evolution du domaine d'inflammabilité pour des températures d'injection de 300 K, 500 K, 700 K et 900 K dans le cas de dilution par la vapeur d'eau

En effet, en introduisant les réactifs (entrée combustible et entrée comburant-diluant) à des températures plus élevées, cela revient à rehausser l'enthalpie des entrées et par conséquent, l'enthalpie des produits. Par exemple, dans le cas adiabatique, il est possible d'utiliser l'expression 3.15 pour déterminer l'enthalpie des produits de réaction en fonction des enthalpies des entrées. Dans ce cas, la température des produits susceptibles de se former a tendance à augmenter. En ce sens, le domaine d'inflammabilité aura tendance à s'élargir. Réciproquement, la diminution de la température des entrées a deux effets : la diminution de la température des produits et la réduction du domaine d'inflammabilité du mélange.

c. Conclusion sur le modèle de combustion

L'ensemble de ces études paramétriques permet d'analyser le comportement du modèle de combustion à chimie conditionnée CLIirr. Le modèle est capable de prendre en compte le phénomène d'extinction dû aux limites d'inflammabilité. On a montré que ces limites sont affectées par la nature du diluant, le taux de dilution, et la température des réactifs. Ainsi, pour un diluant donné, l'intervalle d'inflammabilité diminue avec un taux de dilution croissant, et ceci d'autant plus rapidement que la capacité thermique du diluant est importante. D'autre part, l'élévation (réciproquement la diminution) de la température des réactifs a tendance à élargir (réciproquement rétrécir) le domaine d'inflammabilité. Ainsi, il est possible d'éteindre totalement la flamme en refermant au maximum l'intervalle d'inflammabilité. Le mélange devient alors non-inflammable quel que soit le taux de ségrégation. On parlera d'extinction « thermodynamique ».

Nous avons aussi montré que la prise en compte des limites d'inflammabilité pouvait altérer la zone de combustion et donc diminuer le taux de réaction. Aussi, l'extinction devient possible même si l'intervalle d'inflammabilité n'est pas totalement refermé. Dans ce cas, le taux de ségrégation est élevé et la probabilité d'obtenir un mélange inflammable est faible voir nulle. Nous parlerons alors d'extinction « potentielle ».

Pour conclure, le modèle CLIirr présente deux avantages importants pour la description de l'interaction d'une flamme et d'un brouillard d'eau :

- Il permet la prise en compte de l'aspect thermodynamique pour évaluer l'extinction d'une flamme. Bien que le modèle reste simple, il tient compte des effets liés à la nature et la concentration de l'inertant ainsi que des effets induits par la modification de la température des réactifs.

- Il permet de prendre en compte la dépendance du domaine d'inflammabilité à la température des réactifs et au taux de dilution. Ce modèle de combustion est donc capable de considérer l'interaction entre les échanges diphasiques et l'extinction : une goutte, à proximité d'un foyer, a tendance à prélever de l'énergie au milieu réactif en s'échauffant puis en s'évaporant. Ceci conduit à réduire la température des réactifs et augmenter le taux de dilution. Le processus est donc à l'origine de l'extinction de la flamme.

Le comportement du modèle CLIirr semble pertinent. Nous mesurerons dans la suite de ce chapitre l'erreur résiduelle en comparant nos résultats avec des données expérimentales.

IV.1.2. Evaluation du modèle de description du spray

a. Phénomène de glissement

La description du brouillard d'eau se base sur un modèle qui résout la vitesse moyenne des phases et qui utilise une vitesse de glissement prédite. C'est un modèle intermédiaire entre la description diphasique Euler-Euler homogène (glissement négligé) et la description diphasique Euler-Euler avec résolution des champs de vitesse de chaque phase. Cette méthode alternative a le mérite de proposer une description des trajectoires des particules dont le temps caractéristique τ_p est relativement faible par rapport au temps caractéristique des vitesses moyenne du gaz τ_m. Dans ce cas, il est possible de négliger le temps de mise à l'équilibre sans négliger le glissement lui-même. Les modèles de « drift » introduisent généralement la dérive des particules en fonction du champ de vitesse du gaz résolu avec l'hypothèse d'un faible couplage des particules sur la dynamique. Cependant, les gouttes d'eau ont généralement un effet d'entrainement du gaz vers le bas. La résolution du champ de la vitesse moyenne, avec la masse volumique du mélange des deux phases, permet de tenir compte de cet entrainement via l'alourdissement du mélange par la phase liquide. Pour évaluer le comportement de ce modèle, nous proposons de simuler une pulvérisation longitudinale d'un jet chargé en gouttes. Cette configuration de pulvérisation à travers un canal plan est présentée dans la figure 4.12. Cet écoulement plan s'effectue via deux entrées : de l'air sur la partie supérieure de l'injecteur et de l'air chargé à 14% en gouttes sur la partie inférieure de l'injecteur (l'ensemble est pulvérisé à une vitesse de 1m/s).

Configuration d'écoulement en canal					
$n_x \times n_y$		700×100			
Δx (m)		0,01 m			
Entrée Air Sec	U	1.0 m/s			
	k ε	$1{,}2.10^{-1}$ m^2s^{-2} $3{,}1.10^{2}$ m^2s^{-3}			
	β_1 β_2 β_3	0 1 0			
	X_1 X_2	1 0			
	T_1	300 K			
Entrée Air+gouttes	U	1,00 m/s			
	k, ε	$1{,}2.10^{-1}$ m^2s^{-2} $3{,}1.10^{2}$ m^2s^{-3}			
	β_1, β_2, β_3	0 1 0			
		Cas 1	Cas 2	Cas 3	Cas 4
	D_p	50 µm	70 µm	100 µm	150 µm
	X_1 X_2	0,86 0,14			
	T_1 T_2	300 K 300 K			

Tab.4.4 - Caractéristiques de l'ensemble des cas de pulvérisation horizontale d'un jet liquide

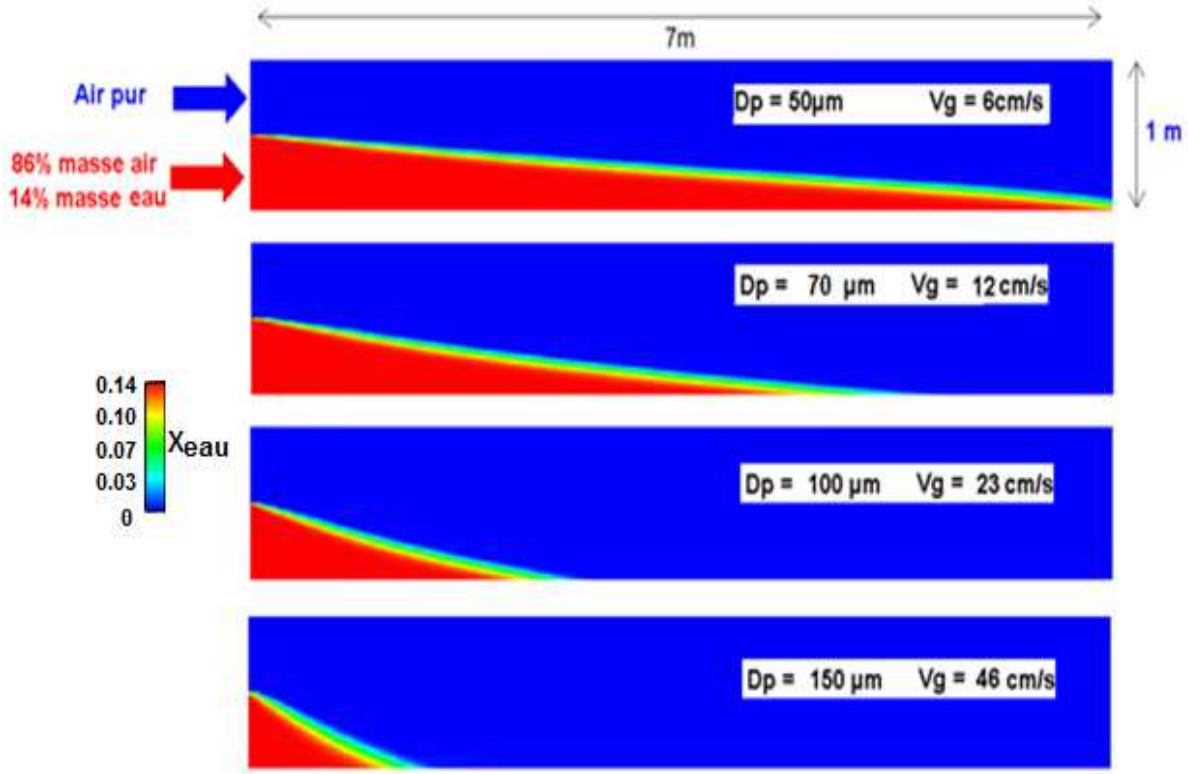


Fig.4.12 - Représentation de la décantation d'eau liquide dans un écoulement de canal plan pour des injections de gouttes de taille 50 µm, 70 µm, 100 µm et 150 µm

Ce cas test cherche à évaluer le comportement numérique du glissement. En effet, en supposant connu le glissement *Vg* (à diamètre de goutte fixé), on s'attend à observer une décantation progressivement dans le canal (surface inférieure = évacuation de l'eau liquide). Les résultats

illustrent bien la chute des gouttes en fonction de la distance parcourue. On remarque tout d'abord que la prédiction des vitesses limites de glissement est bien en accord avec la taille respective des gouttes. D'autre part, Pour cet écoulement plan, il est possible d'évaluer la pente du front représentative du rapport des composantes verticale et longitudinale de la vitesse de la phase liquide.

$$\text{Pente} = \frac{V_g}{V_l} \tag{4.1}$$

Pour chacune des tailles des gouttes, on peut évaluer la vitesse de décantation et la comparer à la vitesse de chute prise en compte (Fig.4.13).

Diamètre	Vitesse de décantation	Vitesse prédite de glissement
50 µm	pente= 0.5/7 = 0.07m/s	Vg=0.06m/s
70 µm	pente= 0.5/4.5 = 0.11m/s	Vg=0.12m/s
100µm	pente= 0.5/2.3 = 0.22m/s	Vg=0.23m/s
150µm	pente= 0.5/1.1 = 0.45m/s	Vg=0.43m/s

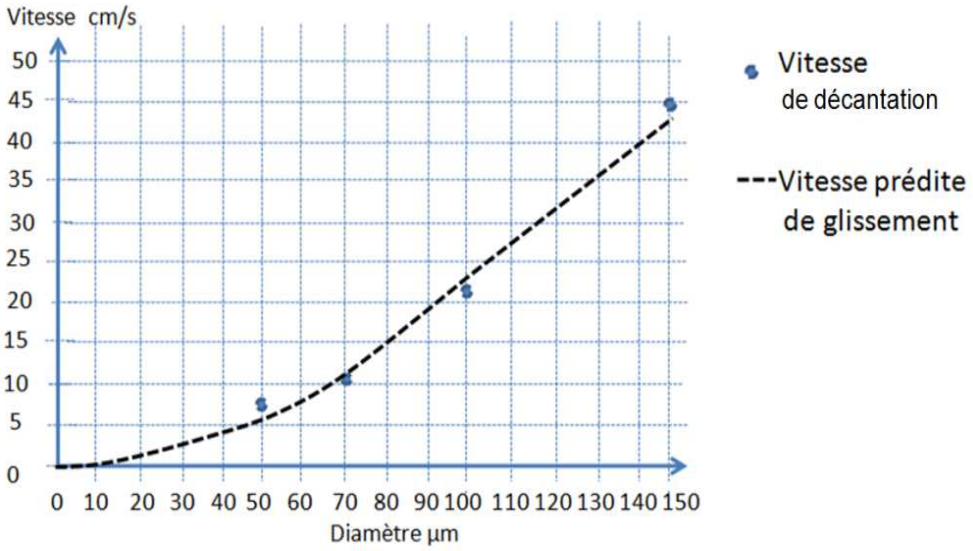


Fig.4.13 - Comparaison des vitesses de décantation du front d'eau de glissement des gouttes d'eau

b. Echanges thermiques et massiques des gouttes

Lors de l'extinction d'un foyer par un brouillard d'eau, les gouttes peuvent être pour partie dispersées dans le local puis aspirées par le panache mais peuvent aussi pénétrer directement le foyer. Ainsi, pour s'assurer d'une représentation appropriée des flux d'évaporation et de chaleur, nous présentons deux cas test simples représentatifs de l'interaction entre foyer et un brouillard d'eau. Le premier représente deux jets co-courants, l'un étant de l'air très chaud et l'autre étant de l'air chargé en gouttes (Fig.4.14.a). Dans ce cas, nous négligerons les effets du glissement pour comprendre comment le diamètre caractéristique des gouttes affecte les flux interfaciaux pour des temps de séjour comparables. La deuxième configuration, qui représente une pulvérisation contre-courant de ces mêmes jets (Fig.4.14.b), permet d'analyser les transferts entre les phases lors de la pénétration des gouttes dans l'air chaud.

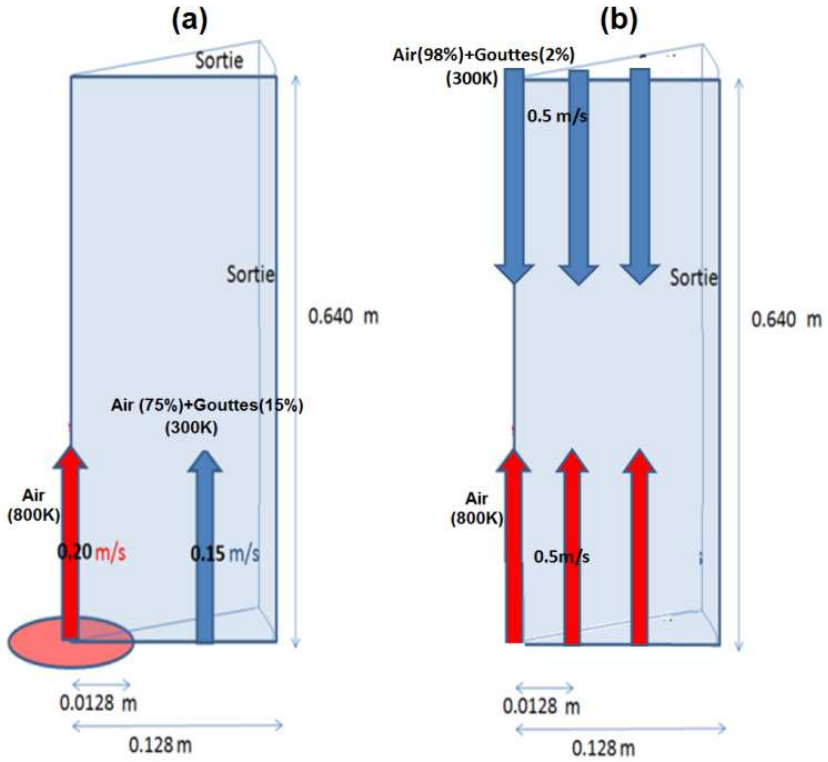


Fig.4.14 - Schématisation du cas test unitaires d'une pulvérisation de deux jets « co-courants » ou « contre courant », l'un étant de l'air sec à 800 K et l'autre étant de l'air chargé en gouttes à 300 K

Pour la configuration des jets co-courants, la figure 4.15 permet d'analyser et de comparer le comportement de deux brouillards d'eau contenant la même quantité d'eau mais dont la taille des gouttes injectées est différente (Tab.4.5).

Configuration (a) Fig.4.14			
$n_x \times n_y$		160×800	
Δx		0,0008 m	
Entrée Air	U	0,15 m/s	
	k, ε	$2.16\ 10^{-2}\ m^2s^{-2}$	$6.2\ 10^{-1}\ m^2s^{-3}$
	$\beta_1\ \beta_2\ \beta_3$	0 1 0	
	T_1	800 K	
Entrée Air + gouttes	U	0,20 m/s	
	k, ε	$7.6\ 10^{-4}\ m^2s^{-2}$	$8.2\ 10^{-4}\ m^2s^{-3}$
	$\beta_1\ \beta_2\ \beta_3$	0 1 0	
		Cas 1	Cas 2
	D_p	50 µm	250 µm
	X_1, X_2	0,75	0,15
	T_1, T_2	300 K	300 K

Tab.4.5 - Caractéristiques de l'ensemble des cas représentant la configuration (a) de la figure 4.14

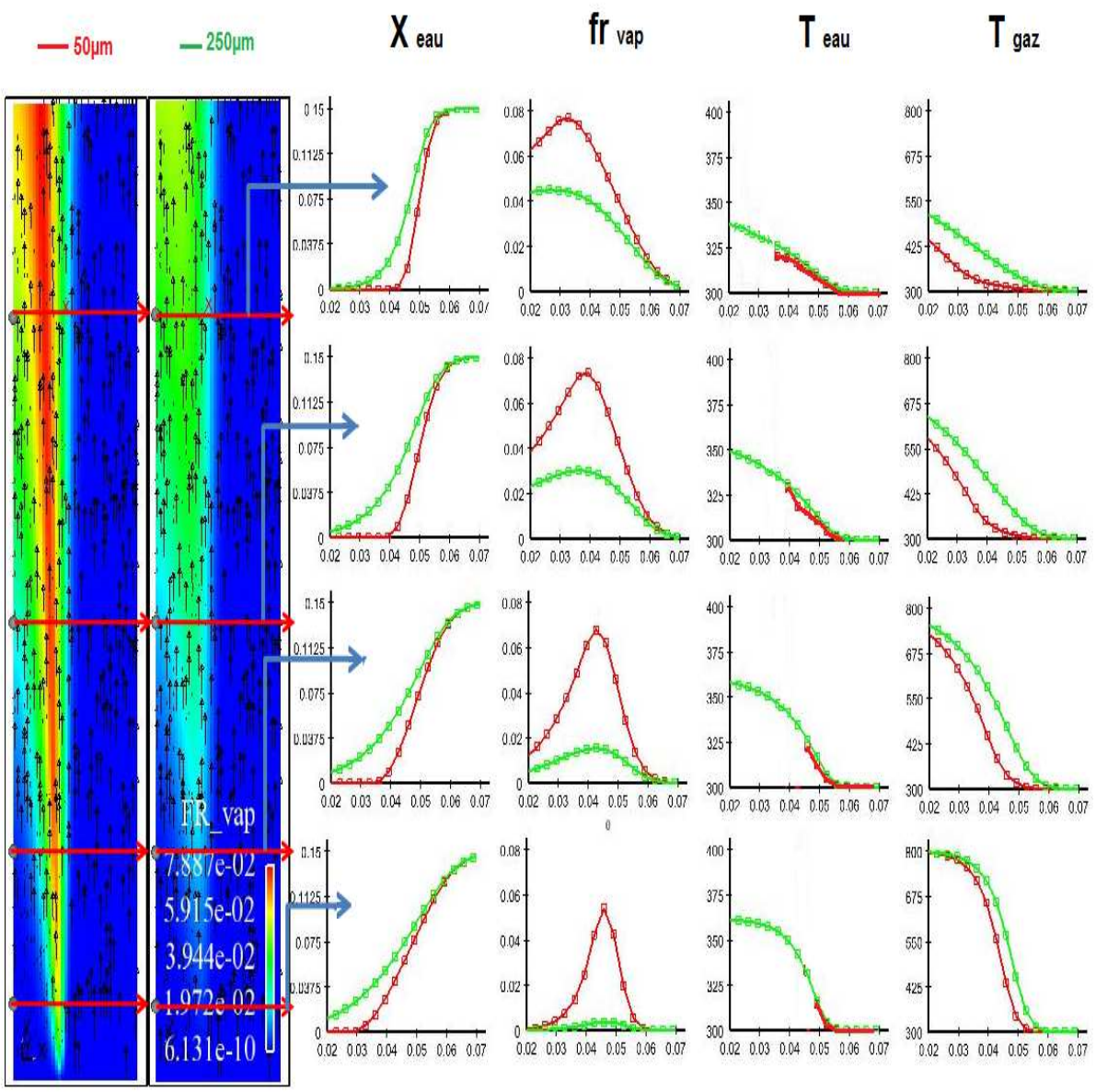


Fig.4.15 - Comparaison des échanges interfaciaux entre les deux phases à différentes altitudes (5 cm, 15 cm, 30 cm, 50 cm) dans la configuration « co-courants » pour des tailles de gouttes injectées de 50 µm et 250 µm

On vérifie que les gouttes de taille 50 µm de diamètre s'évaporent plus rapidement que les gouttes de 250 µm. Ainsi la fraction massique de vapeur d'eau obtenue avec le brouillard de petites gouttes est toujours supérieure à celle obtenue avec le brouillard de grosses gouttes. On remarque aussi que les grosses gouttes, qui ont plus de temps pour s'échauffer, voient leur température atteindre les 350 K alors que les petites gouttes disparaissent à partir de 310 K. Ce comportement attendu est dû à la surface d'échange, plus importante pour le brouillard de gouttes fines, qui favorise les transferts de chaleur et de masse. L'évaporation plus rapide des gouttes fines conduit ainsi à un plus fort refroidissement de la phase gazeuse (Fig.4.15).

Lors de l'extinction d'un foyer, on a montré que les petites gouttes sont plus efficaces pour refroidir l'environnement. En contre partie, elles disparaissent plus rapidement et pénètrent donc moins dans le foyer. C'est pour cela que nous cherchons à évaluer le comportement d'un brouillard d'eau dans la configuration contre courant (Fig.4.14.b). Aussi, nous proposons une étude paramétrique pour montrer l'influence de la taille des gouttes (Tab.4.6).

Configuration (b) Fig.4.14						
$n_x \times n_y$		160 × 800				
Δx (m)		0,0008 m				
Entrée Air	U	0,5 m/s				
	k, ε	$5{,}4.10^{-1}$ m^2s^{-2} $3.1.10^{2}$ m^2s^{-3}				
	β_1 β_2 β_3	0 1 0				
	T_1	800 K				
Entrée Air + gouttes	U	0,5 m/s				
	k, ε	$5{,}4.10^{-1}$ m^2s^{-2} $3.1.10^{2}$ m^2s^{-3}				
	β_1 β_2 β_3	0 1 0				
		Cas 1	Cas 2	Cas 3	Cas 4	Cas 5
	D_p	50 µm	100 µm	200 µm	250 µm	300 µm
	X_1, X_2	0,98 0,02				
	T_1, T_2	300 K 300 K				

Tab.4.6 - Caractéristiques de l'ensemble des cas représentant la configuration (b) de la figure 4.14

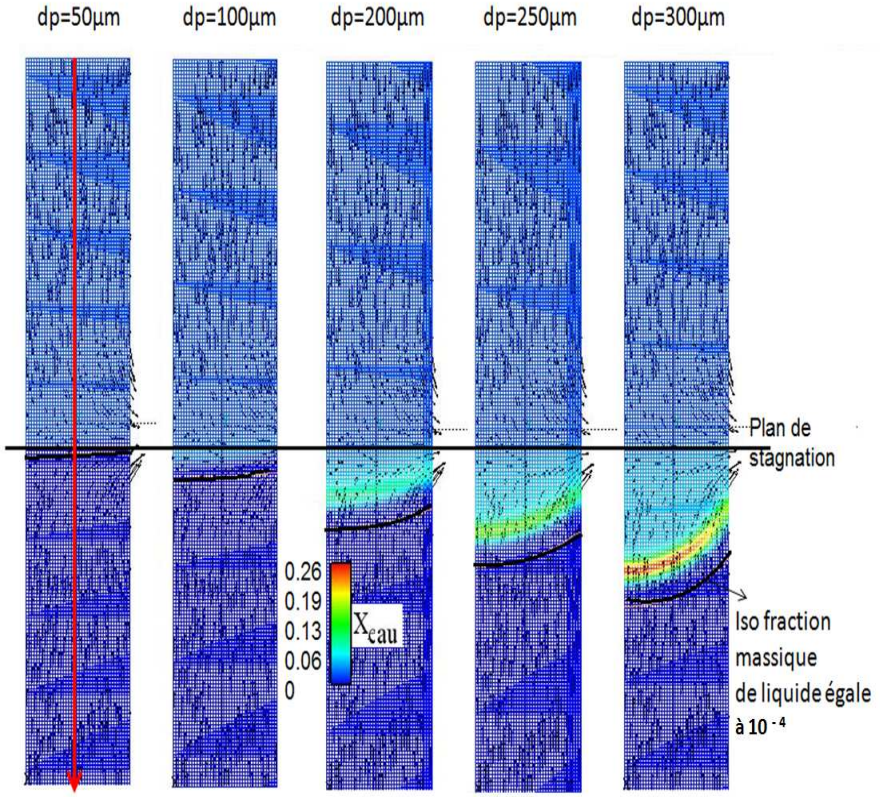


Fig.4.16 - Représentation de la pénétration d'un jet de gouttes (air chargé à 2% de fraction massique de goutte à 300K) dans un jet d'air sec et chaud (800K) pour différents diamètres de goutte (50µm, 100 µm, 200 µm, 250 µm, 300 µm)

Les champs de fraction massique d'eau dans le domaine sont présentés dans la figure 4.16. Les positions du plan de stagnation et de l'iso-fraction massique d'eau à 10^{-4} montre que plus la taille initiale des gouttes est importante, plus elles pénètrent dans les gaz chaud. On observe aussi que les gouttes s'accumulent dans la zone où leur vitesse de chute équilibre le mouvement ascensionnel d'ensemble. La fraction massique de gouttes peut, dans cette zone, devenir significativement supérieure aux conditions d'injection.

Cette étude montre que deux phénomènes interviennent dans la caractérisation de la pénétration des gouttes. D'une part, la vitesse de glissement entre les phases est plus faible pour les gouttes les plus fines qui pénètrent donc moins dans le gaz chaud. D'autre part, les gouttes s'évaporent et disparaissent, ce qui réduit d'autant leur capacité à pénétrer les gaz chaud. En conséquence, le refroidissement des gaz dû à l'évaporation ne sera que superficiel lorsque les gouttes injectées sont

fines. Cette caractéristique a bien entendu des conséquences importantes quand l'objectif principal est l'attaque directe du foyer de combustion.

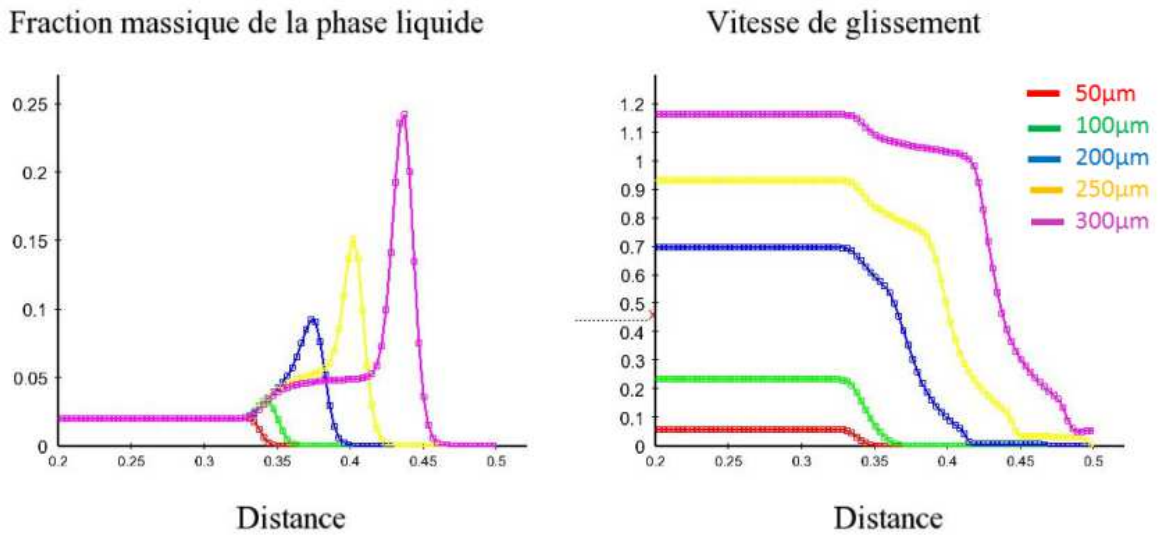


Fig.4.17 - Profil (le long d'un axe vertical situé à 6 cm de l'axe de symétrie) des fractions massiques d'eau liquide et de la vitesse de glissement pour des injections de gouttes de diamètre initial de 50 µm, 100 µm, 200 µm, 250 µm et 300 µm

La figure 4.17 montre bien que les grosses gouttes, ayant une vitesse de glissement plus importante, pénètrent plus en profondeur dans l'air chaud. Lorsque les gouttes commencent à s'évaporer, leur taille et donc leur vitesse de glissement diminue. Ainsi, comme l'air chaud est ascendant, elles finissent par se stabiliser dans l'écoulement. Dans cette étude, la vitesse du flux ascendant est de 0.5 m/s. On remarque que les gouttes s'accumulent lorsque leur taille conduit à une vitesse de glissement de 0.5 m/s. Cette accumulation de gouttes est donc liée à la décroissance rapide de leur vitesse de chute. On remarque, dans la figure 4.18, que la température des gouttes tend vers une valeur correspondant à l'équilibre entre la production de vapeur et la pression de vapeur saturante. Cet équilibre s'établit d'autant plus loin que les gouttes s'échauffent lentement. Enfin, l'évaporation retardée des grosses gouttes permet de refroidir (Fig.4.18) plus en profondeur les gaz.

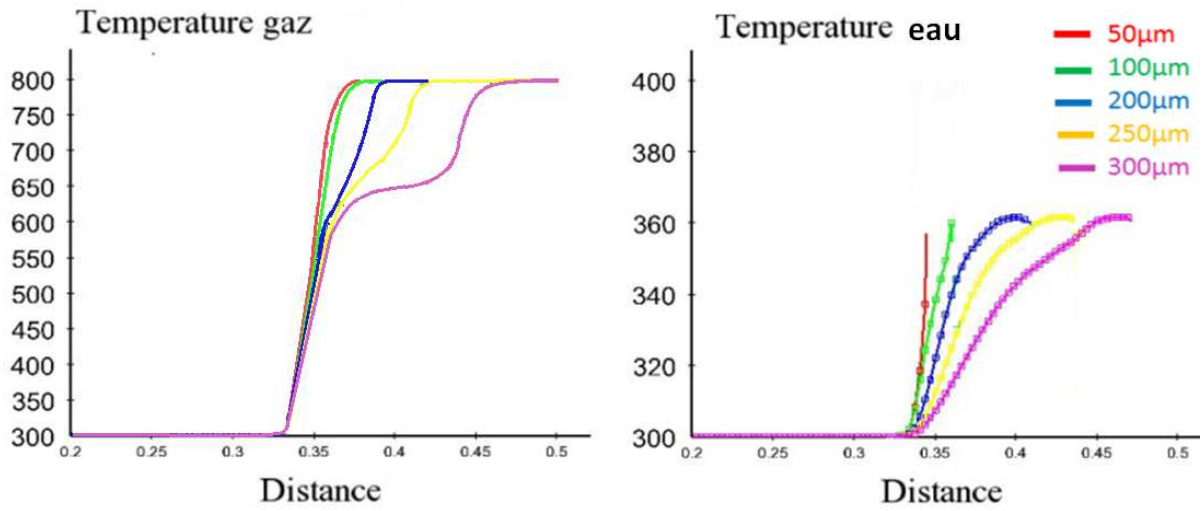


Fig.4.18 - Profil (le long d'un axe vertical situé à 6 cm de l'axe de symétrie) de la température du gaz et de l'eau des injections de gouttes de diamètre initial de 50 µm, 100 µm, 200 µm, 250 µm et 300 µm

IV.2. Validation quantitative du modèle par la comparaison des résultats et des mesures expérimentales dans une flamme jet co-courant

IV.2.1. Présentation du dispositif

Le dispositif présenté ci-dessous est une flamme jets co-courants : l'un chargé en combustible l'autre chargé en air auquel on peut incorporer un gaz inerte ou des gouttelettes.

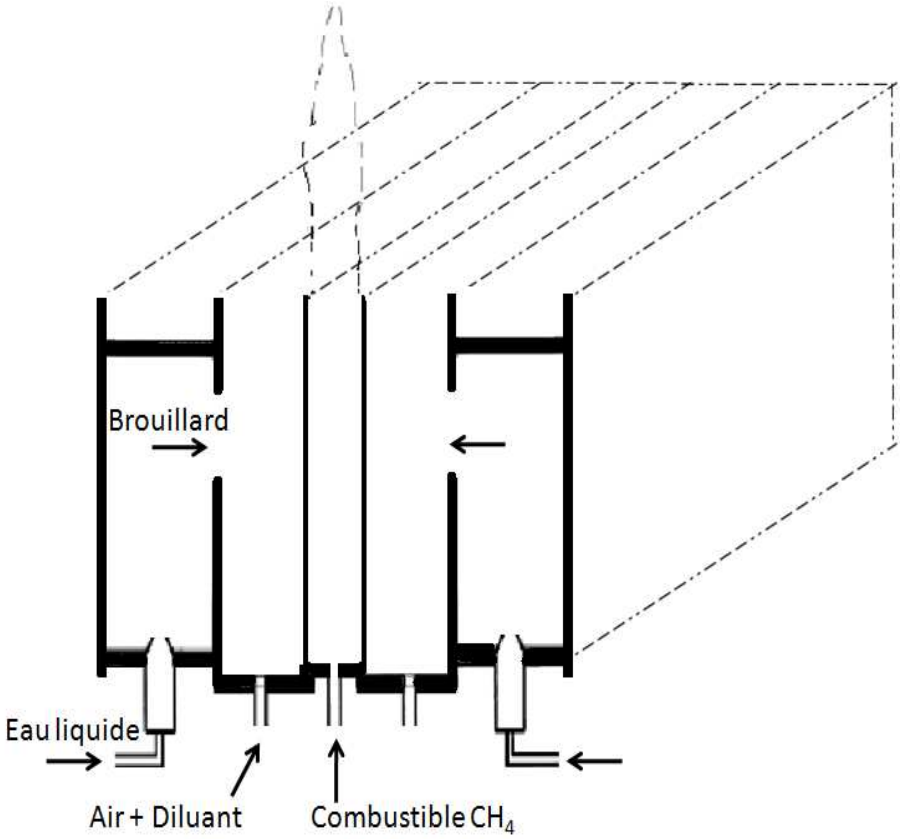


Fig.4.19 - Schématisation du dispositif expérimental du brûleur modifié Wolfhard & Parker

Le dispositif expérimental est un brûleur modifié Wolfhard & Parker, qui est schématisé sur la figure 4.19. Le conduit de carburant est de 75 mm de long, 10 mm de large et 150 mm de profondeur. De chaque coté, les deux entrées comburant font 82 mm de long, 35 mm de large et 150 mm de profondeur. Le brouillard, généré avec des buses à faible débit situées dans des chambres extérieures, est entraîné dans le courant « comburant » à travers une ouverture réglable pour contrôler la quantité de brouillard introduite. Pour déterminer le débit du brouillard, un écran très fin est placé à la sortie du canal pendant un temps donné. La masse de brouillard recueillie pendant cette période fournit une mesure du débit d'eau à l'état stationnaire. Les caractéristiques du brouillard d'eau sont mesurées en sortie du brûleur en utilisant un analyseur de particules (faisceau laser). Pour introduire de la vapeur au lieu du brouillard, les gouttelettes sont chauffées juste avant le mélange avec l'air. Pour chaque expérience, la chaleur fournie aux gouttes est ajustée afin de s'assurer de leur totale évaporation. La fente « carburant » est remplie de sable fin, ce qui permet d'obtenir un profil de vitesse plat en sortie combustible. La vitesse de sortie moyenne du carburant est de 2,8 cm/s et la vitesse de sortie moyenne de l'air est de 18 cm/s. La température de la flamme est mesurée avec un thermocouple déplacé transversalement par rapport à la flamme.

Configuration jets co-courant de l'expérience représentée dans la figure 4.19					
$n_x \times n_y$ Δx non constant		1800×800			
Entrée CH_4	U	0,028 m/s			
	k, ε	$1{,}2.10^{-1}$ m^2s^{-2} $2.1.10^{1}$ m^2s^{-3}			
	$\beta_1\ \beta_2\ \beta_3$	1 0 0			
	X_1, X_2	1 0			
	T_1	300 K			
Entrée oxydant	U	0,18 m/s			
	k, ε	$2.\ 10^{-2}$ m^2s^{-2} $4.2\ 10^{-1}$ m^2s^{-3}			
		Cas a	Cas b	Cas c	Cas d
	$\beta_1\ \beta_2\ \beta_3$	0 1 0 κ_2 = 0.79	0 1 0 κ_2 = 0.797	0 0,97 0,03	0 1 0
	X_1, X_2	1 0	1 0	1 0	0,97 0,03
	T_1, T_2	300 K XXX	300 K XXX	300 K XXX	300 K 300 K
	D_p	XXX	XXX	XXX	50 µm

Tab.4.7 - Caractéristiques des simulations numériques reproduisant les cas expérimentaux

Trois séries d'expériences ont été menées. La première consiste à ajouter des quantités connues d'azote dans le courant d'air pour abaisser la concentration en oxygène dans l'entrée comburant. L'objectif est de comprendre les effets de la dilution du courant oxydant seulement. Ensuite, des tests ont été effectués avec de la vapeur d'eau pour mettre en évidence les effets dû à sa capacité thermique plus importante qui accentuera la perte de chaleur sensible. Enfin, l'introduction du brouillard d'eau permettra d'analyser les effets de refroidissement par échauffement (chaleur sensible) et évaporation (chaleur latente) des gouttes.

IV.2.2. Résultats

a. Cas de dilution du comburant

On observe sur la figure 4.20 des écarts entre les résultats des simulations et les résultats expérimentaux, même lorsque l'air introduit est pur. Cette différence peut être due au rayonnement qui n'est pas pris en compte dans la simulation. La température des produits de combustion est donc surestimée. De plus, le modèle de turbulence utilisé ne permet pas de décrire correctement l'écoulement laminaire à la base du foyer et conduit à une description imparfaite du mélange des réactifs. Ainsi, la diffusion turbulente est surévaluée. Nous avons également vu dans le paragraphe II.2.6.b, que l'emploi d'un modèle pour les flux turbulents permettant de prendre en compte les effets de fortes variations de masse volumique dans la zone de réaction, serait susceptible de diminuer la diffusion turbulente. Les flux turbulents, pouvant même être à contre-gradient, affecteraient sensiblement les niveaux de variance. Ainsi, le comportement des flux turbulents seront susceptibles de retarder la formation des produits. Cette modification de la représentation du mélange turbulent pourrait également améliorer le calcul de la température trop élevée sur l'axe de la flamme (Fig.4.20).

Dans le cas de dilution en vapeur d'eau ou en azote, on remarque que le modèle fournit une bonne évaluation des profils de température obtenus par les simulations. Lorsque le taux de dilution est de 3%, on constate que les profils de température sont en accord avec l'expérience (Fig.4.20).

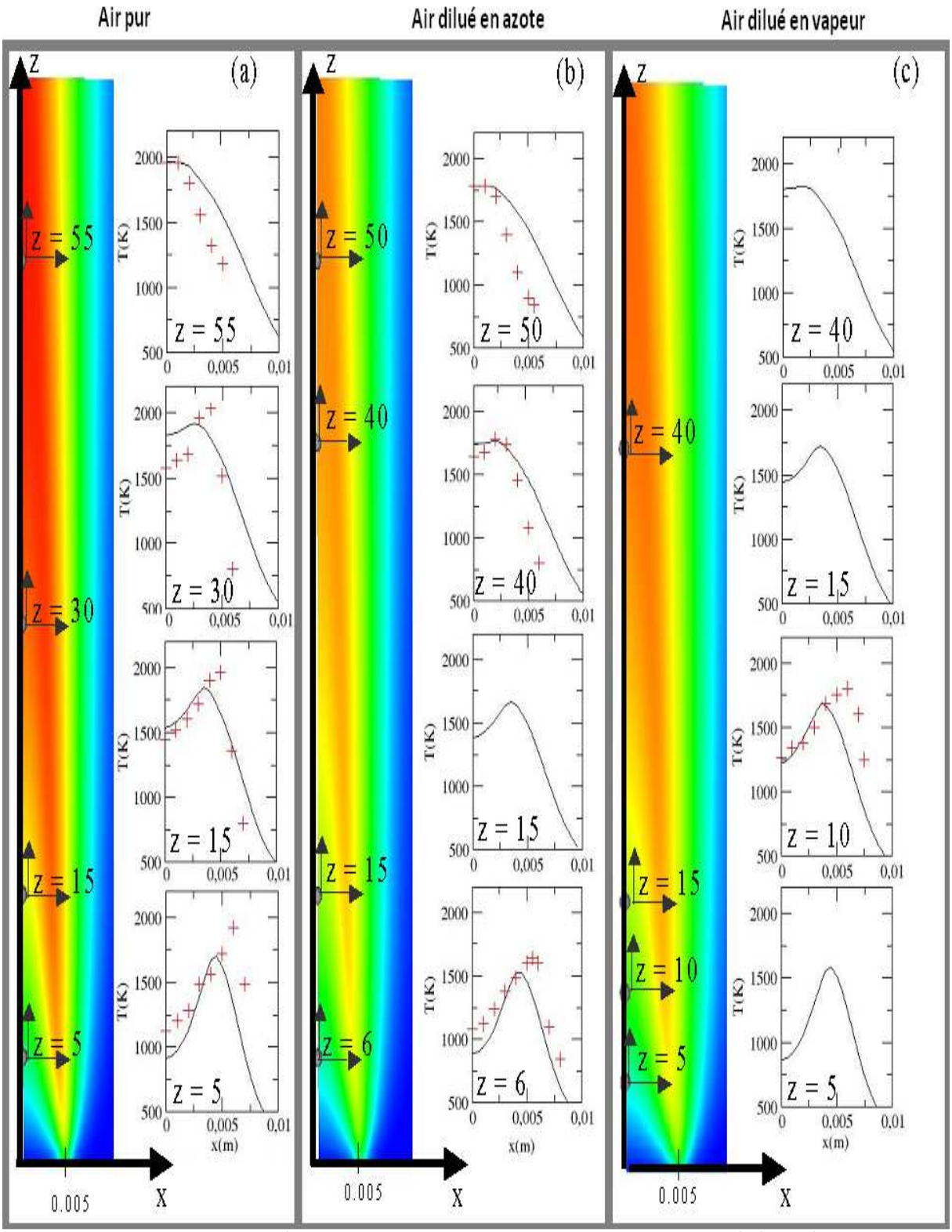


Fig.4.20 - Champs et profils de température moyenne au sein d'une flamme de diffusion comparés à l'expérience de Prasad dans le cadre d'un mélange combustible avec de l'air pur (a), avec de l'air dilué à 3% d'azote (b), ou de l'air dilué à 3% de vapeur d'eau (c), [40]

b. Cas de l'air chargé en gouttes

En comparant les profils de température à une altitude de 10 mm pour les cas où l'air est sec, dilué à la vapeur et chargé en gouttes (Fig.4.21), il est possible d'identifier différents effets induits par l'introduction des gouttelettes :

- le refroidissement par dilution des réactifs,
- le refroidissement par dilution des produits,
- le refroidissement par chauffage des gouttes,
- le refroidissement par évaporation des gouttes,
- le refroidissement par diminution du domaine d'inflammabilité.

En comparant les résultats des simulations des cas avec l'introduction d'air sec (a) et d'air dilué en vapeur d'eau (c), on remarque une diminution des niveaux de température lors de la dilution de l'air par la vapeur (Fig.4.21). Ce refroidissement est ici associée aux effets de dilution de l'oxygène en quantité moins importante, à la diminution du domaine d'inflammabilité réduisant encore la fraction massique des produits et à la dilution des produits par un inerte à forte capacité thermique qui abaisse encore le niveau de température de la flamme. Le profil de température de la simulation avec de l'air initialement chargé en gouttes d'eau (d) montre l'accentuation du refroidissement. Dans ce cas, ce refroidissement inclue aussi la perte d'énergie liée à l'échauffement et l'évaporation des gouttelettes, mais aussi une diminution plus importante du domaine d'inflammabilité lié au refroidissement des réactifs.

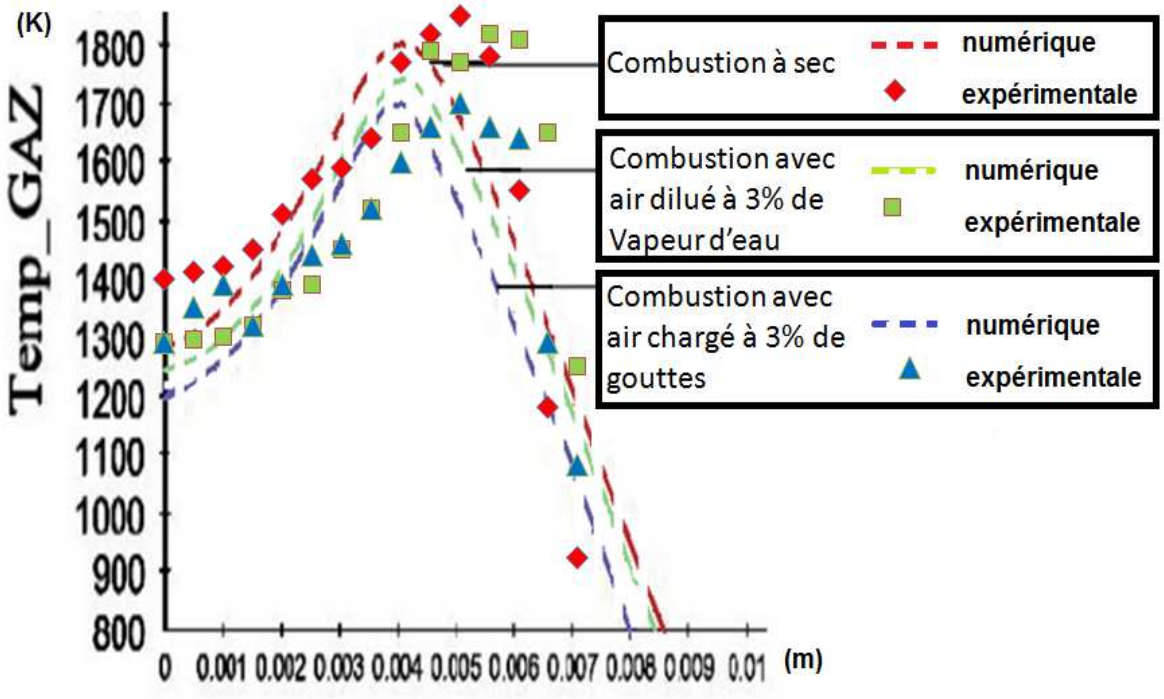


Fig.4.21 - Comparaison du profil de température sur un plan horizontal situé à 10 mm d'altitude dans le cas d'une flamme de diffusion de l'air, de l'air dilué à 3% de vapeur et de l'air chargé à 3% d'eau liquide (taille des gouttes de 50 µm)

On constate, figure 4.21, que les valeurs maximales des températures obtenues par la simulation dans les trois cas évoluent de la même manière que celle mesurées. La valeur maximum de température est plus éloignée de l'axe de symétrie dans l'expérience que dans les simulations. Cet écart est probablement dû à la description imparfaite du transport turbulent des scalaires et des variances.

La figure 4.22 montre, comme attendu, que l'augmentation du nombre de gouttes accentue le refroidissement jusqu'à l'extinction totale.

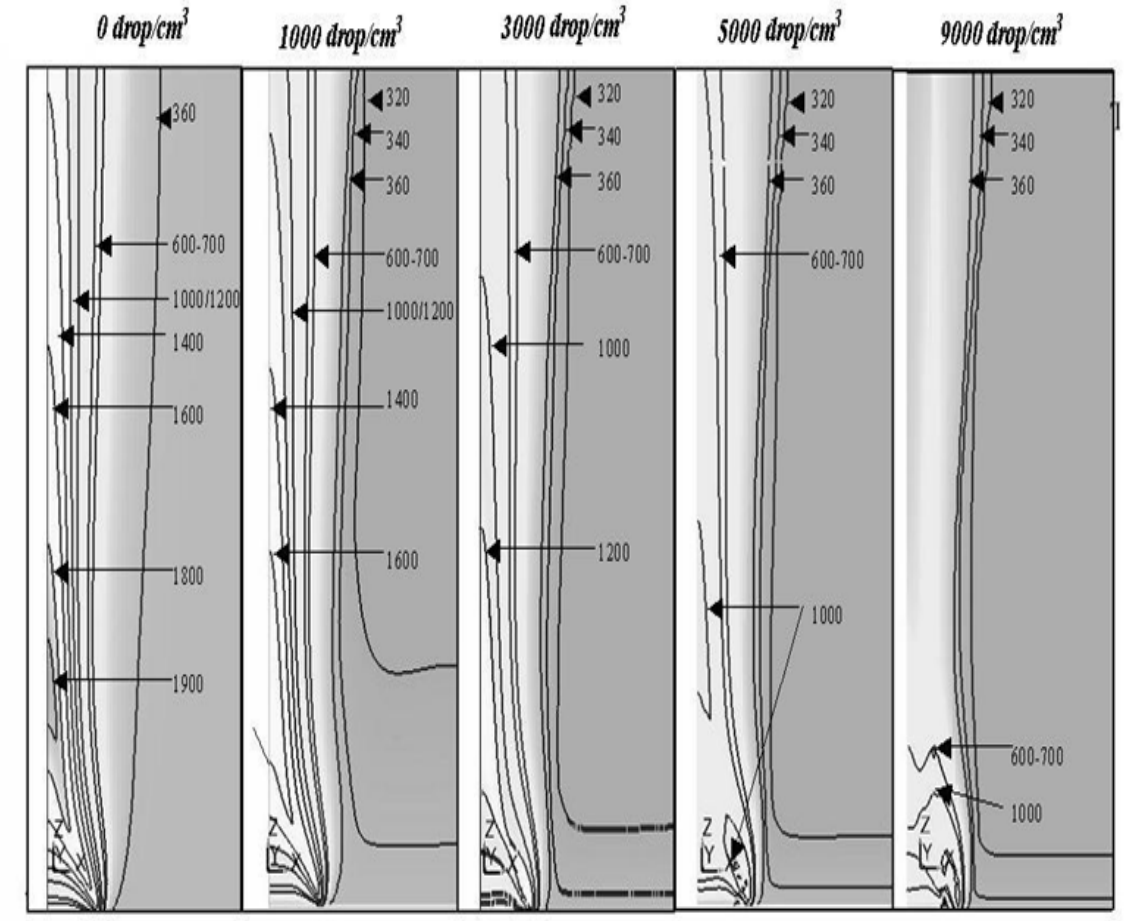


Fig.4.22 - Evolution des champs de températures moyennes du gaz pour des fractions volumiques de gouttes (taille fixée à 50µm) croissantes dans le courant de comburant

IV.3. Réponse du modèle sur un cas test représentatif d'une pulvérisation d'un brouillard descendant

IV.3.1. Présentation de la configuration

Nous présentons ici deux cas d'extinction d'un foyer par des brouillards monodisperses différents. Le premier est composé de gouttes de 50 µm et le deuxième de gouttes de 400 µm. Les dimensions du domaine de calcul correspondent à celles d'un local de 4 m de large par 2.5 m de hauteur (simulation 2D). Deux injecteurs sont situés au plafond pulvérisant des brouillards chargés à 14% de gouttelettes d'eau avec un profil de vitesse descendant de 1 m/s. Ces injecteurs sont placés afin de ne pas impacter directement la zone de pyrolyse. Ainsi nous cherchons seulement à évaluer l'extinction par refroidissement de l'environnement. Le foyer incendie est centré au sol et une ouverture située à la verticale du foyer permet l'évacuation des fumées.

Configuration « pulvérisation »			
$n_x \times n_y$ Δx non constant		360 × 600	
Entrée CH4	U	0,05 m/s	
	k, ε	$4{,}2.10^{-1}$ m^2s^{-2}	$1.1.10^{2}$ m^2s^{-3}
	β_1 β_2 β_3	1 0 0	
	T_1	300 K	
2 Entrées Air + gouttes	U	0,20 m/s	
	k, ε	$7.6\ 10^{-4}$ m^2s^{-2}	$8.2\ 10^{-4}$ m^2s^{-3}
	β_1 β_2 β_3	0 1 0	
		Cas 1	Cas 2
	D_p	50 µm	400 µm
	X_1, X_2	0,76	0,14
	T_1, T_2	300 K	300 K

Tab.4.8 - Caractéristiques des deux cas de pulvérisation d'un brouillard d'eau à proximité d'un foyer

IV.3.2. Résultats

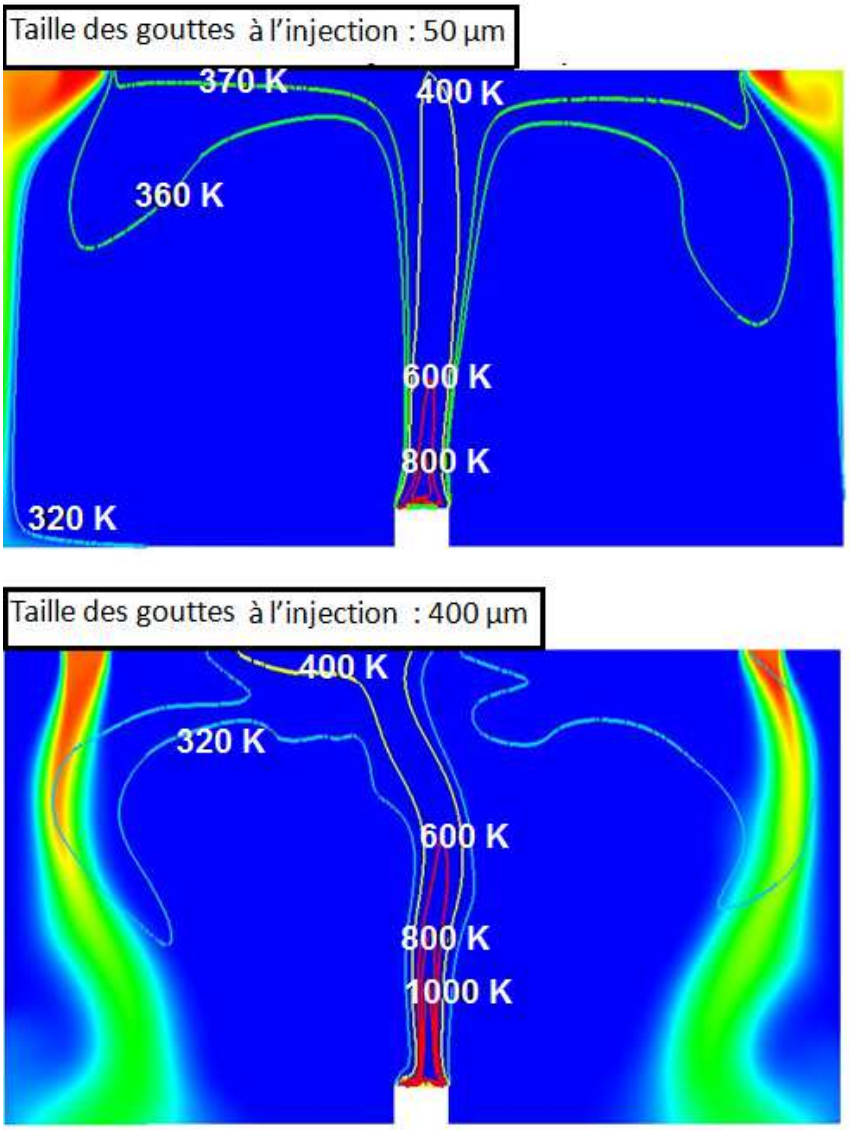


Fig.4.23 - Visualisation des iso-températures (K) superposées aux champs de fractions massique d'eau liquide

Les simulations (Fig.4.23) fournissent des résultats illustrant la différence de comportement obtenu en fonction de leur taille caractéristique des gouttes. On constate que les gouttes de 400 µm suivent moins l'écoulement du gaz et se déposent à la surface du sol. Les gouttes de taille 50 µm suivent quant à elles, davantage l'écoulement et sont ainsi entrainées par le panache. Ce comportement permet de confirmer l'importance de prendre en compte les différentes classes de gouttes pour évaluer l'évolution d'un brouillard polydisperse. D'autre part, on remarque que l'eau liquide s'évapore plus rapidement lorsque la taille des gouttes est de 50 µm (Fig.4.24). Le temps caractéristique de chute des petites gouttes étant plus important, ces dernières on plus le temps de s'évaporer avant leur dépôt. De plus, comme nous l'avons déjà remarqué, voir paragraphe IV.1.2.b, cette disparition plus rapide est due à la surface d'échange qui est plus importante pour les brouillards de petites gouttes.

Finalement, les gouttes très fines interagissent davantage avec le milieu environnant et donc avec le foyer :

- la température du local est nettement diminuée (Fig.4.23) ;
- le taux de dilution est plus important (10% contre 3% avec les grosses gouttes - Fig.4.24) ;
- l'intervalle d'inflammabilité davantage diminué augmente le taux des imbrûlés (30% contre 17% avec les grosses gouttes - Fig.4.24) ;
- La taille de la flamme est réduite (refroidissement induit la diminution de la convection naturelle) - Fig.4.24.

Finalement, le modèle numérique proposé suit donc le comportement attendu.

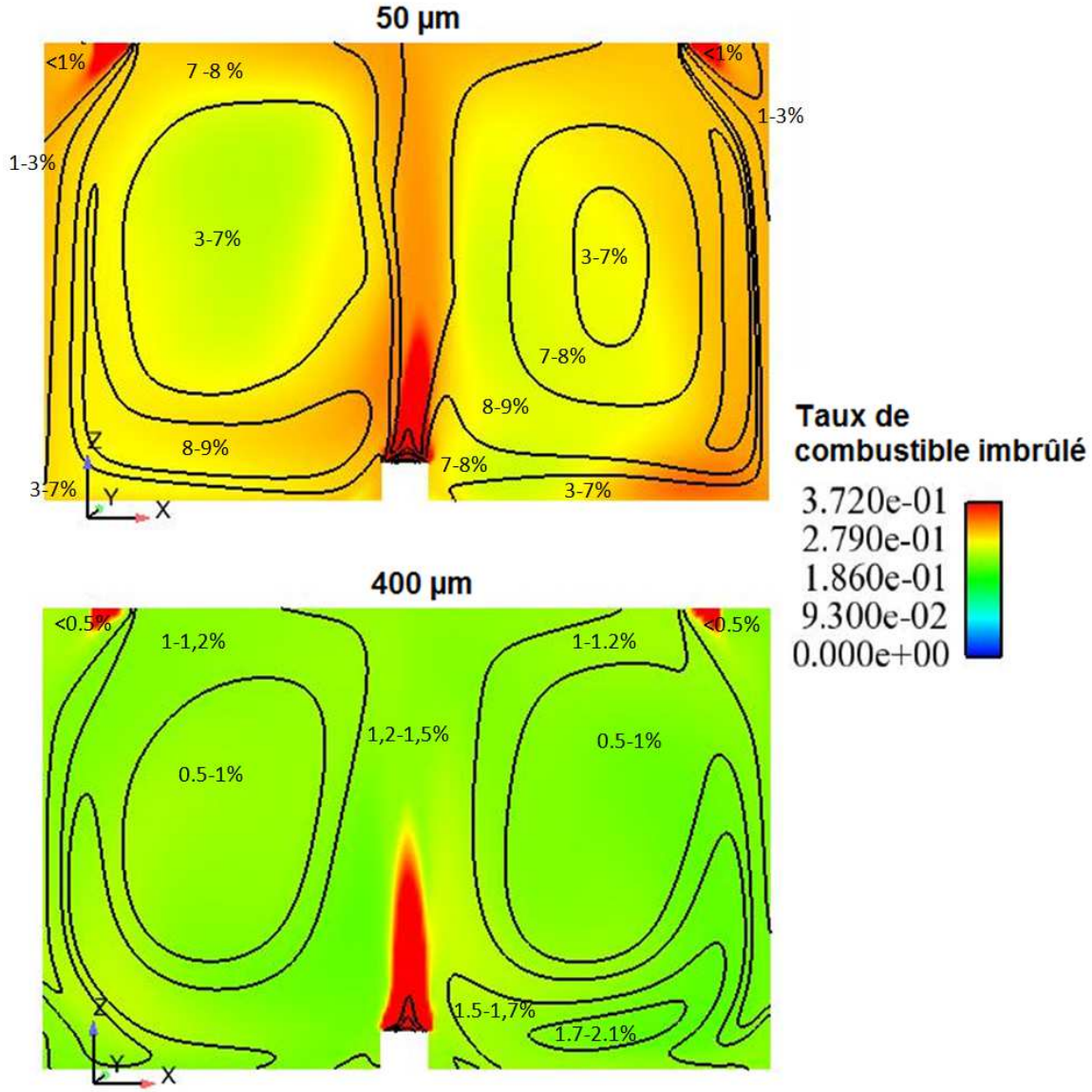


Fig.4.24 - Visualisation des iso-fraction massique de diluant (vapeur) superposées aux champs du taux de combustible imbrûlé

CONCLUSIONS ET PERSPECTIVES

L'objectif de cette thèse est d'améliorer la prédiction des extinctions d'incendies dans un contexte de simulations de configurations industrielles de grandes dimensions. Les efforts de modélisation se sont concentrés sur la description des écoulements réactifs turbulents altérés par la présence d'une phase d'eau liquide dispersée. Le modèle tient compte de l'interaction entre la phase liquide et la combustion.

Dans un premier temps, un modèle de combustion turbulente généralisé à plusieurs fractions de mélange est présenté. Ce modèle tient compte des effets d'un diluant sur le processus de réaction. Ainsi, les limites d'inflammabilité qui dépendent du taux de dilution permettent de prendre en compte une chimie finie. Le modèle ainsi établi permet entre autre de décrire un processus de combustion couplant l'état du mélange ternaire à cette chimie conditionnée par un critère d'inflammabilité. La PDF réduite à un support simple, permet de capter un grand nombre d'effets rarement pris en compte dans le cadre de la simulation d'extinction d'incendies par des brouillards d'eau. Le modèle proposé ici a l'avantage de prendre en compte les interactions entre les phases. La simplicité du modèle à limites d'inflammabilité variables a été retenue pour sa capacité à reproduire correctement les processus d'extinction qui s'opèrent lorsque le mélange est trop dilué ou trop refroidi.

On peut envisager quelques perspectives d'amélioration du modèle de combustion :

- Dans le contexte d'un mélange ternaire, la difficulté majeure est la description de la fonction de densité de probabilité du mélange. Nous avons considéré ici que les gouttes s'évaporent suffisamment loin du combustible ce qui nous a permis de présumer une forme simple de PDF. Cependant, une forme plus réaliste de la PDF décrivant le mélange ternaire permettrait d'éviter d'utiliser cette hypothèse. De plus, nous avons considéré qu'un modèle de relaxation linéaire pour la variance permettait de représenter les mélanges binaires successifs néanmoins, des fermetures cohérentes avec la forme de la PDF devraient aussi être établies.

- La description d'une cinétique chimique plus détaillée pourrait être envisagée. Dans le modèle, nous avons considéré un temps caractéristique de rappel des produits jusqu'à leur valeur prédite, très petit par rapport au temps caractéristique du mélange turbulent. Ceci induit une chimie infiniment rapide dans l'intervalle d'inflammabilité et une chimie infiniment lente hors du domaine d'inflammabilité. Paramétrer ce temps de rappel par rapport aux caractéristiques du gaz (température, proportions des constituants, etc.) rendrait possible la prise en compte d'un temps chimique fini à l'intérieur du domaine d'inflammabilité. Ce temps caractéristique de rappel, susceptible d'être supérieur au temps turbulent, ralentirait l'avancement de la réaction en fonction des caractéristiques de l'écoulement.

Dans un second temps, un modèle multiphasique permettant de décrire un brouillard d'eau est présenté. Ce modèle doit représenter les phénomènes d'extinctions d'incendie par les gouttes d'eau et doit donc interagir avec le modèle de combustion. La description eulérienne-eulérienne permet d'évaluer les flux de transfert interfaciaux qui dépendent des caractéristiques des phases (température et constitution du gaz, température et diamètre des gouttes). Ainsi, le modèle a permis de prendre en compte l'échauffement et l'évaporation des gouttes mais aussi le refroidissement et l'extinction des gaz réactifs. D'autres phénoménologies peuvent être prises en compte pour évaluer correctement l'extinction d'un feu par un brouillard d'eau :

- L'altération du débit de pyrolyse liée au refroidissement du foyer par les gouttes reste par exemple un sujet ouvert. Le débit de pyrolyse reste une donnée d'entrée de notre modèle mais pourrait être couplé avec les flux de chaleur reçus et avec le refroidissement des gouttes impactant le foyer. Dans le cadre de la mise en œuvre du modèle établi, une condition simple de dépôt a été utilisée. Elle permet aux gouttes de se déposer directement à la paroi lorsqu'elles y arrivent. Cependant, il existe des méthodes plus précises pour décrire le comportement des gouttes en paroi, le dépôt, et la création d'un film liquide.

- Le rayonnement (code Saturne utilise un module capable de décrire les transferts radiatifs) à travers le brouillard doit également être pris en compte. Un modèle de rayonnement est actuellement en cour d'implémentation dans le code mais nécessite un schéma tenant compte

des transferts radiatifs (diffusion-absorption) à travers les brouillards. Aujourd'hui, nous avons mis en place la possibilité d'utiliser le module P1 [59] dans le modèle mais un travail considérable reste à accomplir pour permettre son utilisation à des fins prédictives.

En tentant de décrire le refroidissement par transfert de masse et de chaleur entre les phases, nous nous sommes orientés vers un formalisme diphasique eulérien-eulérien pour décrire correctement la fraction massique et la température du liquide. Dans les configurations étudiées, une bonne prédiction des concentrations et du lieu d'évaporation de fines gouttes nécessite une description globale de leur trajectoire. En privilégiant ainsi la description des échanges de masse et de chaleur entre les phases, nous avons cherché à répondre à adapter un formalisme eulérien-eulérien homogène (sans glissement) pour en faire un modèle eulérien-eulérien avec glissement et capturer les effets de la traînée fortement conditionnée par la taille des gouttes. Le comportement des gouttes est bien cohérent avec les valeurs prises par le nombre de Stokes. Les petites gouttes, entraînées par la phase gazeuse, suivent les lignes de courant du panache et sont donc dispersées par les fumées dans l'ensemble du local. Les grosses gouttes, qui ont plus d'inertie, ont tendance à avoir des trajectoires balistiques et impactent la paroi plus rapidement. Elles ne s'évaporent pas totalement et ne contribuent donc que partiellement au refroidissement et à la dilution des gaz réactifs. On montre ainsi l'importance de prendre en compte la polydispersion pour la prédiction de la répartition spatiale de liquide. Chaque taille de goutte a un effet différent sur l'extinction : l'intervention dans la phase gaz ou le refroidissement de la surface de pyrolyse). Les simulations avec des brouillards polydisperses n'ont pas été effectuées mais sont réalisables dans la mesure où l'ensemble du modèle multi-fluide a été construit sur un formalisme « Sampling ». L'étude paramétrique d'extinction en fonction de la taille des gouttes injectées que nous avons effectuée a permis de caractériser la capacité des fines gouttelettes à refroidir l'environnement et le foyer. Néanmoins, les effets directs de refroidissement de la surface de pyrolyse n'ont pas été pris en compte.

Les travaux réalisés dans cette thèse ont permis d'intégrer et de valider un premier formalisme eulérien qui prend en compte à la fois les effets du mélange turbulent, de « chimie finie », de dilution et de l'évaporation dans le cadre de l'extinction incendie par brouillard d'eau.

Annexe A

Détermination de la covariance en fonction des 2 variances :

La complémentarité des trois fractions de mélange nous permet d'écrire :

$$\beta_1 + \beta_2 = 1 - \beta_3$$
$$(\beta_1 + \beta_2)^2 = (1 - \beta_3)^2$$
$$\beta_1^2 + \beta_2^2 + 2\beta_1\beta_2 = 1 - \beta_3^2 - 2\beta_3 \quad \text{(A.1)}$$

En moyennant l'équation 3.1, on tombe sur l'équation suivante :

$$\tilde{\beta}_1^2 + \tilde{\beta}_1^{"2} + \tilde{\beta}_2^2 + \tilde{\beta}_2^{"2} + 2\left(\tilde{\beta}_1\tilde{\beta}_2 + (\beta_1^{"}\beta_2^{"})\right) = 1 + \tilde{\beta}_3^2 + \tilde{\beta}_3^{"2} - 2\tilde{\beta}_3 \quad \text{(A.2)}$$

D'autre part, la somme des valeurs moyennes est aussi unitaire et, par le même procédé, on trouve l'équation suivante :

$$\tilde{\beta}_1^2 + \tilde{\beta}_2^2 + 2\tilde{\beta}_1\tilde{\beta}_2 = 1 + \tilde{\beta}_3^2 - 2\tilde{\beta}_3 \quad \text{(A.3)}$$

Par soustraction de l'expression A.3 à l'expression A.2 on obtient la formulation de la covariance en fonction des trois variances :

$$\widetilde{\beta_1^{"}\beta_2^{"}} = \frac{\tilde{\beta}_3^{"2} - \tilde{\beta}_1^{"2} - \tilde{\beta}_2^{"2}}{2} \quad \text{(A.5)}$$

Annexe B

Etablissement de l'équation de transport de la variance d'un scalaire inerte gazeux.

1) Etablissement de l'équation de transport de β_n^2

On utilise l'équation locale de continuité pour mettre l'équation locale sous forme non conservative.

$$\frac{\partial(\rho\beta_n)}{\partial t}+\frac{\partial}{\partial x_j}\left(\rho\beta_n u_j\right)=\frac{\partial}{\partial x_j}\left(-J_j^{\beta_n}\right) \qquad \frac{\partial(\rho)}{\partial t}+\frac{\partial}{\partial x_j}\left(\rho u_j\right)=0$$

$$\rho\left(\frac{\partial(\beta_n)}{\partial t}+u_j\frac{\partial}{\partial x_j}(\beta_n)\right)=\frac{\partial}{\partial x_j}\left(\rho D\frac{\partial\beta_n}{\partial x_j}\right) \tag{B.1}$$

On multiplie l'équation B.1 locale par $2\beta_n$.

$$2\beta_n\left[\rho\left(\frac{\partial(\beta_n)}{\partial t}+u_j\frac{\partial}{\partial x_j}(\beta_n)\right)=\frac{\partial}{\partial x_j}\left(\rho D\frac{\partial\beta_n}{\partial x_j}\right)\right]$$

$$\rho\left(\frac{\partial(\beta_n^2)}{\partial t}+u_j\frac{\partial}{\partial x_j}(\beta_n^2)\right)=\frac{\partial}{\partial x_j}\left(2\rho D\beta_n\frac{\partial\beta_n}{\partial x_j}\right)-2\rho D\frac{\partial\beta_n}{\partial x_j}\frac{\partial\beta_n}{\partial x_j} \tag{B.2}$$

Grâce à l'équation locale de continuité, l'équation B.2 peut être ré-écrite sous forme conservative

$$\frac{\partial(\rho\beta_n^2)}{\partial t}+\frac{\partial}{\partial x_j}\left(\rho u_j\beta_n^2\right)=-\frac{\partial}{\partial x_j}\left(J_j^{\beta_n^2}\right)-2\rho D\frac{\partial\beta_n}{\partial x_j}\frac{\partial\beta_n}{\partial x_j} \tag{B.3}$$

On note $J_j^{\beta_n^2}$ le flux de diffusion laminaire de β_n^2.

$$J_j^{\beta_n^2}=-\rho D\frac{\partial\beta_n^2}{\partial x_j}$$

2) Moyenne de l'équation B.3

On multiplie l'équation B.3 par la fonction de présence, puis on introduit la distribution avec les dérivées partielles sans oublier les termes supplémentaires liés à la non commutativité.

$$\chi_1\left[\frac{\partial(\rho\beta_n^2)}{\partial t}+\frac{\partial}{\partial x_j}\left(\rho u_j\beta_n^2\right)=-\frac{\partial}{\partial x_j}\left(J_j^{\beta_n^2}\right)-2\rho D\frac{\partial\beta_n}{\partial x_j}\frac{\partial\beta_n}{\partial x_j}\right]$$

$$\frac{\partial(\chi_1\rho\beta_n^2)}{\partial t}+\frac{\partial}{\partial x_j}\left(\chi_1\rho u_j\beta_n^2\right)=-\frac{\partial}{\partial x_j}\left(\chi_1 J_j^{\beta_n^2}\right)-2\chi_1\rho D\frac{\partial\beta_n}{\partial x_j}\frac{\partial\beta_n}{\partial x_j}+\gamma_{\beta_n^2} \tag{B.4}$$

Le terme supplémentaire s'écrit de la manière suivante :

$$\gamma_{\beta_n^2}=-\left[\rho\beta_n^2\left(u_j-u_{sj}\right)+J_j^{\beta_n^2}\right]n_{1,j}\delta_1$$

On intègre l'équation B.4 en volume :

$$\frac{\partial\left(\alpha_1\bar{\rho}_1\widetilde{\beta_n^2}\right)}{\partial t}+\frac{\partial}{\partial x_j}\left(\alpha_1\bar{\rho}_1\widetilde{u_j\beta_n^2}\right)=-\frac{\partial}{\partial x_j}\left(\alpha_1\overline{J_j^{\beta_n^2}}\right)-2\alpha_1\bar{\rho}_1 D\widetilde{\frac{\partial\beta_n}{\partial x_j}\frac{\partial\beta_n}{\partial x_j}}+\Gamma_{\beta_n^2} \qquad \text{(B.5)}$$

Le terme $\Gamma_{\beta_n^2}$ est l'intégrale en volume de par $\gamma_{\beta_n^2}$:

$$\Gamma_{\beta_n^2}=\left\langle\gamma_{\beta_n^2}\right\rangle$$

D'autre part, la décomposition de Favre fournit les égalités suivantes :

$$\widetilde{\beta_n^2}=\tilde{\beta}_n^2+\widetilde{\beta_n''^2}$$

$$\widetilde{u_j\beta_n^2}=\tilde{u}_j\tilde{\beta}_n^2+\tilde{u}_j\widetilde{\beta_n^{2''}}+2\tilde{\beta}_n\widetilde{\beta_n''u_j''}+\widetilde{\beta_n^{2''}u_j''}$$

$$\widetilde{\frac{\partial\beta_n}{\partial x_j}\frac{\partial\beta_n}{\partial x_j}}=\frac{\partial\tilde{\beta}_n}{\partial x_j}\frac{\partial\tilde{\beta}_n}{\partial x_j}+\widetilde{\frac{\partial\beta_n''}{\partial x_j}\frac{\partial\beta_n''}{\partial x_j}}$$

$$\alpha_1\overline{J_j^{\beta_n^2}}=\alpha_1\bar{\rho}_1 D\widetilde{\frac{\partial\beta_n^2}{\partial x_j}}=\alpha_1\bar{\rho}_1 D\frac{\partial\widetilde{\beta_n^2}}{\partial x_j}=\alpha_1\bar{\rho}_1 D\frac{\partial\tilde{\beta}_n^2}{\partial x_j}+\alpha_1\bar{\rho}_1 D\frac{\partial\widetilde{\beta_n''^2}}{\partial x_j}$$

3) Détermination de l'équation de transport de $\tilde{\beta}_n^2$

On utilise l'équation moyenne de continuité de la phase 1 pour mettre l'équation moyenne du scalaire sous forme non conservative.

$$\frac{\partial\left(\alpha_1\bar{\rho}_1\tilde{\beta}_n\right)}{\partial t}+\frac{\partial}{\partial x_j}\left(\alpha_1\bar{\rho}_1\tilde{\beta}_n\tilde{u}_j\right)=-\frac{\partial}{\partial x_j}\left(\alpha_1\overline{J_j^{\beta_n}}+\alpha_1\bar{\rho}_1\widetilde{\beta_n''u_j''}\right)+\Gamma_{\beta n}$$

$$\frac{\partial\left(\alpha_1\bar{\rho}_1\right)}{\partial t}+\frac{\partial}{\partial x_j}\left(\alpha_1\bar{\rho}_1\tilde{u}_j\right)=\Gamma_1$$

$$\left(\alpha_1\bar{\rho}_1\left(\frac{\partial\left(\tilde{\beta}_n\right)}{\partial t}+\tilde{u}_j\frac{\partial}{\partial x_j}\left(\tilde{\beta}_n\right)\right)+\tilde{\beta}_n\Gamma_1\right)=-\frac{\partial}{\partial x_j}\left(-\alpha_1\bar{\rho}_1 D\frac{\partial\tilde{\beta}_n}{\partial x_j}+\alpha_1\bar{\rho}_1\widetilde{\beta_n''u_j''}\right)+\Gamma_{\beta n} \qquad \text{(B.6)}$$

On multiplie l'équation B.6 du scalaire par $2\tilde{\beta}_n$

$$2\tilde{\beta}_n\left[\left(\alpha_1\bar{\rho}_1\left(\frac{\partial\left(\tilde{\beta}_n\right)}{\partial t}+\tilde{u}_j\frac{\partial}{\partial x_j}\left(\tilde{\beta}_n\right)\right)+\tilde{\beta}_n\Gamma_1\right)=-\frac{\partial}{\partial x_j}\left(-\alpha_1\bar{\rho}_1 D\frac{\partial\tilde{\beta}_n}{\partial x_j}+\alpha_1\bar{\rho}_1\widetilde{\beta_n''u_j''}\right)+\Gamma_{\beta n}\right]$$

$$\alpha_1\bar{\rho}_1\left(\frac{\partial\left(\tilde{\beta}_n^2\right)}{\partial t}+\tilde{u}_j\frac{\partial}{\partial x_j}\left(\tilde{\beta}_n^2\right)\right)+2\tilde{\beta}_n^2\Gamma_1=2\tilde{\beta}_n\frac{\partial}{\partial x_j}\left(\alpha_1\bar{\rho}_1 D\frac{\partial\tilde{\beta}_n}{\partial x_j}\right)-2\tilde{\beta}_n\frac{\partial}{\partial x_j}\left(\alpha_1\bar{\rho}_1\widetilde{\beta_n''u_j''}\right)+2\tilde{\beta}_n\Gamma_{\beta n}$$

(B.7)

On utilise à nouveau l'équation de continuité moyenne de la phase 1 pour écrire l'équation B.7 sous forme conservative.

$$\frac{\partial\left(\alpha_1\bar{\rho}_1\tilde{\beta}_n^2\right)}{\partial t}+\frac{\partial}{\partial x_j}\left(\alpha_1\bar{\rho}_1\tilde{u}_j\tilde{\beta}_n^2\right)-\tilde{\beta}_n^2\Gamma_1+2\tilde{\beta}_n^2\Gamma_1$$
$$=\frac{\partial}{\partial x_j}\left(2\alpha_1\bar{\rho}_1D\tilde{\beta}_n\frac{\partial\tilde{\beta}_n}{\partial x_j}\right)-2\alpha_1\bar{\rho}_1D\frac{\partial\tilde{\beta}_n}{\partial x_j}\frac{\partial\tilde{\beta}_n}{\partial x_j}-2\tilde{\beta}_n\frac{\partial}{\partial x_j}\left(\alpha_1\bar{\rho}_1\widetilde{\beta_n''u_j''}\right)+2\tilde{\beta}_n\Gamma_{\beta n}$$

$$\frac{\partial\left(\alpha_1\bar{\rho}_1\tilde{\beta}_n^2\right)}{\partial t}+\frac{\partial}{\partial x_j}\left(\alpha_1\bar{\rho}_1\tilde{u}_j\tilde{\beta}_n^2\right)$$
$$=\frac{\partial}{\partial x_j}\left(\alpha_1\bar{\rho}_1D\frac{\partial\tilde{\beta}_n^2}{\partial x_j}\right)-2\alpha_1\bar{\rho}_1D\frac{\partial\tilde{\beta}_n}{\partial x_j}\frac{\partial\tilde{\beta}_n}{\partial x_j}-2\tilde{\beta}_n\frac{\partial}{\partial x_j}\left(\alpha_1\bar{\rho}_1\widetilde{\beta_n''u_j''}\right)+2\tilde{\beta}_n\Gamma_{\beta n}-\tilde{\beta}_n^2\Gamma_1 \quad \text{(B.8)}$$

4) Soustraction de l'équation B.8 à l'équation B.5 :

$$\frac{\partial\left(\alpha_1\bar{\rho}_1\widetilde{\beta_n''^2}\right)}{\partial t}+\frac{\partial}{\partial x_j}\left(\alpha_1\bar{\rho}_1\left(\tilde{u}_j\widetilde{\beta_n''^2}+2\tilde{\beta}_n\widetilde{\beta_n''u_j''}+\widetilde{\beta_n''^2u_j''}\right)\right)$$
$$=\frac{\partial}{\partial x_j}\left(\alpha_1\bar{\rho}_1D\frac{\partial\widetilde{\beta_n''^2}}{\partial x_j}\right)-2\alpha_1\bar{\rho}_1D\widetilde{\frac{\partial\beta_n''}{\partial x_j}\frac{\partial\beta_n''}{\partial x_j}}+2\tilde{\beta}_n\frac{\partial}{\partial x_j}\left(\alpha_1\bar{\rho}_1\widetilde{\beta_n''u_j''}\right)+\tilde{\beta}_n^2\Gamma_1-2\tilde{\beta}_n\Gamma_{\beta n}+\Gamma_{\beta_n^2}$$

$$\frac{\partial\left(\alpha_1\bar{\rho}_1\widetilde{\beta_n''^2}\right)}{\partial t}+\frac{\partial}{\partial x_j}\left(\alpha_1\bar{\rho}_1\tilde{u}_j\widetilde{\beta_n''^2}\right)=\frac{\partial}{\partial x_j}\left(\alpha_1\bar{\rho}_1D\frac{\partial\widetilde{\beta_n''^2}}{\partial x_j}-\alpha_1\bar{\rho}_1\widetilde{\beta_n''^2u_j''}\right)$$
$$-2\alpha_1\bar{\rho}_1D\widetilde{\frac{\partial\beta_n''}{\partial x_j}\frac{\partial\beta_n''}{\partial x_j}}$$
$$+2\left(\tilde{\beta}_n\frac{\partial}{\partial x_j}\left(\alpha_1\bar{\rho}_1\widetilde{\beta_n''u_j''}\right)-\frac{\partial}{\partial x_j}\left(\alpha_1\bar{\rho}_1\tilde{\beta}_n\widetilde{\beta_n''^2u_j''}\right)\right)$$
$$+\tilde{\beta}_n^2\Gamma_1-2\tilde{\beta}_n\Gamma_{\beta n}+\Gamma_{\beta_n^2}$$

$$\frac{\partial\left(\alpha_1\bar{\rho}_1\widetilde{\beta_n''^2}\right)}{\partial t}+\frac{\partial}{\partial x_j}\left(\alpha_1\bar{\rho}_1\tilde{u}_j\widetilde{\beta_n''^2}\right)=-\frac{\partial}{\partial x_j}\left(\alpha_1J_j^{\widetilde{\beta_n''^2}}+\alpha_1\bar{\rho}_1\widetilde{\beta_n''^2u_j''}\right)$$
$$-2\alpha_1\bar{\rho}_1D\widetilde{\frac{\partial\beta_n''}{\partial x_j}\frac{\partial\beta_n''}{\partial x_j}}$$
$$+2\alpha_1\bar{\rho}_1\widetilde{\beta_n''u_j''}\frac{\partial\tilde{\beta}_n}{\partial x_j} \quad \text{(B.9)}$$
$$+\Gamma_{\widetilde{\beta_n''^2}}$$

On notera $J_j^{\widetilde{\beta_n''^2}}$, le flux de diffusion laminaire de $\widetilde{\beta_n''^2}$:

$$J_j^{\widetilde{\beta_n''^2}} = -\bar{\rho}_1 D \frac{\partial \widetilde{\beta_n''^2}}{\partial x_j}$$

D'autre part, on introduit ici $\Gamma_{\widetilde{\beta_n''^2}}$, le terme de production de la variance par les échanges interfaciaux :

$$\Gamma_{\widetilde{\beta_n''^2}} = \tilde{\beta}_n^2 \Gamma_1 - 2\tilde{\beta}_n \Gamma_{\beta n} + \Gamma_{\beta_n^2}$$

Ce terme peut être simplifié de la manière suivante :

$$\begin{aligned}
&\Gamma_{\widetilde{\beta_n''^2}} = \tilde{\beta}_n^2 \Gamma_1 - 2\tilde{\beta}_n \Gamma_{\beta n} + \Gamma_{\beta_n^2} \\
&= \tilde{\beta}_n^2 \langle \gamma_1 \rangle - 2\tilde{\beta}_n \langle \gamma_{\beta n} \rangle + \langle \gamma_{\beta_n^2} \rangle \\
&= \tilde{\beta}_n^2 \langle \gamma_1 \rangle - 2\tilde{\beta}_n \langle \gamma_{\beta n} \rangle + \left\langle -\left[\rho \beta_n^2 \left(u_j - u_{sj} \right) + J_j^{\beta_n^2} \right] n_{1,\mathrm{j}} \delta_1 \right\rangle \\
&= \tilde{\beta}_n^2 \langle \gamma_1 \rangle - 2\tilde{\beta}_n \langle \gamma_{\beta n} \rangle + \left\langle -\left[\rho \beta_n^2 \left(u_j - u_{sj} \right) - \rho D \frac{\partial \beta_n^2}{\partial x_j} \right] n_{1,\mathrm{j}} \delta_1 \right\rangle \\
&= \tilde{\beta}_n^2 \langle \gamma_1 \rangle - 2\tilde{\beta}_n \langle \gamma_{\beta n} \rangle + \left\langle -\beta_n \left[\rho \beta_n \left(u_j - u_{sj} \right) - 2\rho D \frac{\partial \beta_n}{\partial x_j} \right] n_{1,\mathrm{j}} \delta_1 \right\rangle \\
&= \tilde{\beta}_n^2 \langle \gamma_1 \rangle - 2\tilde{\beta}_n \langle \gamma_{\beta n} \rangle + \left\langle \beta_n \gamma_{\beta n} - \beta_n \left[-\rho D \frac{\partial \beta_n}{\partial x_j} \right] n_{1,\mathrm{j}} \delta_1 \right\rangle \\
&= \tilde{\beta}_n^2 \langle \gamma_1 \rangle - 2\tilde{\beta}_n \langle \gamma_{\beta n} \rangle + \left\langle \beta_n \gamma_{\beta n} - \beta_n J_j^{\beta n} n_{1,\mathrm{j}} \delta_1 \right\rangle \\
&= \tilde{\beta}_n^2 \langle \gamma_1 \rangle - 2\tilde{\beta}_n \langle \gamma_{\beta n} \rangle + \left\langle \beta_n \gamma_{\beta n} + \beta_n \left(\gamma_{\beta n} - \beta_n \gamma_1 \right) \right\rangle \\
&= \tilde{\beta}_n^2 \langle \gamma_1 \rangle - 2\tilde{\beta}_n \langle \gamma_{\beta n} \rangle + 2\langle \beta_n \gamma_{\beta n} \rangle - \langle \beta_n^2 \gamma_1 \rangle \\
&= 2\left(\langle \beta_n \gamma_{\beta n} \rangle - \tilde{\beta}_n \langle \gamma_{\beta n} \rangle \right) + \tilde{\beta}_n^2 \langle \gamma_1 \rangle - \langle \beta_n^2 \gamma_1 \rangle
\end{aligned}$$

$$\Gamma_{\widetilde{\beta_n''^2}} = 2\left(\langle \beta_n \gamma_{\beta n} \rangle - \tilde{\beta}_n \langle \gamma_{\beta n} \rangle \right) + \tilde{\beta}_n^2 \langle \gamma_1 \rangle - \langle \beta_n^2 \gamma_1 \rangle \qquad \text{(B.10)}$$

Annexe C

Etablissement des flux de masse et de chaleur d'une goutte avec la phase porteuse

Conservation de la masse :
L'équation de conservation de la masse dans le gaz (de masse volumique ρ_f) induit la conservation du débit à travers chaque sphère de rayon r :

$$4\pi\, r^2 \rho_f\ u = \dot{m}_{vap} \tag{C.1}$$

Conservation de la vapeur d'eau :
L'équation de conservation de la vapeur dans le gaz s'écrit :

$$\frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2 \rho_f\ u\, y_{vap}\right) - \frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2 \rho_f D_{vap}\frac{\partial y_{vap}}{\partial r}\right) = 0 \tag{C.2}$$

En intégrant une première fois cette équation on montre :

$$4\pi r^2 \rho_f u y_{vap} - 4\pi r^2 \rho_f D_{vap}\frac{\partial y_{vap}}{\partial r} = 4\pi R_P^2 \rho_f u\ y_{vap} - 4\pi R_p^2 \rho_f D_{vap}\frac{\partial y_{vap}}{\partial r}\Bigg)_{R_P} = \dot{m}_{vap} \tag{C.3}$$

Soit :

$$\dot{m}_{vap}\ y_{vap} - 4\pi r^2 \rho_f D_{vap}\frac{\partial y_{vap}}{\partial r} = \dot{m}_{vap} \tag{C.4}$$

Ou encore :

$$-4\pi r^2 \rho_f D_{vap}\frac{\partial y_{vap}}{\partial r} = \dot{m}_{vap}\left(1 - y_{vap}\right) \tag{C.5}$$

On intègre ensuite cette équation entre R_P (où la concentration est égale à la pression de vapeur saturante y_{vap}^{sat}) et R_1 (où la concentration en vapeur d'eau atteint sa valeur à l'infinie y_{vap}^{∞}).

En supposant la masse volumique constante dans le film.

$$\int_{R_P}^{R1}\frac{\partial y_{vap}}{\left(1-y_{vap}\right)} = \frac{\dot{m}_{vap}}{4\pi\rho_f D_{vap}}\int_{R_P}^{R1} -\frac{\partial r}{r^2} \tag{C.6}$$

$$\ln\left(\frac{1-y_{vap}^{sat}}{1-y_{vap}^{\infty}}\right) = \frac{\dot{m}_{vap}}{4\pi\rho_f D_{vap}}\left(\frac{1}{R_1} - \frac{1}{R_p}\right) \tag{C.7}$$

L'épaisseur du film de diffusion massique est donnée par l'égalisation du flux de diffusion moléculaire et le transfert convectif entre les gouttes de l'écoulement [1] :

$$\delta_{fm} = R_1 - R_p = \frac{2R_p}{Sh-2} \tag{C.8}$$

Finalement il est possible d'évaluer le taux d'évaporation de la particule :

$$-\dot{m}_p = \dot{m}_{vap} = 2\pi R_p \left(\rho_f D_{vap}\right) Sh \ \ln\left(1+B_M\right) \tag{C.9}$$

$$B_M = \frac{y_{vap}^{sat}\left(T_p\right) - y_{vap}^{\infty}}{1 - y_{vap}^{sat}\left(T_p\right)} \tag{C.10}$$

Conservation de l'énergie :

Elle se traduit par la relation suivante

$$\frac{\dot{m}_{vap}}{4\pi} C_f \frac{\partial}{\partial r}(T) - \frac{\partial}{\partial r}\left(r^2 \lambda_f \frac{\partial T}{\partial r}\right) = 0 \tag{C.11}$$

De manière analogue, cette équation va être intégrée deux fois avec comme conditions aux limites une température T_S en R_p et une température T_∞ en R_2. Nécessairement il devient important de définir une largeur de film de diffusion thermique :

$$\delta_{ft} = R_2 - R_p = \frac{2R_p}{Nu - 2} \tag{C.12}$$

Alors le flux de chaleur reçu par la goutte peut être retrouvé via l'expression suivante :

$$\dot{Q}_p = 2\pi R_p \lambda_f Nu \frac{\ln\left(1+B_T\right)}{B_T}\left(T_\infty - T_s\right) \tag{C.13}$$

Avec le nombre de transfert de chaleur de Spalding :

$$B_T = \exp\left(\frac{\dot{m}_{vap} C_f}{2\pi R_P \lambda_f Nu}\right) - 1 \tag{C.14}$$

REFERENCE

[1] Abramzon B., Sirignano W., A., 1987. Approximate theory of a single droplet vaporization in a convective field: effects of variable properties, Stefan flow and transient liquid heating. ASME/JSME Thermal Engineering Joint Conference Proceeding_ Vol.1: pp. 11-18.

[2] Aggarawal S.K., Tong A.Y., Sirignano W.A., 1984. A comparison of vaproization models in spray calculations. AIAA J. 22 Vol.10: pp.1448-1457.

[3] Ananth R., Mowrey R. C., 2007. Ultra-fine Water Mist Extinction Dynamics of a Co-flow Diffusion Flame, Combustion Science and Technology Journal.

[4] Archambeau F., Mechitoua N., Sakiz M., 2004. Code_Saturne: a finite volume code for the computation of turbulent incompressible flows - Industrial applications, Int. J. Finite Vol. 1: pp1-62.

[5] Babrauskas V., 2003. Ignition Handbook, chapter 4, pages 41_140. Fire Science Publishers.

[6] Back G. G., DiNenno P. J., Leonard J. T., Darwin R. L., 1996. Full Scale Testing of Water Mist Fire Extinguishing Systems for Navy Shipboard Machinery Space: Phase I - Unobstructed Spaces, NRL Memorandum Report NRL/MR/6180-96-7830.

[7] Bataille F., Younis B.A., Belletre J., Lallemand A., 2003. Prediction of Turbulent Heat Transfer with Surface Blowing using a Non-linear Algebraic Heat Flux Model, Journal of Heat and Fluid Flow 24, 680-684.

[8] Beck J. C., Watkins A. P., 2002. On the Development of Spray Submodels Based on Droplet Size Moments, Journal of Computational Physics 182, 586-621.

[9] Bellan J., Harstad K., 1987. The details of the convective evaporation of dense and dilute clusters of drops. Int. J. Heat Mass Transfer 30 (6), 1083-1093.

[10] Belletre J., Bataille F., Lallemand A., 1999. Prediction of Thermal Protection of Walls by Blowing with Different Fluids, Int. J. Therm. Sci. 38, 492-500.

[11] Bilger R.W., 1976. Turbulent jet diffusion flames, Prog. Energy Combust. Sci., 1:87-109.

[12] Bill R. G., Hansen R. L., Richards K., 1997. Fine Spray (Water Mist) Protection of Shipboard Engine Rooms, Fire Safety Journal 29: 317-336.

[13] Blanchat T., O'Hern T., Kearney S., Ricks A., Jernigan D., 2009. Validation experiments to determine radiation partitioning of heat flux to an object in a fully turbulent fire, Proceedings of the Combustion Institute 32: 2511-2518.

[14] Borghi R.,1978. Réaction chimiques en milieu turbulent Ph.D Université Pierre et Marie Curie, Paris VI.

[15] Borghi R., 1988. Turbulent Combustion Modeling, Prog. Energy Combust. Sci., 14:245-292.

[16] Borghi R., Destriau M., 1995. Ed.Technip., ISBN 2-7108-0684-3

[17] Borghi R., Pourbaix E., 1983. Lagrangian Models for Turbulent Combustion, Symposium on f Turbulent Shear Flows 4, University of Karlsuhe, Karlsuhe.

[18] Borghi R., Moreau P., 1977. Acta Astronautica, Vol.4, pp 321-341.

[19] Buckmaster J., Clavin P., Linan A., Matalon M., Peters N., Sivashinsky G., Williams F.A.,1985. Combustion theory and modeling, Proceedings of the Combustion Institute, pp 1-19, http://dx.doi.org/10.1016/j.proci.2004.08.280.

[20] Burke S. P., Schumann T. E. W., 1928. Diffusion flames, Ind-Eng. Chem, 20, 998.

[21] Carlsson J., 1999. Fire Modelling Using CFD. Technical report 5025, Lund Institute of Technology, Lund University, Lund, Sweden.

[22] Chelliah H. K., Law C. K., Ueda T., Smooke M. D., Williams F. A., 1990. Twenty-Third Symposium (International) on Combustion, The Combustion Institute, Pittsburgh, p. 503.

[23] Chen L., Zhu W., Cai X., Pan L., Liao G., 2009. Experimental study of water mist fire suppression in tunnels under longitudinal ventilation, Building and Environment Vol. 44 pp. 446-455.

[24] Collin A., Boulet P., Parent G., Lacroix D., 2006. Numerical simulation of a water spray Radiation attenuation related to spray dynamics, International Journal of Thermal Sciences Vol. 46: pp. 856-868.

[25] Collin A., Boulet P., Parent G., Vetrano M.R., Buchlin J.M., 2008. Dynamics and thermal behaviour of water sprays, International Journal of Thermal Sciences Vol.47: 399-407.

[26] Consalvi J.L., Porterie B., Loraud, J.C., 2004. Dynamic and radiative aspects of fire-water mist interactions, Combustion Science and Technology, Vol.176: pp.721-752

[27] Cortina T., 2003. Update on AFFF environments issues, Workshop on fire suppression technologies, Mobile, Alabama.

[28] Cox G., 1995. Compartment fire modelling in Combustion Fundamentals of Fire, ed., Academic Press, San diego, CA

[29] Crowe C., Sommergeld M., Tsuji Y., 1998. Multiphase flows and particles, CRC Press.

[30] Demoulin F. X., Borghi R., 2002. Modeling of Turbulent Spray Combustion with Application to Diesel Like Experiment, The Combustion Institute.

[31] Dold J.W., 2007. Premixed flames modelled with thermally sensitive intermediate branching kinetics, Combustion Theory and Modelling, 11(6), pp. 909-948

[32] Douce A., Mechitoua N., 2004. Mise en œuvre dans Code_Saturne des modélisations physiques particulières. Tomes 3 : Transfert thermique radiatif en milieu gris semi-transparent.

[33] Downie B., Polymeropoulos C., 1995. Interaction of a water mist with a buoyant methane diffusion flame, Fire Safety Journal 24: pp. 359-381.

[34] Drew D., A., 1983. Theory of Dispersed Multiphase Flow, Edite by Meyer Richard, E., Academic Press, pp. 173-190.

[35] Drew D.A., Lahey R.T., 1993. Analytical modeling of multiphase flow. Particulate Two Phase Flow. Roco MC, Ed., pp. 509-566.

[36] Drysdale D., 1999. Fire Dynamics Second edition.

[37] Escaich A., 2000. Une description améliorée de la combustion turbulente dans les flammes de charbon pulvérisé, Thèse, Université de Rouen.

[38] Escaich A., Plion P., Garreton-Bruguières D., Gonzalez, M., 1999. Improvements of description of gas turbulent combustion in pulverised coal flames, Proceedings of the Joint Meeting of the British, German and French Sections of Combustion Institute.

[39] Faeth G. M., Hsiang L. P., Wu P. K., 1995. Structure and breakup properties of sprays, Int. J. Multiphase Flow Vol. 21, Suppl. pp. 99-127.

[40] Fartouk A., Plion P., Mura A., 2011. A multi-mixture fraction closure for dilute turbulent diffusion flame, 23rd Processing ICDERS, Irvine, USA.

[41] Février P., Simonin O., 2000. Theoretical and experimental modelling particle flow, van Karman Institute for fluid dynamics.

[42] Fire Dynamics Simulator (V5), Technical Reference Guide, NIST (National Institute of Standards and technology).

[43] Flores D.V., Fletcher T.H., 1995. A Two Mixture Fraction, Approach for Modeling Turbulent Combustion of Coal, Volatiles and Char Oxidation Products, CWS-MNS International, Combustion Institute and AFRC, pp 638–643.

[44] Forney G.P., McGrattan K.B., 1995. Computing the Effect of Sprinkler Induced Gas Flow Sprays on Fire, Proceedings of International Conference on Fire Research and Engineering.

[45] Gately B., 2000. Portable value, fire prevention.

[46] Girimaji S., S., 1991. Assumed β-pdf Model for Turbulent Mixing: Validation and Extension to Multiple Scalar Mixing, Combustion Science and Technology, Vol. 78, pp. 177-196.

[47] Gouttière V., Charette A., Kiss L., 2002. Comparative performance of non gray gas modelling techniques. Numerical Heat Transfer, Part B, 41: 361–381.

[48] Grant G., Brenton J., Drysdale D., 2000. Fire suppression by water sprays, Progress in Energy and Combustion Science 26: 79-130, http://dx.doi.org/10.1016/S0360-1285(99)00012-X

[49] Godsave G. A. E., 1953. Studies of the combustion of drops in a fuel spray: the burning of single drops of fuel. In: Proceedings of the Fourth Symposium (International) on Combusion. Combustion Institute, Baltimore, MD, 818-830.

[50] Halle G. M., Querry M.R., 1973. Optical constants of water in the 200nm to 200µm wavelength region. Appl. Opt, 12: 555-563.

[51] Hasse C., Peters N., 2005. A two mixture fraction flamelet model applied to split injections in a DI Diesel engine, Proceedings of the Combustion Institute, Vol 30, Issue 2, pp 2755-2762.

[52] Hasse C., Peters N., 2004. Eulerian Spray Modeling of Diesel Injection in a High-Pressure / High Temperature Chamber, Combust Inst 30 , pp. 2755-2762.

[53] Herterich O., 1960. Water as an extinguishing agent, Alfred Huthig Publishing Compagny, Heidelberg.

[54] Heskestad G., 2002. Extinction of gas and liquid pool fires with water sprays, Fire Safety Journal 38, 30 1-317.

[55] Huang H. et al, 2009. Experimental study of fire growth in a reduced-scale compartment under different approaching external wind conditions, Fire Safety Journal 44 311–321.

[56] Hubbard G.L., Denny V.E., Mils A.F., 1975. Droplet evaporation: effects of transients and variable properties. Int. J. Heat Mass Transfer 18, 1003-1008.

[57] Husted B. P., Holmstedt G., Hertzberg T., 2004. The physics behind water mist systems, Proc. IWMA conference.

[58] Ishii M., Hibiki T., 2006. Thermo-Fluid Dynamics of Two-Phase Flow.

[59] Ishimaru, A., 1997. Wave Propagation and Scattering in Random Media. IEEE Press, Oxford.

[60] Joulin G., 1975, Etude asymptotique d'une flamme laminaire pré-mélangée entretenue par deux réactions consécutives, Thèse de Doctorat de l'Université de Poitiers.

[61] Joulin G., Liñán A., Ludford G. S. S., Peters N., Schmidt-Lainé C., 1985. Flames with chainbranching chain-breaking kinetics, SIAM Journal on Applied Mathematics, 45 pp. 420-434.

[62] Jones W. P., 1994, "Turbulence modelling and numerical solution methods for variable density and combusting flows," in Turbulent Reacting Flows, P. A. Libby and F. Williams, Eds. Academic Press London, pp. 309–374.

[63] Kataoka I., 1986. Local instant formulation of two-phase flow, Int. J. Multiphase Flow, Vol 12, pp. 745-758

[64] Kent J.H, Bilger R.W., 1973, Turbulent diffusion flames, Symposium (International) on Combustion, Volume 14, Issue 1, Pages 615-625

[65] Keum S.H., 2009. An Improved Representative Interactive Flamelet Model Accounting for Evaporation Effect in Reaction Space (RIF-ER).

[66] Kim M. B., Jang Y. J., Yoon M. O., 1997. Extinction Limit of a Pool Fire with a Water Mist, Fire Safety Journal 28, 295-306

[67] Kong S. C., Senecal P. K., Reitz R.D., 1999. Developments in Spray Modeling in Diesel and Direct-Injection Gasoline Engines, Oil & Gas Science and Technology 54, 197-204.

[68] Kostka M., Knudsen E., Pitsch H., 2009., Towards regime identification and appropriate chemistry tabulation for computation of autoigniting turbulent reacting flows, Center of Turbulence Research (CTR) Annual Research Briefs 2009, pp. 199-207.

[69] Kuo K. K., 1986. Ed. John Wiley ans Sons, Inc, ISBN,0-471-62605-8.

[70] Lance M., 1979. Thèse, Université Claude Bernard, Lyon.

[71] Lassus J., 2006. Risque d'inflammation de gaz imbrûlés au cours d'un incendie en milieu confiné-ventilé.

[72] Laurent C., Lavergne G., Villedieu P., 2010. Quadrature method of moments for modelling multi-component spray vaporization, International Journal of Multiphase Flow 36 51–59.

[73] Laurent F., Massot M., 2001. Multi-fluid modelling of laminar polydisperse spray flames: origin, assumptions and comparison of sectional and sampling methods, Combustion theory modelling, vol. 5, pp 537-572.

[74] Lazzarini A.K., Krauss R.H, Chelliah H. K., 2000. Extinction Conditions of Non-Premixed Flames with Fine Droplets of water/NaOH Solutions, Combustion Institute 28th.

[75] Lentati A.M., Chelliah H.K., 1998. Dynamics of water droplets in a counterflow field and their effect on flame extinction. Combustion and Flame, 115, 158-179.

[76] Libby P. A., Williams F. A., 1994. Turbulent Reacting flows, pp. 2-61, Acadamic Press London.

[77] Libby P. A., Williams F. A., 2000. Presumed PDF analysis of partially premixed turbulent combustion, Combust. Sci. Technol., 161: 351-390.

[78] Liñán A., 1974, "The assymptotic structure of counterflow diffusion flames for large activation energies," Acta Astronautica, vol. 1, pp. 1007–1039.

[79] Liñán A., Crespo A., 1976, "An assymptotic analysis of unsteady diffusion flames for large activation energies," Combust. Sci. Technol., vol. 14, pp. 95–117.

[80] Liñán A., Williams F. A., 1993. Fundamental aspects of combustion, Oxford University Press,New York.

[81] Liu F., Becker H. A., Bindar Y., 1998. A comparative study of radiative heat transfer modelling in gas-fired furnaces using the simple grey gas and the weighted-sum-of-grey gases models. International Journal of Heat and Mass Transfer, 41: 3357-3371.

[82] Liu Z., Kim A. K., 2000. A review of water mist fire suppression systems-fundamental studies. J Fire Protect Eng, 10(3) pp. 32-50.

[83] Liu Z., Kim A. K., 2001. A review of water mist fire suppression systems-application studies. J Fire Protect Eng. 11(1).

[84] Liu Z., Carpenter D., Kim A.K., 2005. Characteristics of large cooking oil pool fires and their extinguishment by water mist, Journal of Loss Prevention in the Process Industries 19 516-526.

[85] Liu Z., Kim A. K., Carpenter D., 2007. A study of portable water mist fire extinguishers used for extinguishment of multiple fire types, Fire Safety Journal 42: 25-42.

[86] Lockwood F. C., Naguib A., 1975. Combustion and Flamme, Vol. 24, pp. 124-209.

[87] Lueptow R. M., Sheppard D. T., 2005. Characterization of fire sprinkler spray using particle image velocimetry, AtomiTation and Sprays, vol. 15, pp, 341-362.

[88] Luo M., Beck V., 1997. Stoichiometric Combustion Model with Oxygen Threshold Improved Predictions for Fire Simulation Using a CFD Model," Fire Safety Science -- Proceedings of the Fifth International Symposium, International Association for Fire Safety Science, pp. 559-570, http://dx.doi.org/10.3801/IAFSS.FSS.5-559

[89] Magnussen B. F., Hjertager B. H., 1976. On Mathematical Modelling of Turbulent Combustion with Special Emphasis on Soot Formation and Combustion, 16th Symposium (Int.) on Combustion, pp. 719-729.

[90] Mahmoud A.O.M., Bouslimi J., Maad R. B., 2009. Experimental study of the effects of a thermal plume entrainment mode on the flow structure: Application to fire, Fire Safety Journal 44: 475-486.

[91] Mashayek F., Jaberi F. A., Miller R. S., Givi P., 1997. Dispersion and polydispersity of droplets in stationary isotropic turbulence, Int. J. Multiphase Flow 23 (2), 337-355.

[92] Mesli B., Gögalp I., 2000. Extinction limits of opposed jet turbulent premixed methane air Flames with sprays of water and NaCl-water solution, Combustion Science and Technology, Vol.153, pp. 193-211.

[93] Meroney R. N. 2007. Flow and Transport Processes with Complex Obstructions, chapter 8, pp. 271-310. Springer Netherlands, Dordrecht, Netherlands.

[94] Miller R. S., Harstad K., Bellan J., 1998. Evaluation of equilibrium and non-equilibrium evaporation models for many-droplet gas-liquid flow simulations, International Journal of Multiphase Flow 24 1025-1055.

[95] Mura A., Demoulin F. X., 2007. Lagrangian Intermittent Modelling of Turbulent Lifted Flames, Combustion Theory and Modelling, Vol. 11, No. 2, 223-253.

[96] Nam S., 1999. Numerical simulation of the penetration capability of sprinkler sprays, Fire Safety Journal 32, 307-329.

[97] Ndubizu C. C., Ananth R., Tatem P. A., Motevalli V., 1998. On water mist fire suppression mechanisms in a gaseous diffusion flame, Fire Safety Journal 31, 253-276.

[98] Nerisson P., 2009. Modélisation du transfert des aérosols dans un local ventilé.

[99] NFPA 75: Standard on the Installation of Water Mist Fire Protection Systems. National Fire Protection Association, 2000

[100] Nmira F., Consalvi J. L., Kaiss A., Fernandez-Pello A. C., Porterie B., 2009. A numerical study of water mist mitigation of tunnel fires, Fire Safety Journal 44, 198-211.

[101] Nmira F., Kaiss A., Consalvi J. L., Porterie B., 2008. Predicting fire suppression efficiency using polydisperse water sprays, Numerical Heat Transfer Part A 53: 132-156, http://dx.doi.org/10.1080/10407780701453669

[102] Modest M. F., 1993. Radiative Heat Transfer. New-York, McGraw-Hill.

[103] NPR : Note de principe THYC (V4.1), 2004. EDF R&D.

[104] Novozhilov V. B., 2001. Computational Fluid Dynamics Modelling of Compartment Fires, Progress in Energy and Combustion Science, 27: 611-666, http://dx.doi.org/10.1016/S0360-1285(01)00005-3

[105] Novozhilov V., Harvie D. J. E., Kent J. H., 1997. A Computational Fluid Dynamics Study of Wood Fire Extinguishment by Water Sprinkler, Fire Safety Journal 29, 259-282.

[106] Novozhilov V., Moghtaderi B., Fletcher D. F., Kent J. H., 1996. Computational Fluid Dynamics Modelling of Wood Combustion, Fire Safety Journal 27, 69-96.

[107] Novozhilov V., Moghtaderi B., Kent J., H., Fletcher D., F., 1999. Solid fire extinguishment by a water spray, Fire Safety Journal 32 pp. 119-135.

[108] Obounou M., Gonzales M., Borghi R., 1994. A Lagrangian Model for Predicting Turbulent Diffusion Flames with Chimical Kinetic Effects, Combust Inst 25 , pp. 1107-1113.

[109] Peters N., 1984. Laminar diffusion flamelet models in non-premixed turbulent combustion, Prog. Energy Combust. Sci., 10:319-339.

[110] Peters N., 2000. Turbulent combustion, Cambridge University Press.

[111] Peters N., Rogg B., 1993. Lecture Notes in Physics, Vol.m15, Springer-Verlag, New York.

[112] Perrin R., 2005. Analyse physique et modélisation d'écoulements incompressibles instationnaires turbulents autour d'un cylindre circulaire à grand nombre de Reynolds.

[113] Poinsot T., Veynante D., 2001, Theoretical and numerical combustion, Edwards, Inc.

[114] Prasad K., Li C., Kailasanath K., 1999. Simulation of water mist suppression of small scale methanol liquid pool fires, Fire Safety Journal 33: 185-212, http://dx.doi.org/10.1016/S0379-7112(99)00028-4.

[115] Prasad K., Li C., Kailasanath K., Ndubizu C., Ananth R., Tatem P.A., 1998. Numerical modeling of water mist suppression of methane-air diffusion flames, Combustion, Science and Technology, 132: 325-364, http://dx.doi.org/10.1080/00102209808952019

[116] Prasad K., Patnaik G., Kailasanath K., 2002. A numerical study of water-mist suppression of large scale compartment fires, Fire Safety Journal, 37: 569-589, http://dx.doi.org/10.1016/S0379-7112(02)00004-8.

[117] Ranz W. E., Marshall W.R., 1952. Evaporation from drops. Chem. Eng. Prog., Vol. 48 pp. 141-146.

[118] Rasbash D. J, 1985. The extinction of fire with plain water: a review. 1st international symposium on fire safety science, pp. 1145-64.

[119] Richard J., Garo J. P., Souil J. M., Vantelon J. P. 2003. On the Flame Structure at the Base of a Pool Fire Interacting with a Water Mist, Experimental Thermal and Fluid Science 27, 439-448.

[120] Richard J., Garo J. P., Souil J. M., Vantelon J. P., Knorre V. G., 2003. Chemical and Physical Effects of Vapor Addition on Diffusion Flames, Fire Safety Journal 38, 569-587.

[121] Robin V., Mura A., 2011. “Etude et modélisation des interactions entre un foyer et l’aspersion d’eau,” Rapport du contrat d’accompagnement de thèse, I81 / MFEE-8610-AAP-5910066315, Contrat CNRS(UPR3646) EDF782544.

[122] Robin V., Mura A., Champion M., Hasegawa T., 2010, “Modelling the effects of thermal expansion on scalar fluxes in turbulent flames,” Combust. Sci. Technol., vol. 182, pp. 449–464.

[123] Robin V., Mura A., Champion M., 2011, “Direct and indirect thermal expansion effects in turbulent premixed flames,” J. Fluid Mech., vol. 689, pp. 149–182.

[124] Robin V., Mura A., Champion M., soumis 2012, “A simple strategy to model the effects of thermal expansion on turbulent transports in premixed flames,” C. R. Acad. Sc. Mech. II.

[125] Sadiki A., Maltsev A., Wegner B., Flemming F., Kempf A., Janicka J., 2006. Unsteady methods (URANS and LES) for simulation of combustion systems, International Journal of Thermal Sciences 45 760-773.

[126] Sagaut P., 2002. Springer, Large Eddy Simulation for Incompressible Flows, An introduction.

[127] Sapa B., El-Rabii H., Gay L., Mechitoua N., Plion P., Wang H. Y., 2009. URANS Approach for buoyancy dominated turbulent diffusion flames.

[128] Schneider L., Le Lostec N., Villedieu P., Sadiki A., 2009. A moment method for polydisperse sprays, C. R. Acad. Sci. Paris, Ser. I 347 691-696.

[129] Schwartz, L. 1961, Hermann, Paris

[130] Sirignano W.A., 1993. Fluid dynamics of sprays, J. Fluids Eng. 115, 345-378.

[131] Soufiani A., Taine J., 1997. High temperature gas radiative property parameters of statistical narrow band model for H2O, CO2 and CO and correlated-k model for H2O and CO2. International Journal of Heat and Mass Transfer, 40(4): 987-991.

[132] Spalding D.B. 1953. The combustion of liquid fuels. In: Proceedings of the Fourth Symposium (International) on Combustion.Combustion Institute, Baltimore, MD, 847-864.

[133] Strahle, W., 1982 “Estimation of some correlations in a premixed reactive turbulent flow,” Combust. Sci. Technol., vol. 29, pp. 243–260.

[134] Suuberg E. M , Milosavljevic I., Lilly W. D., 1994. Behavior of charring materials in simulated fire environments.

[135] Taine J., Soufiani A., 1999. Gas radiatives properties: From spectroscopic data to approximate models. In Advances in Heat Transfer, vol. 33: pp 295-414.

[136] Van Maele K., Merci B., 2006, Application of two buoyancy-modified k–ε turbulence models to different types of buoyant plumes , Fire Safety Journal 41 122–138

[137] Vervisch L., Veynante D., 1998. 6ieme Ecole de Combustion, Saint Pierre d'Oléron.

[138] Veynante D., Vervisch L., 2001. Turbulent Combustion Modeling, Edwards, Inc.

[139] Vié A., 2010. Simulation aux grandes échelles d'écoulements diphasiques turbulents à phase liquide dispersée.

[140] Viollet P. L., Simonin O., 1993. Cours de l'Ecole Nationale des Ponts et Chaussées sur l'aérodynamique de la combustion.

[141] Warnatz J., Maas U., Dibble R.W., Combustion: physical and chemical fundamentals, modeling and simulation, experiments, pollutant formation, Spinger, 2nd Edition, 1999.

[142] Williams F. A., 1985. Combustion theory, 2nd Edition, Addision-Wesley Publishing Companay, Menlo Park, California

[143] Williams F.A., 1977. Mechanisms of fire spread, Symposium (International) on Combustion, Vol 16, Issue 1, 1281-1294

[144] Yang D., Hu L. H., Huo R., Jiang Y. Q., Liu S., Tang F., 2010. Experimental study on buoyant flow stratification induced by a fire in a horizontal channel, Applied Thermal Engineering 30 872-878

[145] Yao B., Chow W.K., 2005. Numerical modeling for compartment fire environment under a solid-cone water spray, Applied Mathematical Modelling 30, pp. 1571-1586.

[146] Yoon, S.S., (2005) Droplet distributions at the liquid core of a turbulent spray, Physics of Fluid 17.

[147] Zabetakis M. G., (1965) Flammability characteristics of combustible gases and vapours : bulletin 627. US Dept of the Interior, Bureau of Mines.

[148] Zegers E. J. P., Williams B. A., Sheinson R. S., Fleming J. W., 2000. Dynamics and Suppression Effectiveness of Monodisperse Water Droplets in Non-Premixed Counterflow Flames, Proceeding of the Combustion Institute 28: 2931-2938.

[149] Zel'dovich Ya B., Barenblatt G. I., Librovich V. B., Makhviladze G.M.,1985. The mathematical theory of combustion and explosions, Consultants Bureau, A Division of Plenum Publishing Corporation, New York 11.

[150] Zimmer L., Etude numérique et expérimentale de la turbulence en écoulement gaz-gouttelettes. Applications aux rideaux d'eau en présence de vent latéral, PhD thesis, Institut Von Karman et UHP Nancy 1, 2001.

Référence site internet

[w1] http://futura-sciences.com/fr/news/t/physique-1/d/un-beton-plus-sur-en-cas-dincendie_5396/

Résumé

Dans le cadre de la sécurité incendie, et de la prévention de départ d'un feu en environnement confiné, un objectif majeur consiste en l'amélioration des procédés d'extinction et plus précisément de la pulvérisation de brouillards d'eau qui est un moyen de lutte largement utilisé. Les simulations numériques doivent prévoir l'efficacité des brouillards en évaluant précisément l'évolution spatio-temporelle des caractéristiques du foyer incendie en présence d'un champ pulvérisé de gouttelettes. Pour déterminer les fractions massiques d'eau sous forme liquide ou vapeur, les concentrations des produits formés ainsi que les niveaux de températures en tout point du local, nous présentons ici le développement d'un modèle apte à décrire un milieu réactif dans lequel la stabilité de la flamme est altérée par la présence de gouttelettes d'eau. Un formalisme diphasique eulérien-eulérien est utilisé pour modéliser le transport des gouttelettes qui interagissent avec le milieu réactif en le refroidissant et en le diluant via l'introduction de vapeur d'eau issue du processus d'évaporation. Le modèle sous-jacent est une approche de combustion à multi-fractions de mélange avec un diagramme de reconstitution des espèces mettant en compétition un domaine inflammable et un domaine non inflammable. Les modèles finalement obtenus ont été implantés dans Code_Saturne, un logiciel de mécanique des fluides qui a récemment été adapté à l'étude des incendies. La validation de ces modèles a été effectuée à partir de données expérimentales issues de la littérature, et sur des cas test d'échelle intégrale.

Mots-clef : incendie, combustion, extinction, diphasique, brouillard d'eau, simulations CFD.

Abstract

In the context of fire safety and to fight against the development of a fire in a confined building, a major objective is to improve the processes of extinction and one which is widely known: spray of water mist. Numerical simulations should be able to predict the efficiency of water mist by evaluating precisely the spatio-temporal evolution of fire characteristics in the vicinity of water droplets sprayed on. In order to determine liquid or vapor mass fraction of water, the combustion products concentration as well as temperature levels everywhere in the local, we introduce here the development of a model able to describe reactive gas where the flame stability is more or less affected by the water mist. An eulerian-eulerian two-phase flow formalism is used to describe water droplets which interact with the reactive gas by cooling and diluting it with water vapor coming from evaporation process. The underlying combustion model is the multi-fraction mixing approach with species determination diagram involving a competitive flammable and non-flammable domain. The final models have been implemented in Code_Saturne, a computational fluid dynamics software recently modified for fire studies. The validation of these models is performed from experimental of literature, and full scale cases.

Keywords: fire, combustion, extinction, two-phase flow, water mist, CFD simulations.