



Université
de Toulouse

THÈSE

En vue de l'obtention du

DOCTORAT DE L'UNIVERSITÉ DE TOULOUSE

Délivré par :

Institut National Polytechnique de Toulouse (Toulouse INP)

Discipline ou spécialité :

Surfaces Interfaces Continentales Hydrologie

Présentée et soutenue par :

M. MOHAMED BELERRAJOUL

le mercredi 6 février 2019

Titre :

Modélisation multi-échelle de la combustion d'un nuage de particules

Ecole doctorale :

Sciences de l'Univers de l'Environnement et de l'Espace (SDUEE)

Unité de recherche :

Institut de Mécanique des Fluides de Toulouse (I.M.F.T.)

Directeur(s) de Thèse :

M. MICHEL QUINTARD

M. YOHAN DAVIT

Rapporteurs :

M. FABRICE GOLFIER, UNIVERSITÉ LORRAINE

M. OLIVIER DUFAUD, UNIVERSITÉ LORRAINE

Membre(s) du jury :

M. OLIVIER SIMONIN, INP TOULOUSE, Président

M. FABIEN DUVAL, IRSN ST PAUL LES DURANCE, Invité

M. JEAN-CLAUDE LATCHE, IRSN ST PAUL LES DURANCE, Membre

Mme ENRICA MASI, UNIVERSITE PAUL SABATIER, Membre

M. MICHEL QUINTARD, CNRS TOULOUSE, Membre

M. YOHAN DAVIT, CNRS TOULOUSE, Invité

A ma mère,
pour son amour
son soutien ...

Remerciements

Les travaux de recherche présentés dans ce document se sont déroulés au service des agressions internes et des risques industriels (SA2I) de l'Institut de Radioprotection et de Sécurité Nucléaire (IRSN) en collaboration avec le Groupe d'Études sur les Milieux Poreux (GEMP) de l'Institut de mécanique des fluides de Toulouse (IMFT). A ce titre, je tiens à remercier l'ensemble des personnes de ces deux organismes qui ont rendu ce travail possible.

Mes premiers remerciements vont à mon directeur de thèse, Michel Quintard, directeur de recherche à l'IMFT, pour avoir accepté de diriger ces travaux, ceci malgré la distance qui sépare nos lieux de travail quotidiens. Je lui exprime, ici, mon plus grand respect et ma profonde reconnaissance pour tout l'intérêt qu'il a porté à mon travail au cours de ces trois années. Par sa grande contribution scientifique et technique, son aide aura été inestimable dans les différents choix stratégiques de ce projet.

Je remercie chaleureusement mes co-directeurs de thèse, Yohan Davit, chargé de recherche à l'IMFT et Fabien Duval, ingénieur au laboratoire de l'incendie et des explosions (LIE) à l'IRSN, leurs conseils avisés ainsi que leur ouverture d'esprit ont largement contribué à l'aboutissement de ce travail. J'ai pu, par ailleurs, apprécier au cours de ces trois années de thèse, leurs qualités humaines et leurs encouragements constants qui ont été d'un grand soutien. Fabien et Yohan ont su me communiquer leur goût pour la recherche et pour le travail bien fait, ainsi, je tiens à leur exprimer ici ma reconnaissance et ma profonde gratitude.

Mes remerciements vont également à l'ensemble des membres de mon jury de thèse qui ont consenti à consacrer de leur temps à l'évaluation de mes travaux. Je remercie, tout particulièrement, Monsieur Olivier Simonin, professeur des Universités et président de l'Institut National Polytechnique de Toulouse (INPT), pour avoir assuré la présidence du jury et pour les discussions scientifiques passionnantes et très instructives que nous avons pu avoir ensemble. J'adresse aussi mes sincères remerciements à Monsieur Olivier Dufaud, professeur des Universités à l'Université de Lorraine, et à Monsieur Fabrice Golfier, maître de conférences et HDR au laboratoire GeoRessources, pour avoir accepté d'être rapporteurs et pour avoir porté une attention rigoureuse à ce mémoire. Je remercie également Madame Enrica Masi, maître de conférences à l'Université Paul Sabatier et Monsieur Jean-Claude Latché, expert à l'IRSN, qui ont accepté de faire partie du jury de thèse.

Au sein de l'IRSN Cadarache, je remercie vivement Monsieur Laurent Audouin, chef du LIE pour son soutien, ainsi que Monsieur Jean Battiston et Madame Joëlle Fleurot, chefs successifs du service SA2I, de m'avoir bien accueilli au sein du SA2I. Je tiens aussi à remercier Richard Gonzalez, adjoint à la direction de la recherche en Sécurité à l'IRSN pour ses conseils avisés ainsi que Monsieur Jean-Claude Latché qui a su tant de fois m'aider à trouver les solutions pour débloquer les situations difficiles durant cette thèse. Je remercie également l'ensemble des personnes que j'ai pu côtoyer au cours de ces trois années à LIE. Merci à Fabrice, Samuel, Germain, Céline, Laura, Jean-Paul, Philippe, François, Matthieu, William, Sarah et Pascale. Un grand merci à mes amis du LIE : Adithya, Miriam, Jianwei, Chady, Pierre-Antoine qui ont su me soutenir durant cette aventure.

Merci de tout mon cœur à tous mes amis qui m'ont encouragé tout au long de cette thèse, Mehdi, Taoufik (al khal), Adeline et Marouane. Votre amitié était une source de force dans cette thèse. Je profite de ces quelques lignes pour remercier Youssef Benama, Abdessamad et Lhoucine Idbourkha, qui m'ont soutenu de toutes les manières possibles durant mes études en classe préparatoire. Merci à ma famille et à Salima pour leur soutien, leurs encouragements et pour tout ce qu'ils m'ont apporté.

Résumé

La présence de fines particules de matières oxydables est rencontrée dans de nombreuses situations industrielles. Le risque d'explosion de poussières présente une menace constante pour les industries de transformation qui fabriquent, utilisent ou manipulent des poudres ou des poussières de matières combustibles. Dans le secteur nucléaire, les scénarios envisagés traitent, en particulier, le risque d'explosion de poussières de graphite liées aux opérations de démantèlement des réacteurs Uranium Naturel Graphite Gaz. La problématique considérée, dans le cadre de ce travail de thèse, est celle de la combustion d'un mélange dilué gaz-particules. L'objectif de cette thèse est de développer un modèle Euler-Lagrange macroscopique permettant de prédire la vitesse laminaire de flamme qui est une des données essentielles pour les modèles de vitesse de flamme turbulente utilisés dans l'évaluation des risques d'explosion de poussières. Dans un premier temps, les équations macroscopiques de transferts massique et thermique sont dérivées à partir de la méthode de prise de moyenne volumique. L'intérêt de l'approche utilisée ici est de proposer des problèmes de fermeture permettant d'estimer les coefficients de transferts effectifs, tels que les coefficients d'échanges thermiques et le coefficient effectif de la réaction hétérogène. Dans un deuxième temps, des simulations Euler-Lagrange sont utilisées pour déterminer la vitesse de flamme laminaire diphasique plane en fonction des caractéristiques du mélange gazeux et des poussières de graphite. Le modèle proposé dans ce travail est comparé au modèle Euler-Lagrange classique basé sur la résolution du problème de couche limite pour une particule isolée en milieu infini. Cette étude montre que les effets du taux de dilution et des échanges indirects entre les particules ne sont pas systématiquement négligeables dans les échanges macroscopiques entre les deux phases. D'autre part, la présente étude laisse entrevoir la potentialité de l'approche proposée pour les simulations détaillées de l'écoulement diphasique.

Mots clés : Combustion, modélisation multi-échelle, écoulement diphasique, transferts de chaleur et de masse, approche Euler-Lagrange, prise de moyenne volumique, vitesse de flamme laminaire, réaction hétérogène.

Abstract

The presence of fine particles of oxidizable materials is encountered in many industrial situations. The risk of dust explosion presents a constant threat in transformation industries that manufacture, use or manipulate powders or combustible materials dusts. In nuclear safety analysis, one of the main scenarios is the risk of graphite dust explosion that may occur during decommissioning operations of Uranium Natural Graphite Gas reactors. The issue considered in this thesis is related to combustion of a dilute gas-particle mixture. This work aims at developing a macroscopic Euler-Lagrange model for predicting laminar flame velocity, which is one of the essential data for turbulent flame velocity models used to evaluate the risk of dust explosion. First, the macroscopic heat and mass transfer equations are derived using the volume averaging method. The major interest of the proposed approach is to provide closure problems that allow to estimate the effective transport coefficients, such as heat exchange coefficients and the effective coefficient of the heterogeneous reaction. Second, Euler-Lagrange simulations are used to determine the plane two-phase laminar flame velocity as a function of gas mixture and graphite dust characteristics. The proposed model is compared to the classical Euler-Lagrange model based on the resolution of the boundary layer problem in the vicinity of an isolated particle in an infinite medium. Results show that the dilution rate and the indirect particle-particle exchanges are not systematically negligible in the macroscopic exchanges between the two-phases. On the other hand, this study suggests the potentiality of the proposed approach for detailed simulations of two-phase flow.

Key words: Combustion, multi-scale modelling, two-phase flow, heat and mass transfer, Euler-Lagrange approach, volume averaging method, laminar burning velocity, heterogeneous reactions

Table des matières

Nomenclature	7
1 Introduction générale	13
1.1 Contexte	13
1.1.1 Le risque d'explosion de poussières dans les analyses de sûreté	13
1.1.2 Déflagration d'un nuage de poussières : phénoménologie	15
1.1.3 Outils d'évaluation	16
1.1.4 Estimation de la vitesse de combustion laminaire	17
1.2 Description Euler-Lagrange utilisée pour les simulations détaillées	19
1.2.1 Equations locales instantanées de la phase continue	19
1.2.2 Equations macroscopiques de la phase continue	24
1.2.3 Description lagrangienne de la phase dispersée	27
1.2.4 Lois de fermeture	29
1.3 Fermeture des termes d'échange aux interfaces : approche classique	31
1.3.1 Echanges de masse	34
1.3.2 Echange de quantité de mouvement	35
1.3.3 Echanges thermiques	36
1.4 Motivations et objectifs	38
2 Modélisation macroscopique des échanges thermiques gaz-particules	40
2.1 Problème à l'échelle locale	41
2.2 Changement d'échelle	41
2.2.1 Equations de transport à l'échelle macroscopique	41
2.2.2 Problème local pour les fluctuations	44
2.3 Fermetures des équations filtrées	46
2.3.1 Proposition de fermeture pour les fluctuations	47
2.3.2 Modèle macroscopique : Euler-Lagrange	49
2.4 Comparaison théorique avec l'approche classique	58
2.5 Résultats et discussion	61
2.5.1 Evaluation de la fermeture quasi-stationnaire	61
2.5.2 Evaluation de l'approximation diagonale de la matrice des coefficients d'échange	65
2.5.3 Discussion	69
2.6 Conclusion	70
3 Modélisation macroscopique des échanges massiques gaz-particules : application au carbone	72
3.1 Problème à l'échelle locale	73
3.1.1 Modèle réactif des particules de carbone	73
3.1.2 Equations de transport à l'échelle locale	74
3.2 Changement d'échelle	75
3.2.1 Equations de transport à échelle macroscopique	75
3.2.2 Problème locale pour les fluctuations	78
3.3 Fermeture des équations filtrées	80
3.3.1 Proposition de fermeture pour les fluctuations	80

Table des matières

3.3.2	Forme fermée des équations macroscopiques	82
3.4	Résultats et discussion	84
3.4.1	Résultats pour une particule isolée	84
3.4.2	Evaluation de la fermeture quasi-stationnaire	87
3.5	Conclusion	90
4	Simulations de flammes laminaires diphasiques	91
4.1	Flammes gazeuses	92
4.1.1	Rappels sur la structure des flammes laminaires planes	92
4.1.2	Solution analytique	95
4.1.3	Simulations mono-dimensionnelles	98
4.2	Flammes diphasiques	102
4.2.1	Configuration et allumage	102
4.2.2	Choix du filtre	103
4.2.3	Détermination de la vitesse du front de flamme	106
4.2.4	Caractéristiques des flammes	108
4.3	Conclusions	112
	Conclusions et perspectives	114
	Appendices	117
A	Equations locales instantanées	119
A.1	Transfert de matière multi-constituant	119
A.2	Equations locales instantanées de la phase continue	123
A.3	Bilan d'enthalpie sensible du mélange aux interfaces	127
B	Equations lagrangienne de la phase dispersée	129
C	Propriétés de l'opérateur de moyenne volumique	131
D	Résolution du problème de couche limite massique	133
E	Résolution des problèmes de fermeture	136
E.1	Solutions analytique pour la cellule unitaire 1D	136
E.2	Coefficient <i>lumped</i> pour un milieu périodique	138
E.3	Méthode de résolution des problèmes de fermeture quasi-stationnaire	138
	Bibliographie	140

Nomenclature

Lettres romaines	
A_p	surface de la particule p
$A_{\beta\sigma}$	interface entre les phases β et σ
B	constante pré-exponentielle
C_D	coefficient de traînée
C_M	coefficient de masse ajoutée
C_H	coefficient de Basset
$c_{p,k}$	chaleur massique de l'espèce k
d_p	diamètre de la particule p
D_a	nombre de Damköhler
D_{kj}	coefficient de diffusion binaire
e_β	énergie interne de la phase β
E_a	énergie d'activation
$\mathbf{f}_{\beta p}$	force exercée par le fluide sur une particule
g	fonction poids
\mathbf{g}	accélération de la pesanteur
h_k	enthalpie de l'espèce k
H_k	enthalpie sensible de l'espèce k
$\mathbf{j}_{\beta,k}$	flux de diffusion de l'espèce k dans la phase β
l_β	longueur caractéristique à l'échelle microscopique
L_β	longueur caractéristique à l'échelle macroscopique
L_p	distance inter-particules
m_p	masse de la particule p
\dot{m}_p	taux de consommation de la particule p
M	nombre de Mach
$\mathbf{n}_{\beta\sigma}$	vecteur unitaire normal à l'interface $A_{\beta\sigma}$, dirigé de la phase β vers la phase σ
N_V	nombre des espèces chimiques
N_V	nombre total de particules contenues dans le volume de prise de moyenne
Nu	nombre de Nusselt
Pe	nombre de Péclet
Pr	nombre de Prandtl
P^{th}	pression thermodynamique
p	pression dynamique
\mathbf{q}_η	flux de chaleur dans la phase η
$Q_{\beta p}$	flux de transfert thermique de la phase β à la particule p
r_p	rayon de la particule p
r_0	rayon du volume de prise de moyenne
R	constante des gaz parfaits
Re_p	nombre de Reynolds particulaire
s_L	vitesse de flamme laminaire
s_T	vitesse de flamme turbulent
Sh	nombre de Sherwood
Sc	nombre de Schmidt

Table des matières

T_η	température de la phase η
T_p	température de la particule p
T_a	température d'activation
T_0	température initiale
\mathbf{u}_p	vitesse de la particule p
\mathbf{u}_β	vitesse instantanée de la phase continue
V_p	volume de la particule p
$\mathbf{V}_{\beta,k}$	vitesse de diffusion massique de l'espèce k dans la phase β
\mathbf{w}	vitesse de déplacement de l'interface
W_k	masse molaire d'espèce k
\mathbf{x}_p	position des particules p
X_k	fraction molaire de l'espèce k
$Y_{\beta,k}$	fraction massique de l'espèce k dans la phase β
<hr/>	
Lettres grecques	
ρ_k	masse volumique de l'espèce k
λ_β	conductivité thermique de la phase continue β
$\boldsymbol{\tau}$	tenseur des contraintes visqueuses
σ_p	chargement massique en particules
$\dot{\omega}$	taux de réaction homogène
ϖ	taux de réaction hétérogène
ψ	taux net d'avancement de la réaction hétérogène
\mathcal{Q}_j	taux d'avancement de la réaction j
ϕ	richesse du mélange
$\dot{\omega}_{\beta,T}$	quantité de chaleur dégagée par la réaction
λ	conductivité thermique
μ_k	viscosité dynamique de l'espèce k
$\Delta h_{f,k}^0$	enthalpie de formation de l'espèce k
ΔH_v	chaleur massique dégagée par l'oxydation
$\delta_{\beta\sigma}$	distribution de Dirac associée à l'interface
γ_η	fonction caractéristique de la phase η
α_η	fraction volumique de la phase η
\mathcal{V}	volume élémentaire représentatif
$\nu_{\eta,k}$	coefficient stoechiométrique de l'espèce k associée à la réaction dans la phase η
β	phase continue
σ	phase dispersée
<hr/>	
Opérateurs	
$\langle a_\beta \rangle$	moyenne spatiale
\bar{a}_β	moyenne pondérée intrinsèque
\tilde{a}_β	moyenne de Favre pondérée par la masse volumique
a'	fluctuation associée à la moyenne pondérée intrinsèque
a''	fluctuation associée à la moyenne de Favre
$a^{(A_p)}$	moyenne sur la surface de la particule p
$a_\beta^{(0)}$	champ localement non-perturbé
$a_\beta^{(1)}$	champ localement perturbé

Table des figures

1.1	Explosion des silos agricoles de Blaye en Gironde en 1997	13
1.2	Réacteur modéré au graphite en attente de démantèlement	14
1.3	Chambre à vide du tokamak ITER	14
1.4	Type de flamme homogène [51]	16
1.5	Type de flamme hétérogène [51]	16
1.6	Définition du volume de prise de moyenne	25
1.7	Différents types de couplage entre les phases solide et fluide en fonction de la fraction volumique de la phase dispersée α_σ [44]	38
2.1	Région macroscopique d'un milieu diphasique et volume de prise de moyenne associé	42
2.2	Cellule unitaire de Chang	58
2.3	Coefficient d'échange adimensionnalisé	59
2.4	Milieu stratifié 1D avec $N_V = 3$	62
2.5	Comparaison entre la solution de référence et modèle quasi-stationnaire	64
2.6	Comparaison entre la solution de référence, le modèle quasi-stationnaire et le modèle complet	65
2.7	Micro-structure bidimensionnel	66
2.8	Comparaison entre la cellule de Chang et la cellule périodique	67
2.9	Comparaison des résultats de la solution de référence avec celles du modèle macroscopique quasi-stationnaire et de l'approximation <i>lumped</i> quasi-stationnaire - $N_V = 3$	68
2.10	Comparaison des résultats de la solution de référence avec celles du modèle macroscopique quasi-stationnaire et de l'approximation <i>lumped</i> quasi-stationnaire - $N_V = 7$	69
2.11	Comparaison des résultats de la solution de référence avec celles du modèle macroscopique quasi-stationnaire et de l'approximation diagonale quasi-stationnaire - $N_V = 7$	69
3.1	Modèle à film unique	73
3.2	Modèle à double film	74
3.3	Évolution de f en fonction de la fraction volumique de la phase continue	85
3.4	Evolution du taux effectif d'avancement de la réaction en fonction du nombre de Damköhler	85
3.5	Evolution du taux effectif d'avancement de la réaction en fonction du nombre de Damköhler effectif	86
3.6	Particule de carbone isolée	87
3.7	Evolution du coefficient de transfert de masse K en fonction de T_p	88
3.8	Evolution du diamètre de la particule en fonction du temps adimensionnalisé	89
3.9	Evolution de la température de la particule en fonction du temps adimensionnalisé	89
4.1	Représentation schématique de la structure d'une flamme de prémélange laminaire 1D	92
4.2	Configuration des simulations mono-dimensionnelles de flamme de prémélange	98
4.3	Evolution de la vitesse de flamme s_L en fonction du temps déterminée à partir de la condition de saut Eq. (4.1.19) et par intégration du terme source Eq. (4.1.20) pour les deux types d'allumage	99
4.4	Profil de température dans le front de flamme	99

Table des figures

4.5	Evolution de la vitesse de flamme s_L en fonction du temps après allumage pour le schéma cinétique à une étape	101
4.6	Prédictions du schéma cinétique à une étape en fonction de la composition du mélange	102
4.7	Configuration des simulations mono-dimensionnelles de flamme diphasique	103
4.8	Filtres mono-dimensionnels g_{\square} , g_{\wedge} et g_{\square} pour $b_{\square} = 1$	104
4.9	Profils de fraction volumique solide et de température dans le cas du filtre boîte	105
4.10	Profils de fraction volumique solide et de température dans le cas du filtre triangulaire	105
4.11	Profils de fraction volumique solide et de température dans le cas du filtre quadratique	105
4.12	Profils de température dans la phase continue et température de particule pour $b_{\square} = 2L_p$ (gauche) et $b_{\square} = 6L_p$ (droite).	106
4.13	Evolution de la vitesse de combustion à partir de la condition de saut Eq. (4.1.19) pour un chargement $\sigma_p = 100 \text{ g.m}^{-3}$, un diamètre $d_p = 2 \cdot 10^{-5} \text{ m}$ et une richesse gazeuse initiale nulle.	107
4.14	Profils de fraction volumique et de température dans le front de flamme aux instants t_1 et t_2 dans le régime quasi-stationnaire et comparaison avec le profil de l'onde progressive $f(x) \equiv f(x - s_a(t_2 - t_1), t_1)$	108
4.15	Influence du chargement et de la richesse gazeuse initiale sur la vitesse de flamme	109
4.16	Structure du front de flamme pour le chargement $\sigma_p = 100 \text{ g.m}^{-3}$ dans le cas $vm = 0$ (gauche) et $vm = 0.2$ (droite)	110
4.17	Structure du front de flamme pour le chargement $\sigma_p = 300 \text{ g.m}^{-3}$ dans le cas $vm = 0$ (gauche) et $vm = 0.2$ (droite)	110
4.18	Influence du diamètre de particule sur la vitesse de flamme	111
4.19	Influence des fermetures adoptées pour les termes d'échange sur les profils de concentration (gauche) et de température (droite) dans le front de flamme. Lignes pleines (resp. pointillées) : fermetures classiques (resp. <i>lumped</i>)	112
D.1	Couche limite massique	134

Liste des tableaux

2.1	Paramètres pour les expériences numériques	63
2.2	Coefficients d'échange thermique pour $\alpha_\sigma = 10^{-3}$ et différentes valeurs de N_γ	67
3.1	Paramètres physiques de l'étude	88
4.1	Propriétés physiques utilisées pour les comparaisons avec la solution analytique de la propagation d'une flamme de prémélange	99
4.2	Propriétés physiques utilisées pour les prédictions du schéma cinétique à une étape	100
4.3	Paramètres associés au taux de réaction Eq. (4.1.54) de la réaction homogène	101
4.4	Propriétés physiques des particules de graphite	103
A.1	Coefficients de diffusion binaire $\mathcal{D}(\times 10^{-6} m^2/s)$ à $T_\beta = 1000K$ et $P_\beta = 1atm$	120
A.2	La masse molaire et la somme du volume atomique des constituants de mélange	121
A.3	Variation des coefficients de diffusion adimensionnels par les coefficients binaires par rapport au N_2	121
A.4	Variation des coefficients de diffusion adimensionnels par les coefficients diagonaux	122

Chapitre 1

Introduction générale

1.1 Contexte

1.1.1 Le risque d'explosion de poussières dans les analyses de sûreté

Les explosions de poussière résultent de l'inflammation de particules organiques ou métalliques de petite taille, typiquement de diamètre $d_p \lesssim 10^{-4}$ m, en suspension dans un mélange gazeux. La présence de fines particules de matière oxydable se rencontre dans de nombreuses situations de sorte que le risque d'explosion de poussières concerne la quasi-totalité des domaines industriels [41, 70].

La première explosion de poussières est référencée en 1785 [36, 41], il s'agit d'une explosion de farine dans une boulangerie de Turin. Suite à l'explosion de poussières dans l'état de l'Iowa survenue en 1919 et provoquant la mort de 43 personnes, la National Fire Protection Association (NFPA) a été créée aux USA. En 1956 la NFPA a publié un rapport recensant 1123 explosions de poussières aux USA de 1900 à 1956 [41]. Entre 1980 et 2005, le US Chemical Safety Board (CSB) a signalé 281 autres explosions de poussières dites majeures [120] faisant 119 morts et 718 blessés. Au Japon, 269 explosions de poussières ont été rapportées sur la période de 1952 à 1995 [94]. En Allemagne, 357 explosions ont été rapportées pour une période allant de 1965 à 1985 [41]. En France, de nombreuses explosions ont également été recensées [36, 70], celle des silos agricoles de Metz en 1982 entraînant le décès de 12 personnes et celle de Blaye en 1997 causant la mort de 11 personnes font parties des accidents les plus marquants. Cette liste non-exhaustive montre que les risques d'explosion de poussières présentent une menace constante pour les industries qui fabriquent, utilisent et/ou manipulent des poudres ou des poussières de matières combustibles.



FIGURE 1.1 – Explosion des silos agricoles de Blaye en Gironde en 1997

Dans le secteur nucléaire, des situations de risque d'explosion de poussières sont liées aux opérations de démantèlement des réacteurs de la filière nucléaire dite UNGG (Uranium Naturel Graphite Gaz) [30, 31, 133]. Il s'agit historiquement de la première filière nucléaire française avec des réacteurs construits au cours de la période 1950-1960. La technologie UNGG utilise l'uranium naturel sous forme métallique comme combustible pour la fission nucléaire, les barreaux de combustible sont placés dans des caissons

contenant un empilement de graphite jouant le rôle de modérateur neutronique et le fluide caloporteur assurant le refroidissement est du dioxyde de carbone gazeux. Si les réacteurs de la filière UNGG sont aujourd'hui tous à l'arrêt, les opérations de démantèlement ne sont pas terminées et le risque d'explosion des déchets de graphite sous forme pulvérulente ne peut pas être négligé systématiquement [31]. La présence de ces poussières de graphite provient des opérations de démantèlement en elles-mêmes mais peut aussi provenir de la ruine des caissons réacteurs (corrosion, séisme, ...). Enfin, le risque d'explosion ne peut pas non plus être écarté lors des opérations de reprise et de conditionnement des déchets dans des silos de stockage. Par ailleurs, la probabilité du risque d'explosion et sa sévérité pourraient être modifiées par la présence de poussières métalliques fréquemment rencontrées sur les sites en démantèlement [30, 31]. Ces poussières constituées principalement de fer et de magnésium proviennent des opérations de démantèlement mais peuvent également être le résultat de l'érosion des différentes structures pendant le fonctionnement du réacteur.



FIGURE 1.2 – Réacteur modéré au graphite en attente de démantèlement

D'autres situations de risque d'explosion de poussières sont concernées dans le secteur nucléaire, c'est le cas en particulier de l'installation expérimentale ITER (International Thermonuclear Experimental Reactor) en cas d'accident de perte de confinement du réacteur [137]. Lors d'un accident d'entrée d'air ou d'eau dans la chambre à vide du tokamak, les poussières de béryllium et de tungstène [71, 118, 119] issues de l'érosion des parois de la chambre à vide par le plasma peuvent être remises en suspension et réagir avec l'air ou la vapeur d'eau présente. Les dégâts matériels et potentiellement humains provoqués par l'explosion sont accompagnés d'un risque radiologique et toxique selon le type de particules rejeté dans l'environnement. La sévérité de l'explosion est principalement liée au scénario considéré puisque dans le cas d'un accident d'entrée d'eau, l'hydrogène généré par l'oxydation des poussières contribue également à la formation d'une atmosphère explosive dans la chambre de confinement [69].

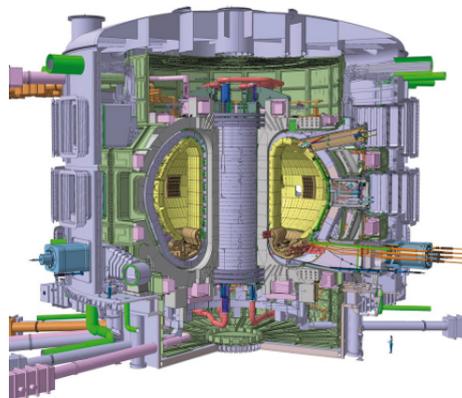


FIGURE 1.3 – Chambre à vide du tokamak ITER

1.1. Contexte

1.1.2 Déflagration d'un nuage de poussières : phénoménologie

Si les mécanismes de propagation de flamme dans les mélanges gazeux sont relativement bien identifiés, les connaissances acquises dans le cas d'un nuage de poussières ou de gouttes ont progressé (*e.g.* [77, 115]) mais présentent un niveau de maturité beaucoup moins important. La présence d'une phase dispersée au sein d'un écoulement est en effet susceptible de venir modifier de manière significatives ses caractéristiques.

Parmi les modifications attendues, on peut par exemple citer les variations locales de richesse dues à la vaporisation des gouttes ou à la pyrolyse des particules solides, une modification de la zone de préchauffage en fonction des propriétés radiatives des particules, ou encore une modification des caractéristiques de la turbulence dans la phase porteuse due à des effets de sillage. L'ampleur de ces modifications varie significativement en fonction de la nature de la phase dispersée (gouttes, particules métalliques, ...) et de ses caractéristiques (chargement massique, diamètre moyen, ...). Enfin, le cas des déflagrations dites hybrides, c'est-à-dire les déflagrations mettant en jeu plusieurs types de combustible gazeux ou solide, pose des difficultés supplémentaires puisque dans ce cas il n'existe pas de lois satisfaisantes permettant de prédire les limites d'inflammabilité à partir des limites obtenues pour les combustibles pris séparément [25, 30, 37].

Si la nature et les caractéristiques de la phase dispersée sont susceptibles de modifier la structure et les propriétés du front de flamme, on distingue néanmoins essentiellement deux types de flamme se propageant dans un nuage de gouttes [64, 147] ou de poussières [51]. Dans le cas des poussières, plusieurs types de phénomènes peuvent se produire à la surface de la particule, comme la pyrolyse, la dévolatilisation, ou la vaporisation contrairement au cas des gouttes où seule l'évaporation est mise en jeu. En pratique, la plupart des particules brûlent en combinant plusieurs mécanismes (*e.g.* [35, 131]) mais on se limitera ici pour simplifier la présentation au seul mécanisme de pyrolyse. Dans le cas des poussières, on distingue ainsi :

- Les flammes dites homogènes, illustrées sur la figure (1.4), pour lesquelles le temps caractéristique de pyrolyse des particules est inférieur au temps de résidence des particules dans la zone de préchauffage. Dans ce cas, les particules s'oxydent complètement avant d'atteindre le front de combustion et le mécanisme de propagation de la flamme est similaire à celui d'une flamme de prémélange d'un mélange purement gazeux mais avec un apport de combustible lié à la pyrolyse des particules.
- Les flammes dites hétérogènes, illustrées sur la figure (1.5), pour lesquelles le temps caractéristique de pyrolyse des particules est supérieur au temps de résidence des particules dans la zone de préchauffage. Dans ce cas, les produits de pyrolyse forment une couche limite autour de chaque particule et des flammes de diffusion autour de chaque particule, dites enveloppantes, apparaissent dans le front de combustion. Le mécanisme de propagation peut dans ce cas ne plus être assimilé à celui d'une flamme de prémélange. Plusieurs régimes peuvent dans ce cas être identifiés comme par exemple celui pour lequel la taille des hétérogénéités formées par les flammes enveloppantes ne peut plus être négligée devant l'épaisseur caractéristique du front de flamme et conduisant au régime de propagation dit discret [91, 135].

En fonction des mécanismes mis en jeu (pyrolyse, dévolatilisation, ...), les deux types de flammes homogène et hétérogène peuvent être identifiés selon différents temps caractéristiques mais décrivant une phénoménologie similaire. Par exemple, dans le cas des sprays, le temps caractéristique d'évaporation des gouttes est comparé au temps de résidence des gouttes dans la zone de préchauffage τ_p défini par [64] :

$$\tau_p = \frac{\delta_p}{\bar{u}_p}$$

où δ_p désigne une longueur caractéristique de la zone de préchauffage et \bar{u}_p la vitesse moyenne des gouttes dans la zone de préchauffage. Dans le cas des poussières, le temps caractéristique de pyrolyse ou de dévolatilisation des particules est comparé au temps caractéristique de la combustion homogène

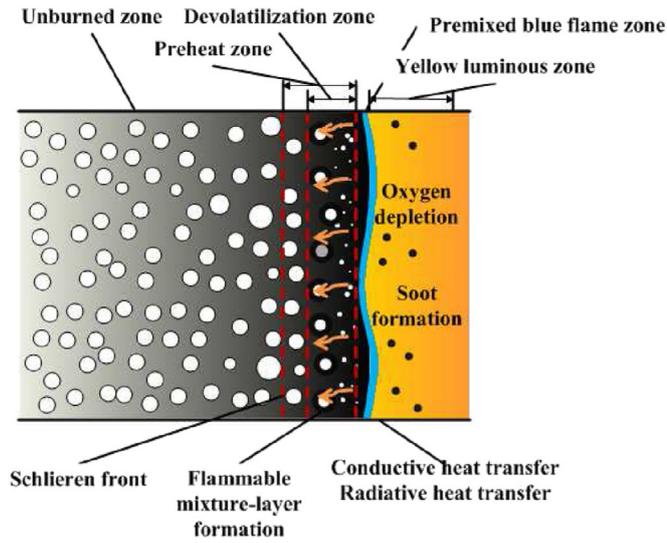


FIGURE 1.4 – Type de flamme homogène [51]

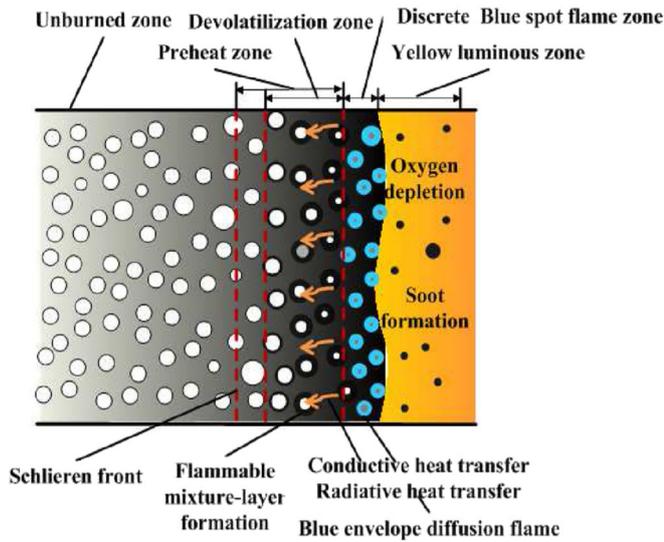


FIGURE 1.5 – Type de flamme hétérogène [51]

en phase gazeuse [7, 51]. En pratique, nous verrons plus loin que ce ratio correspondant à un nombre de Damköhler Da est également utilisé pour distinguer le modèle à film unique et le modèle à double film pour la combustion d'une particule de graphite isolée [79]. Dans le premier cas, $Da < 1$, le modèle d'oxydation de la particule correspond à une combustion homogène en phase gazeuse "gelée" alors que dans le deuxième cas, le modèle d'oxydation prend en compte une flamme de diffusion enveloppante. On retrouve ainsi à l'échelle de la particule les caractéristiques des deux types de flamme homogène et hétérogène à l'échelle du nuage.

1.1.3 Outils d'évaluation

En pratique, les analyses de sûreté sur le risque d'explosion de poussières sont menées à partir d'outils de prédiction similaires à ceux utilisés pour les explosions de gaz [42, 82, 125]. L'outil de simulation P²REMICS [52] développé à l'IRSN pour le traitement de l'explosion rentre dans cette catégorie. Ces

1.1. Contexte

outils se basent sur une description géométrique du front de flamme consistant à séparer les gaz frais des gaz brûlés par une interface de flamme. Cette interface est localisée en espace par une variable, généralement notée G , caractéristique de l'écoulement (*e.g.* concentration ou température) telle que pour une valeur G_0 donnée, les gaz brûlés correspondent aux valeurs $G < G_0$ tandis que les gaz frais correspondent aux valeurs $G > G_0$. La variable G joue ainsi un rôle similaire à celui de l'indicatrice de phase pour les écoulements diphasiques et obéit à l'équation de transport, dite G -équation [97], suivante :

$$\rho \partial_t G + \rho \mathbf{u} \cdot \nabla G = \rho_u s_T |\nabla G|$$

où ρ_u désigne la masse volumique des gaz frais au voisinage du front $G = G_0$ et s_T la vitesse de flamme turbulente. Ainsi, dans ce type d'approche, pour pouvoir décrire des déflagrations dans les situations d'intérêt correspondant à des domaines de grande taille, toutes les difficultés initialement associées à la description de la zone de réaction infiniment mince sont reportées dans la détermination de la vitesse de flamme. Les modèles de vitesse de flamme consistent en une fermeture algébrique de la vitesse de combustion turbulente fonction de la vitesse laminaire de flamme et des propriétés de la turbulence. De nombreuses fermetures ont été proposées pour les mélanges gazeux, typiquement la vitesse de combustion turbulente s'écrit sous la forme [97] :

$$\frac{s_T}{s_L} = 1 + C \left(\frac{v'}{s_L} \right)^n$$

où s_L désigne la vitesse de combustion laminaire, v' l'intensité de la turbulence qui s'identifie généralement à l'énergie cinétique turbulente k , $v' \sim \sqrt{k}$ et où les coefficients C et n prennent les valeurs $1 \leq C \leq 4$ et $0.5 \leq n \leq 1$. Les fermetures adoptées pour les mélanges gaz-poussières s'identifient souvent aux fermetures proposées pour les mélanges gazeux. En particulier, les lois de fermeture se basent sur la connaissance d'une vitesse de combustion laminaire qui, comme pour les mélanges gazeux, est supposée être une propriété intrinsèque du mélange gaz-poussières [42, 121]. Une discussion détaillée sur l'extension de ces fermetures au cas des mélanges gaz-poussières sort du cadre de ce travail, le lecteur intéressé pourra néanmoins se reporter à [99, 121] pour une revue des travaux confirmant une forme plutôt linéaire $n \simeq 1$.

1.1.4 Estimation de la vitesse de combustion laminaire

Si dans le cas des mélanges gazeux on dispose d'une large base de données expérimentales et d'outils de simulation détaillés pour prédire la vitesse de combustion laminaire en fonction des propriétés caractérisant le milieu (composition, pression, température), les données et les connaissances pour les mélanges gaz-poussières sont plus restreintes principalement en raison de la diversité des particules mises en jeu (granulométrie, matériau, ...) et des difficultés expérimentales. Parmi les difficultés expérimentales, si l'instrumentation permet désormais d'accéder à la structure du front pour différents régimes de combustion (*e.g.* [51]), un des principaux problèmes est lié à la mise en suspension d'un nuage de poussières homogène. De plus, la mise en suspension conduit souvent à un allumage du mélange dans une turbulence en déclin rendant ainsi difficile l'estimation d'une vitesse de combustion laminaire [31, 30, 121].

Devant ces difficultés, le développement d'outils de simulation détaillée apparaît comme une approche complémentaire attractive pour déterminer la vitesse de combustion laminaire. Dans le cas des mélanges gazeux, ce type d'approche est souvent mis en œuvre pour étendre des données expérimentales existantes ou obtenir des données sur des plages de paramètres difficilement accessibles expérimentalement. Dans le cas des mélanges gaz-particules, ce type d'approche a principalement été mise en œuvre pour des problématiques associées à la combustion de gouttelettes dans les sprays [15, 93] ainsi que pour la combustion de particules solides, principalement des particules charbonnées [24, 95]. Comme pour les mélanges gazeux, les simulations sont réalisées pour des configurations de flammes planes non-étirées et permettent, en plus des propriétés caractérisant le mélange gazeux, d'estimer l'influence

Chapitre 1. Introduction générale

des caractéristiques du nuage de poussières (chargement massique σ_p , fraction volumique α_p , diamètre, ...) sur la vitesse de combustion.

Ces outils de simulation détaillée s'appuient généralement sur une description hybride Euler-Lagrange de l'écoulement diphasique réactif. Cette description fait l'objet de la prochaine section.

1.2 Description Euler-Lagrange utilisée pour les simulations détaillées

Dans cette section, nous présentons les principales étapes conduisant à la description macroscopique Euler-Lagrange fréquemment utilisé pour les simulations détaillées de l'écoulement diphasique réactif (e.g. [15, 24, 64, 93, 95, 115]). La taille caractéristique des inclusions d_p étant beaucoup plus petite que l'échelle de variation significative dans la phase porteuse β notée L_β , il est difficile voire souvent impossible de résoudre les transferts de masse, de quantité de mouvement et d'énergie au voisinage de chaque particule de l'écoulement. En supposant que l'échelle caractéristique L_β et l'échelle de variation locale induite par la présence des inclusions sont convenablement séparées, la description eulérienne utilisée dans les simulations détaillées correspond aux équations de transport pour la phase continue filtrées à une échelle r_0 beaucoup plus grande que la taille des inclusions d_p , mais suffisamment petite devant l'échelle caractéristique L_β , c'est-à-dire $d_p \ll r_0 \ll L_\beta$. La description lagrangienne utilisée pour la phase dispersée consiste à suivre chaque particule individuellement dans la phase porteuse

Ainsi, la démarche conduisant aux équations des modèles macroscopiques Euler-Lagrange utilisés dans les simulations détaillées consiste, d'une part, à appliquer un opérateur de moyenne spatiale aux équations régissant les transferts à l'échelle locale dans la phase continue et, d'autre part, à modéliser les échanges entre la description macroscopique eulérienne et la description lagrangienne des inclusions. Cette modélisation des échanges à l'échelle macroscopique s'appuie généralement sur la résolution d'un problème de couche limite autour d'une particule isolée.

Les principales étapes associées à cette démarche sont présentées dans cette section dans le but d'identifier clairement les différentes hypothèses et les questions posées. Nous signalons ici que de nombreuses simulations Euler-Lagrange ne s'appuient pas explicitement sur une opération de moyenne spatiale mais utilisent un filtre *implicite* associé à la taille de maille. Ce type d'approche ne permet pas d'obtenir une solution indépendante du maillage et peut même, dans certains cas, conduire à des comportements contre-intuitifs en fonction du niveau de résolution [112]. Nous ne présenterons pas ici ce type d'approche et nous nous limiterons aux méthodes basées sur une opération explicite de filtrage volumique des équations de transport.

1.2.1 Equations locales instantanées de la phase continue

L'objet de cette partie est de présenter les équations décrivant les transferts de masse, de quantité de mouvement et d'énergie dans la phase continue qui est constituée d'un mélange gazeux de N_e espèces chimiques. Chaque espèce est représentée par un continuum décrit par une densité $\rho_{\beta,k}(\mathbf{x}; t)$, une vitesse propre $\mathbf{u}_{\beta,k}(\mathbf{x}; t)$ et une pression partielle $P_{\beta,k}(\mathbf{x}; t)$. Chaque continuum est alors décrit par les équations de transport de la mécanique des milieux continus, soit N_e équations de conservation de masse, $d \times N_e$ équations de quantité de mouvement où d est la dimension d'espace et N_e équations d'énergie. Le mélange gazeux réactif peut également être décrit à partir de la densité ρ_β , de la vitesse \mathbf{u}_β et de l'énergie interne e_β ou de l'enthalpie sensible H_β du mélange, définies respectivement par [63, 74, 98] :

$$\rho_\beta = \sum_{k=1}^{N_e} \rho_{\beta,k}, \quad \rho_\beta \mathbf{u}_\beta = \sum_{k=1}^{N_e} \rho_{\beta,k} \mathbf{u}_{\beta,k}, \quad \rho_\beta e_\beta = \sum_{k=1}^{N_e} \rho_{\beta,k} e_{\beta,k}, \quad \rho_\beta H_\beta = \sum_{k=1}^{N_e} \rho_{\beta,k} H_{\beta,k} \quad (1.2.1)$$

Dans ce cas, le milieu peut être décrit par $N_e - 1$ équations de conservation des espèces, une équation de conservation de la masse du mélange, une équation de conservation de la quantité de mouvement du mélange et une équation de conservation d'énergie. A partir des bilans de masse, de quantité de mouvement et d'énergie associés à chaque espèce k dans la phase continue, on obtient les équations de transport pour le mélange gazeux (cf. annexe A.2) qui sont rappelées ci-dessous.

1.2.1.1 Bilan de masse

Les équations de transport des espèces s'écrivent :

$$\partial_t (\rho_\beta Y_{\beta,k}) + \nabla \cdot (\rho_\beta Y_{\beta,k} \mathbf{u}_\beta) = -\nabla \cdot \mathbf{j}_{\beta,k} + \dot{\omega}_{\beta,k} \quad 1 \leq k \leq N_e - 1 \quad (1.2.2)$$

où $Y_{\beta,k}$ désigne la fraction massique de l'espèce k définie par :

$$Y_{\beta,k} = \frac{\rho_{\beta,k}}{\rho_\beta} \quad (1.2.3)$$

Les termes $\dot{\omega}_{\beta,k}$ et $\mathbf{j}_{\beta,k}$ représentent respectivement le taux de réaction et le flux de diffusion massique de l'espèce k qui vérifient :

$$\sum_{k=1}^{N_e} \dot{\omega}_{\beta,k} = 0 \quad (1.2.4)$$

$$\sum_{k=1}^{N_e} \mathbf{j}_{\beta,k} = 0 \quad (1.2.5)$$

En sommant les N_e équations de transport des espèces, on obtient ainsi l'équation de conservation de la masse dans la phase continue β :

$$\partial_t \rho_\beta + \nabla \cdot (\rho_\beta \mathbf{u}_\beta) = 0 \quad (1.2.6)$$

Les équations de transport précédentes sont complétées par les bilans de masse aux interfaces $A_{\beta\sigma}$ [123, 126] :

$$-\mathbf{n}_{\beta\sigma} \cdot ((\rho_\beta Y_{\beta,k} (\mathbf{u}_\beta - \mathbf{w}) - \mathbf{j}_{\beta,k})) = \varpi_k \quad (1.2.7)$$

$$\mathbf{n}_{\beta\sigma} \cdot (\rho_\beta (\mathbf{u}_\beta - \mathbf{w})) = \mathbf{n}_{\beta\sigma} \cdot (\rho_\sigma (\mathbf{u}_\sigma - \mathbf{w})) \quad (1.2.8)$$

$$\mathbf{n}_{\beta\sigma} \cdot (\rho_\sigma (\mathbf{u}_\sigma - \mathbf{w})) = \varpi_\sigma \quad (1.2.9)$$

où \mathbf{u}_σ et ρ_σ représentent respectivement la vitesse et la masse volumique de la phase dispersés. $\mathbf{n}_{\beta\sigma}$ est la normale sortante de la phase β vers la phase σ , \mathbf{w} la vitesse de déplacement de l'interface $A_{\beta\sigma}$ et ϖ_k le taux surfacique de réaction hétérogène.

Fermeture du taux de réaction homogène Dans le cas général, le taux de réaction de l'espèce k est défini comme la somme des taux $\dot{\omega}_{\beta,kj}$ de chaque réaction j pondérés par les coefficients stœchiométriques $\nu_{\beta,kj}$ [98] :

$$\dot{\omega}_{\beta,k} = \sum_{j=1}^{N_r} \dot{\omega}_{\beta,kj} = W_k \sum_{j=1}^{N_r} \nu_{\beta,kj} \mathcal{Q}_{\beta,j} \quad (1.2.10)$$

où W_k , N_r et $\mathcal{Q}_{\beta,j}$ représentent respectivement la masse molaire de l'espèce k , le nombre de réaction et le taux net d'avancement de la réaction j qui s'écrit comme la somme du taux d'avancement de la réaction directe et inverse :

$$\mathcal{Q}_{\beta,j} = K_j^f \prod_{i=1}^{N_e} \left(\frac{\rho_\beta Y_{\beta,i}}{W_{\beta,i}} \right)^{\nu'_{\beta,ij}} - K_j^b \prod_{i=1}^{N_e} \left(\frac{\rho_\beta Y_{\beta,i}}{W_{\beta,i}} \right)^{\nu''_{\beta,ij}} \quad (1.2.11)$$

où $\nu'_{\beta,ij}$ et $\nu''_{\beta,ij}$ représentent respectivement le coefficient stœchiométrique des espèces réactives et des produits, le taux de réaction directe K_j^f est modélisé par la loi empirique d'Arrhenius :

$$K_j^f = A_j^f T_\beta^{n_\beta} \exp\left(-\frac{T_a}{T_\beta}\right) \quad (1.2.12)$$

1.2. Description Euler-Lagrange utilisée pour les simulations détaillées

où A_j^f est la constante pré-exponentielle, n_β l'exposant de température T_β , T_a la température d'activation. Le taux de réaction inverse est déduit à partir de la constante thermodynamique d'équilibre K_{eq} :

$$K_j^b = K_j^f / K_{eq} \quad (1.2.13)$$

Le nombre d'espèces et de réactions élémentaires impliquées dans une réaction homogène est généralement très grand. De plus, la rapidité des réactions d'espèces intermédiaires impliquent de résoudre des échelles de temps extrêmement petites. D'un point de vue pratique, la cinétique complète induit un coût de calcul très important. Pour ces raisons et étant donné que nous nous intéressons à des effets globaux (température, vitesse de flamme, fraction massique des espèces principales, \dots) de la présence de flamme gazeuse dans un nuage de particules, des descriptions simplifiées de la chimie peuvent être adoptées [15]. Par conséquent, nous modéliserons les réactions chimiques par des réactions globales entre le carburant F et l'oxydant O qui permettront d'estimer les propriétés basiques des flammes réelles .

Fermeture du taux de réaction hétérogène De la même manière que la réaction homogène, la réaction hétérogène sera modélisée par une réaction globale, ainsi, le taux surfacique de la réaction ϖ_k est défini pour chaque espèce k par :

$$\varpi_k = \nu_{\sigma,k} W_k \psi(T_\sigma) Y_{\beta,O_2}^{n_Y} \quad (1.2.14)$$

où $\nu_{\sigma,k}$ est le coefficient stœchiométrique de l'espèce k associé à la réaction hétérogène, Y_{β,O_2} la fraction massique de l'oxydant, n_Y l'exposant de la fraction massique de l'oxydant et ψ le taux net d'avancement de la réaction hétérogène qui ne dépend que de la température de la phase σ à l'interface $A_{\beta\sigma}$:

$$\psi(T_\sigma) = BT_\sigma^{n_T} \exp\left(-\frac{T_a}{T_\sigma}\right) \quad (1.2.15)$$

où B est la constante pré-exponentielle associée à la réaction hétérogène, T_σ la température de la phase dispersée et n_T l'exposant de la température.

Fermeture des flux de diffusion A partir des équations de Maxwell-Stefan caractérisant le mouvement des espèces les unes par rapport aux autres [101], on peut montrer que les flux de diffusion s'écrivent sous la forme (cf. annexe A.1) :

$$\mathbf{j}_{\beta,k} = - \sum_{j=1}^{N_e-1} \rho_\beta D_{\beta,kj} \nabla Y_{\beta,j} \quad (1.2.16)$$

Les coefficients de diffusion massique de la loi de Fick généralisée $D_{\beta,kj}$ sont fonction des coefficients de diffusion binaires, des coefficients d'activité et des fraction massiques et molaires des espèces (cf. annexe A.1). Le flux de diffusion donné par la loi de Fick généralisée Eq. (1.2.16) dépend des fractions des différents constituant du mélange. Ainsi, les $N_e - 1$ équations de transport des espèces de masse Eq. (1.2.2) sont fortement non linéaires et couplées entre elles à travers le terme de diffusion massique. Il est donc nécessaire de résoudre simultanément tous les bilans d'espèces, ce qui induit un système multi-constituant lourd à résoudre.

L'objectif de notre travail étant de développer un modèle macroscopique Euler-Lagrange décrivant la propagation d'une flamme laminaire dans un mélange de poussière, nous adopterons ici une approximation de loi de Fick généralisée pour modéliser les flux de diffusion :

$$\mathbf{j}_{\beta,k} = -\rho_\beta D_{\beta,k} \nabla Y_{\beta,k} \quad (1.2.17)$$

où $D_{\beta,k}$, représente le coefficient de diffusion de l'espèce k dans le mélange. Nous notons ici que d'autres approximations peuvent être utilisées (flux *lumped*, approximation de Hirschfelder et Curtiss, \dots (cf. annexe A.1)).

1.2.1.2 Bilan de quantité de mouvement

A partir du bilan de quantité de mouvement de chaque espèce k , l'équation de conservation de la quantité de mouvement dans la phase continue, s'écrit :

$$\partial_t (\rho_\beta \mathbf{u}_\beta) + \nabla \cdot (\rho_\beta \mathbf{u}_\beta \otimes \mathbf{u}_\beta) = -\nabla P_\beta + \nabla \cdot \boldsymbol{\tau}_\beta + \rho_\beta \mathbf{g} \quad (1.2.18)$$

où \mathbf{g} est l'accélération de la pesanteur, $\boldsymbol{\tau}_\beta$ le tenseur des contraintes visqueuses du mélange et P_β la pression du mélange, qui est définie pour un mélange gazeux dans lequel chaque espèce suit la loi d'état des gaz parfaits :

$$P_\beta = \rho_\beta \frac{R}{W_\beta} T_\beta \quad (1.2.19)$$

où W_β représente la masse molaire du mélange, définie par :

$$\frac{1}{W_\beta} = \sum_{k=1}^{N_e} \frac{Y_{\beta,k}}{W_k} \quad (1.2.20)$$

Les équations de transport précédentes sont complétées par le bilan de quantité aux interfaces $A_{\beta\sigma}$ [123, 126] :

$$-\mathbf{n}_{\beta\sigma} \cdot (\rho_\beta Y_{\beta,k} (\mathbf{u}_\beta - \mathbf{w})) \mathbf{u}_\beta + \mathbf{n}_{\beta\sigma} \cdot (-p_\beta \mathbf{I} + \boldsymbol{\tau}_\beta) = -\mathbf{n}_{\beta\sigma} \cdot (\rho_\sigma (\mathbf{u}_\sigma - \mathbf{w})) \mathbf{u}_\sigma \quad (1.2.21)$$

Fermeture du tenseur des contraintes visqueuses Pour un fluide Newtonien, le tenseur $\boldsymbol{\tau}_\beta$ est défini par [74, 98] :

$$\boldsymbol{\tau}_\beta = \mu_\beta (\nabla \mathbf{u}_\beta + (\nabla \mathbf{u}_\beta)^t) - \frac{2}{3} \mu_\beta (\nabla \cdot \mathbf{u}_\beta) \mathbf{I} \quad (1.2.22)$$

où μ_β est la viscosité dynamique du mélange donnée par la loi de Sutherland :

$$\mu_\beta = \mu_\beta^0 \left(\frac{T}{T_0} \right)^{3/2} \frac{T_0 + S}{T + S} \quad (1.2.23)$$

où S est un paramètre de la loi et μ_β^0 est la viscosité du mélange prise à la température de référence T_0 .

1.2.1.3 Bilan d'énergie

A partir du bilan de l'enthalpie sensible de chaque espèce k , l'équation de transport de l'enthalpie sensible dans la phase continue, s'écrit en négligeant les transferts thermiques par rayonnement :

$$\begin{aligned} \partial_t (\rho_\beta H_\beta) + \nabla \cdot (\rho_\beta H_\beta \mathbf{u}_\beta) &= -\nabla \cdot \left(\mathbf{q}_\beta + \sum_{k=1}^{N_e} H_{\beta,k} \mathbf{j}_{\beta,k} \right) + \boldsymbol{\tau}_\beta : \nabla \mathbf{u}_\beta \\ &+ \frac{DP_\beta}{Dt} + \dot{\omega}_{\beta,T} \end{aligned} \quad (1.2.24)$$

où $H_{\beta,k}$ représente l'enthalpie sensible de l'espèce k définie par :

$$H_{\beta,k} = \int_{T_0}^{T_\beta} c_{p,k} dT \quad (1.2.25)$$

1.2. Description Euler-Lagrange utilisée pour les simulations détaillées

où $c_{p,k}$ représente la chaleur massique à pression constante de l'espèce k . Le terme $\dot{\omega}_{\beta,T}$ dans l'équation Eq. (1.2.24) représente la quantité de chaleur dégagée par la réaction, définie par :

$$\dot{\omega}_{\beta,T} = - \sum_{k=1}^{N_e} \Delta h_{f,k}^o \dot{\omega}_{\beta,k} \quad (1.2.26)$$

$\Delta h_{f,k}^o$ est l'enthalpie de formation de l'espèce k à température de référence T_0 .

L'équation de transport précédente est complétée par le bilan d'enthalpie sensible aux interfaces $A_{\beta\sigma}$ [123, 126] qui s'écrit en négligeant l'apport de l'énergie cinétique et la puissance développée par les contraintes de cisaillement lors du transfert de masse (cf. annexe A.3) :

$$\begin{aligned} & - \sum_{k=1}^{N_e} \mathbf{n}_{\beta\sigma} \cdot ((\rho_{\beta} Y_{\beta,k} (\mathbf{u}_{\beta} - \mathbf{w}) - \mathbf{j}_{\beta,k})) H_{\beta,k} - \mathbf{n}_{\beta\sigma} \cdot \mathbf{q}_{\beta} \\ & = - \mathbf{n}_{\beta\sigma} \cdot (\rho_{\beta} (\mathbf{u}_{\sigma} - \mathbf{w})) H_{\sigma} - \mathbf{n}_{\beta\sigma} \cdot \mathbf{q}_{\sigma} - \sum_{k=1}^{N_e} \Delta h_{f,k}^o \varpi_k \end{aligned} \quad (1.2.27)$$

Fermeture du flux de chaleur Le flux de chaleur \mathbf{q}_{β} est modélisé de manière classique par la loi de Fourier [74] :

$$\mathbf{q}_{\beta} = -\lambda_{\beta} \nabla T_{\beta} \quad (1.2.28)$$

où λ_{β} représente la conductivité thermique de la phase continue qui peut être exprimée en fonction de la viscosité dynamique du mélange par l'intermédiaire du nombre de Prandtl :

$$Pr = \frac{(\mu c_p)_{\beta}}{\lambda_{\beta}} \quad (1.2.29)$$

où $c_{p,\beta}$ représente la capacité thermique massique du mélange, défini par :

$$c_{p,\beta} = \sum_{k=1}^{N_e} Y_{\beta,k} c_{p,k} \quad (1.2.30)$$

1.2.1.4 Modèle à faible nombre de Mach

Nous nous intéressons, dans ce travail, à des problèmes de combustion de mélanges gaz-poussières en régime de déflagration subsonique. Ces régimes sont caractérisés par une vitesse d'écoulement faible devant la vitesse du son mais avec des variations significatives de la masse volumique. Typiquement, ces régimes correspondent à des fronts de réaction se déplaçant jusqu'à des vitesses de l'ordre de quelques mètres par seconde mais sans variation significative de la pression. Ces écoulements sont bien décrits par un modèle construit sur une approximation à faible nombre de Mach [85]. Ce modèle supporte, d'une part, des variations importantes de la température, et d'autre part, ne prend pas en compte les effets des ondes acoustiques, il peut ainsi être résolu avec des méthodes numériques semblables à celles utilisées pour les écoulements incompressibles [138]. L'approximation à faible nombre de Mach consiste à effectuer un développement asymptotique des variables de l'écoulement ($Y_{\beta,k}$, ρ_{β} , \mathbf{u}_{β} , P_{β} et H_{β}) en fonction du nombre de Mach M qui joue le rôle de petit paramètre. Ces développements sont introduits dans les équations de transport et d'équation d'état sous la forme adimensionnelle et enfin les termes du même ordre de grandeur sont regroupés. L'équation de quantité de mouvement à l'ordre M^{-1} et M^{-2} montre que la pression est constante en espace jusqu'aux fluctuations d'ordre M^2 [138], on peut ainsi écrire :

$$P_{\beta}(\mathbf{x}, t) \simeq P_{\beta}^{th}(t) + M^2 p_{\beta}(\mathbf{x}, t) \quad (1.2.31)$$

Le modèle à faible nombre de Mach correspondant aux équations à l'ordre M^0 du développement asymptotique des équations Eqs. (1.2.2)-(1.2.6)-(1.2.18)-(1.2.24)-(1.2.19), s'écrit :

$$\partial_t (\rho_\beta Y_{\beta,k}) + \nabla \cdot (\rho_\beta Y_{\beta,k} \mathbf{u}_\beta) = -\nabla \cdot \mathbf{j}_{\beta,k} + \dot{\omega}_{\beta,k} \quad (1.2.32)$$

$$\partial_t \rho_\beta + \nabla \cdot (\rho_\beta \mathbf{u}_\beta) = 0 \quad (1.2.33)$$

$$\partial_t (\rho_\beta \mathbf{u}_\beta) + \nabla \cdot (\rho_\beta \mathbf{u}_\beta \otimes \mathbf{u}_\beta) = -\nabla p_\beta + \nabla \cdot \boldsymbol{\tau}_\beta + \rho_\beta \mathbf{g} \quad (1.2.34)$$

$$\partial_t (\rho_\beta H_\beta) + \nabla \cdot (\rho_\beta \mathbf{u}_\beta H_\beta) = -\nabla \cdot \left(\mathbf{q}_\beta - \sum_{k=1}^{N_e} \mathbf{j}_{\beta,k} H_{\beta,k} \right) + \frac{dP_\beta^{th}}{dt} + \dot{\omega}_{\beta,T} \quad (1.2.35)$$

$$P_\beta^{th} = \rho_\beta \frac{R}{W_\beta} T_\beta \quad (1.2.36)$$

La pression P_β^{th} représente la pression thermodynamique donnée par la loi d'état Eq. (1.2.36), tandis que p_β représente la pression dynamique intervenant uniquement dans l'équation de quantité de mouvement Eq. (1.2.35) reliée directement à la vitesse. Par conséquent, les effets des ondes acoustiques sont filtrés du champ de l'écoulement puisque la pression dynamique est découplée des variations de température et de masse volumique [9].

Les équations de transport du modèle bas Mach, Eqs. (1.2.32) à (1.2.36), sont complétées par les bilans de masse, de quantité de mouvement et d'enthalpie sensible aux interfaces $A_{\beta\sigma}$ Eqs. (1.2.7)-(1.2.8)-(1.2.9)-(1.2.21)-(1.2.27). On adoptera par la suite les notations suivantes :

$$\Gamma_{\beta,k} = -\mathbf{n}_{\beta\sigma} \cdot ((\rho_\beta Y_{\beta,k} (\mathbf{u}_\beta - \mathbf{w}) - \mathbf{j}_{\beta,k})) \quad (1.2.37)$$

$$\Gamma_\beta = -\mathbf{n}_{\beta\sigma} \cdot (\rho_\beta (\mathbf{u}_\beta - \mathbf{w})) \quad (1.2.38)$$

$$\Gamma_\sigma = \mathbf{n}_{\beta\sigma} \cdot (\rho_\sigma (\mathbf{u}_\sigma - \mathbf{w})) \quad (1.2.39)$$

$$\mathbf{M}_\beta = \Gamma_\beta \mathbf{u}_\beta + \mathbf{n}_{\beta\sigma} \cdot (-p_\beta \mathbf{I} + \boldsymbol{\tau}_\beta) \quad (1.2.40)$$

$$\Pi_\beta = \sum_{k=1}^{N_e} H_{\beta,k} \Gamma_{\beta,k} - \mathbf{n}_{\beta\sigma} \cdot \mathbf{q}_\beta \quad (1.2.41)$$

$$\Pi_\sigma = H_\sigma \Gamma_\sigma + \mathbf{n}_{\beta\sigma} \cdot \mathbf{q}_\sigma \quad (1.2.42)$$

De sorte que les conditions de saut aux interfaces s'écrivent :

$$\Gamma_{\beta,k} = \varpi_k \quad (1.2.43)$$

$$\Gamma_\beta = -\Gamma_\sigma \quad (1.2.44)$$

$$\Gamma_\sigma = \varpi_\sigma \quad (1.2.45)$$

$$\mathbf{M}_\beta = -\Gamma_\sigma \mathbf{u}_\sigma \quad (1.2.46)$$

$$\Pi_\beta = -\Pi_\sigma - \sum_{k=1}^{N_e} \Delta h_{f,k}^o \varpi_k \quad (1.2.47)$$

1.2.2 Equations macroscopiques de la phase continue

La première étape dans l'établissement des équations en grandeurs moyennes consiste à étendre les équations Eqs. (1.2.32) à (1.2.36) valables dans le domaine $\Omega_\beta(t)$ à l'ensemble du domaine $\Omega = \Omega_\beta \cup \Omega_\sigma$. On introduit, pour cela, la fonction caractéristique γ_β de la phase β définie par :

$$\gamma_\beta = \begin{cases} 1 & \text{si } \mathbf{x} \in \Omega_\beta(t) \\ 0 & \text{sinon} \end{cases} \quad (1.2.48)$$

1.2. Description Euler-Lagrange utilisée pour les simulations détaillées

Pour toute fonction scalaire f_β et vectorielle \mathbf{u}_β définies dans la phase β , la fonction γ_β vérifie au sens des distributions les propriétés :

$$\nabla (\gamma_\beta f_\beta) = \gamma_\beta \nabla f_\beta - f_\beta \mathbf{n}_{\beta\sigma} \delta_{\beta\sigma} \quad (1.2.49)$$

$$\nabla \cdot (\gamma_\beta \mathbf{u}_\beta) = \gamma_\beta \nabla \cdot \mathbf{u}_\beta - \mathbf{u}_\beta \cdot \mathbf{n}_{\beta\sigma} \delta_{\beta\sigma} \quad (1.2.50)$$

$$\partial_t (\gamma_\beta f_\beta) = \gamma_\beta \partial_t f_\beta + f_\beta \mathbf{w} \cdot \mathbf{n}_{\beta\sigma} \delta_{\beta\sigma} \quad (1.2.51)$$

$$\partial_t (\gamma_\beta \mathbf{u}_\beta) = \gamma_\beta \partial_t \mathbf{u}_\beta + \mathbf{u}_\beta (\mathbf{w} \cdot \mathbf{n}_{\beta\sigma}) \delta_{\beta\sigma} \quad (1.2.52)$$

où $\delta_{\beta\sigma}$ correspond à la distribution du Dirac associée à l'interface $A_{\beta\sigma}$. L'introduction de la fonction caractéristique permet d'obtenir un système d'équations valables dans tout le domaine Ω . En multipliant les équations locales relatives à la phase continue β par la fonction caractéristique γ_β et en utilisant les propriétés de la fonction caractéristique, on obtient les équations locales instantanées sur les distributions.

La deuxième étape dans l'établissement du modèle consiste à effectuer une prise de moyenne des équations locales instantanées sur les distributions. Pour cela, on introduit l'opérateur de moyenne spatiale $\langle \cdot \rangle$, défini par Anderson et Jackson [1] :

$$\langle a_\beta \rangle (\mathbf{X}, t) = g * a_\beta = \int_{\mathbb{R}^d} a_\beta(\mathbf{x}, t) g(\mathbf{X} - \mathbf{x}) d\mathbf{x} \quad (1.2.53)$$

où \mathbf{x} , \mathbf{X} , a_β et g représentent respectivement un point du volume de prise de moyenne, le vecteur de position localisant le centre du volume de prise de moyenne, une variable quelconque et la fonction poids associée à la prise de moyenne. La fonction poids vérifie les propriétés suivantes :

$$\left\{ \begin{array}{l} H1 : \quad g \in \mathcal{C}^\infty(\mathbb{R}^d) \\ H2 : \quad g \text{ à support compact sur } \mathbb{R}^d \\ H3 : \quad \int_{\mathbb{R}^d} g(\mathbf{x}) d\mathbf{x} = 1 \end{array} \right. \quad (1.2.54)$$

Ces trois propriétés assurent que la fonction $\langle \cdot \rangle$ est de classe \mathcal{C}^∞ dans \mathbb{R}^d , que g est une fonction test dans la théorie de distribution et que la moyenne d'une constante est égale à cette constante.

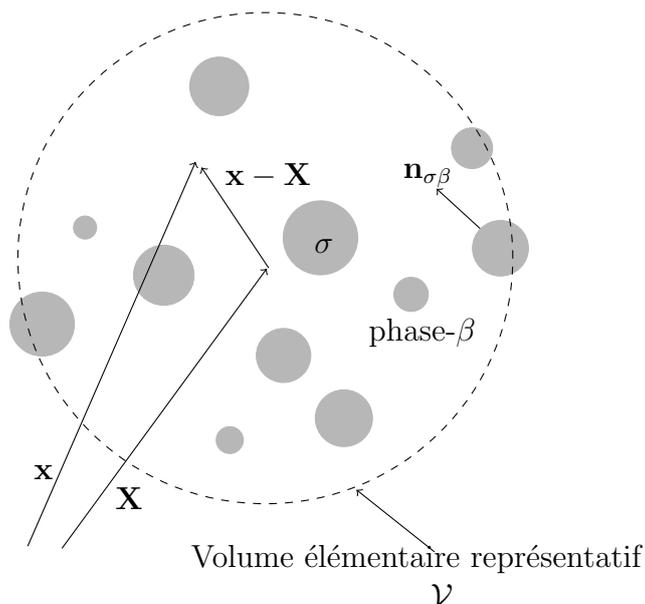


FIGURE 1.6 – Définition du volume de prise de moyenne

La définition de l'opérateur moyenne par la relation Eq. (1.2.53) correspond au produit de convolution en espace entre la variable a_β et la fonction poids. Ainsi, l'opérateur de moyenne vérifie les propriétés de linéarité et de commutativité avec les opérateurs de différentiation. Pour a_β et b_β des variables quelconques et λ une constante, on a :

— linéarité :

$$\langle a_\beta + \lambda b_\beta \rangle = \langle a_\beta \rangle + \lambda \langle b_\beta \rangle \quad (1.2.55)$$

— commutativité avec les opérateurs de différentiation :

$$\langle \partial_t a_\beta \rangle = \partial_t \langle a_\beta \rangle, \quad \text{et} \quad \langle \nabla a_\beta \rangle = \nabla \langle a_\beta \rangle \quad (1.2.56)$$

Par ailleurs, à partir d'un développement en série de Taylor de $\langle a_\beta \rangle$ en un point \mathbf{x} autour du centroïde \mathbf{X} , on peut montrer que l'opérateur de moyenne vérifie la propriété de l'idempotence (cf. annexe C) :

— idempotence

$$\langle \langle a_\beta \rangle b_\beta \rangle = \langle a_\beta \rangle \langle b_\beta \rangle \quad (1.2.57)$$

Différents filtres peuvent être choisis, par commodité nous présentons ici l'exemple classique du filtre boîte g définie par :

$$g(\mathbf{x}) = \begin{cases} \frac{1}{\mathcal{V}}, & \text{si } \mathbf{x} \in \mathcal{V} \\ 0, & \text{sinon} \end{cases} \quad (1.2.58)$$

où \mathcal{V} représente le volume de prise de moyenne. On note que la fonction g n'est pas de classe C^∞ , la fonction $\langle \cdot \rangle$ n'est donc pas continue. Le lecteur pourra se référer à Quintard et Whitaker [107, 108] pour une description détaillée de la problématique du choix de la fonction de filtrage et à Davit et Quintard [34] pour une étude de différents filtres en fonction de la micro-structure du milieu et de la régularité des variables locales.

L'opérateur de moyenne défini par la relation Eq. (1.2.53) ne permet pas de faire la distinction entre la phase continue et la phase dispersée. Pour cela, nous introduisons les définitions suivantes :

— La fraction volumique (ou le taux de présence) de la phase β :

$$\alpha_\beta = \langle \gamma_\beta \rangle \quad (1.2.59)$$

— La moyenne pondérée intrinsèque d'une grandeur $a_{\beta,k}$ notée \bar{a}_β , définie par :

$$\bar{a}_\beta = \frac{\langle \gamma_\beta a_\beta \rangle}{\langle \gamma_\beta \rangle} = \frac{\langle \gamma_\beta a_\beta \rangle}{\alpha_\beta} \quad (1.2.60)$$

— La décomposition de Gray [59] en valeur moyenne intrinsèque et fluctuation a'_β :

$$\gamma_\beta a_\beta = \gamma_\beta \bar{a}_\beta + \gamma_\beta a'_\beta \quad (1.2.61)$$

La décomposition précédente correspond à une décomposition des échelles de longueur puisque l'échelle de variations significatives de \bar{a}_β est la longueur macroscopique L_β , tandis que la longueur caractéristique associée aux variations des fluctuations a'_β est l'échelle microscopique l_β [142]. A partir de la décomposition de Gray et de la propriété d'idempotence, on obtient :

$$\langle \gamma_\beta a'_\beta \rangle = 0 \quad (1.2.62)$$

1.2. Description Euler-Lagrange utilisée pour les simulations détaillées

Pour des problèmes à masse volumique variable, il est plus pratique d'utiliser la moyenne de Favre pondérée par la masse volumique, qui s'écrit [46] :

$$\tilde{a}_\beta = \frac{\langle \gamma_\beta \rho_\beta a_\beta \rangle}{\langle \gamma_\beta \rho_\beta \rangle} = \frac{\langle \gamma_\beta \rho_\beta a_\beta \rangle}{\alpha_\beta \bar{\rho}_\beta} \quad (1.2.63)$$

Dans ce cas, la décomposition en valeur moyenne et fluctuation s'écrit :

$$\gamma_\beta a_\beta = \gamma_\beta \tilde{a}_\beta + \gamma_\beta a''_\beta \quad \text{avec} \quad \langle \gamma_\beta \rho_\beta a''_\beta \rangle = 0 \quad (1.2.64)$$

En appliquant l'opérateur de moyenne au système d'équations locales instantanées sur la distribution et en utilisant la commutativité de l'opérateur moyenne et la définition de la moyenne de Favre pondérée par la masse volumique Eq. (1.2.63), le système d'équations moyennées s'écrit :

$$\partial_t (\alpha_\beta \bar{\rho}_\beta \tilde{Y}_{\beta,k}) + \nabla \cdot (\alpha_\beta \bar{\rho}_\beta \tilde{Y}_{\beta,k} \tilde{\mathbf{u}}_\beta) = -\nabla \cdot \bar{\mathbf{j}}_{\beta,k} + \alpha_\beta \bar{\omega}_{\beta,k} + \langle \Gamma_{\beta,k} \delta_{\beta\sigma} \rangle - \nabla \cdot \mathcal{E}_{\beta,k} \quad (1.2.65)$$

$$\partial_t (\alpha_\beta \bar{\rho}_\beta) + \nabla \cdot (\alpha_\beta \bar{\rho}_\beta \tilde{\mathbf{u}}_\beta) = \langle \Gamma_\beta \delta_{\beta\sigma} \rangle \quad (1.2.66)$$

$$\partial_t (\alpha_\beta \bar{\rho}_\beta \tilde{\mathbf{u}}_\beta) + \nabla \cdot (\alpha_\beta \bar{\rho}_\beta \tilde{\mathbf{u}}_\beta \otimes \tilde{\mathbf{u}}_\beta) = -\nabla (\alpha_\beta \bar{p}_\beta) + \nabla \cdot (\alpha_\beta \bar{\boldsymbol{\tau}}_\beta) + \alpha_\beta \bar{\rho}_\beta \mathbf{g} + \langle \mathbf{M}_\beta \delta_{\beta\sigma} \rangle - \nabla \cdot \mathbf{R}_\beta \quad (1.2.67)$$

$$\partial_t (\alpha_\beta \bar{\rho}_\beta \tilde{H}_\beta) + \nabla \cdot (\alpha_\beta \bar{\rho}_\beta \tilde{\mathbf{u}}_\beta \tilde{H}_\beta) = -\nabla \cdot \left(\alpha_\beta \bar{\mathbf{q}}_\beta + \sum_{k=1}^{N_e} (\alpha_\beta \bar{\mathbf{j}}_{\beta,k} \bar{H}_{\beta,k}) \right) + \alpha_\beta \frac{d\bar{P}_\beta^{th}}{dt} + \alpha_\beta \bar{\omega}_{\beta,T} + \langle \Pi_\beta \delta_{\beta\sigma} \rangle - \nabla \cdot \mathcal{H}_\beta \quad (1.2.68)$$

$$\bar{P}_\beta^{th} = \alpha_\beta \langle \rho_\beta \frac{R}{W_\beta} T_\beta \rangle \quad (1.2.69)$$

où on a posé :

$$\bar{\omega}_{\beta,T} = -\sum_{k=1}^{N_e} \Delta h_{f,k} \bar{\omega}_{\beta,k} \quad (1.2.70)$$

$$\mathcal{E}_{\beta,k} = \alpha_\beta \bar{\rho}_\beta \widetilde{Y''_{\beta,k} \mathbf{u}''_\beta} \quad (1.2.71)$$

$$\mathbf{R}_\beta = \alpha_\beta \bar{\rho}_\beta \widetilde{\mathbf{u}''_\beta \otimes \mathbf{u}''_\beta} \quad (1.2.72)$$

$$\mathcal{H} = \alpha_\beta \bar{\rho}_\beta \widetilde{H''_\beta \mathbf{u}''_\beta} + \alpha_\beta \sum_{k=1}^{N_e} \widetilde{\mathbf{j}''_{\beta,k} H''_{\beta,k}} \quad (1.2.73)$$

L'application de l'opérateur moyenne spatial aux équations locales instantanées entraîne l'apparition de nouveaux termes. Dans le paragraphe 1.2.4, des lois de fermeture seront proposées pour les grandeurs moyennées ($\bar{\boldsymbol{\tau}}_\beta$, $\bar{\mathbf{q}}_\beta$, $\bar{\mathbf{j}}_{\beta,k}$, \bar{P}_β^{th} et $\bar{\omega}_{\beta,k}$) et une discussion sur l'importance des termes de transport par fluctuations ($\mathcal{E}_{\beta,k}$, \mathbf{R}_β et \mathcal{H}) sera présentée. Dans la section 1.3, les termes d'échanges avec la phase continue seront reliés à la description lagrangienne.

1.2.3 Description lagrangienne de la phase dispersée

L'approche lagrangienne permet d'estimer les propriétés de chaque particule p (position \mathbf{x}_p , masse m_p , vitesse \mathbf{u}_p et température T_p) en résolvant l'équation de la position, de conservation de masse, de quantité de mouvement et d'énergie. Nous considérons des particules, sphériques, rigides, indéformables, constituées d'une seule espèce (s) et de taille petite devant les échelles caractéristiques de la phase continue. De plus, nous négligeons les interactions directes et les transferts par rayonnement. Les équations lagrangiennes de la phase dispersée s'obtiennent en intégrant les équations de transport

de la phase dispersée sur le volume V_p de la particule p (cf. annexe B) :

$$\frac{d\mathbf{x}_p}{dt} = \mathbf{u}_p \quad (1.2.74)$$

$$\frac{dm_p}{dt} = \dot{m}_p \quad (1.2.75)$$

$$\frac{dm_p \mathbf{u}_p}{dt} = m_p \mathbf{g} + \mathbf{u}_\beta^{(A_p)} \dot{m}_p + \mathbf{f}_{\beta p} \quad (1.2.76)$$

$$\frac{dm_p H_p}{dt} = Q_{\beta p} - \sum_{k=1}^{N_e} \frac{\nu_{\sigma,k} W_k}{\nu_{\sigma,s} W_s} H_{\beta,k}^{(A_p)} \dot{m}_p + \Delta H_v \dot{m}_p \quad (1.2.77)$$

où \dot{m}_p représente le taux de transfert de masse de la particule vers la phase continue par oxydation, défini par :

$$\dot{m}_p = \int_{A_p} \rho_\sigma (\mathbf{u}_\sigma - \mathbf{w}) \cdot \mathbf{n}_{\beta\sigma} dS \quad (1.2.78)$$

où A_p est la surface de la particule. Dans l'équation de la quantité de mouvement, $\mathbf{u}_\beta^{(A_p)}$ représente la vitesse de la phase continue moyennée sur la surface de la particule A_p . Cette vitesse peut être assimilée à la vitesse de la particule \mathbf{u}_p dans le cas où le transfert de masse à la surface de la particule est à symétrie sphérique [124]. D'autre part, le terme $\mathbf{f}_{\beta p}$ constitue la résultante des actions de la phase continue sur la particule, définie par :

$$\mathbf{f}_{\beta p} = - \int_{A_p} \mathbf{n}_{\beta\sigma} \cdot (-p_\beta \mathbf{I} + \boldsymbol{\tau}_\beta) dS \quad (1.2.79)$$

Dans l'équation de l'énergie Eq. (1.2.77), $Q_{\beta p}$ représente le flux de transfert thermique échangé avec la phase continue, défini par :

$$Q_{\beta p} = \int_{A_p} \mathbf{n}_{\beta\sigma} \cdot \mathbf{q}_\beta dS \quad (1.2.80)$$

Le deuxième terme correspond aux échanges d'enthalpie sensible avec la phase continue, où $\nu_{\sigma,s}$ et W_s représentent respectivement le coefficient stœchiométrique associé à la réaction hétérogène et la masse molaire d'espèce s . $H_{\beta,k}^{(A_p)}$ représente l'enthalpie sensible de l'espèce k moyennée sur la surface de la particule. Dans le cas où les matières gazeuses sont supposées produites à la température de la particule et que le transfert de masse à la surface de la particule est supposé à symétrie sphérique, $H_{\beta,k}^{(A_p)}$ correspond à l'enthalpie sensible de l'espèce k calculée à la température de la particule T_p [124]. De plus, si les espèces gazeuses ont la même capacité thermique, le deuxième terme du membre de droite de l'équation de l'énergie devient :

$$- \sum_{k=1}^{N_e} \frac{\nu_{\sigma,k} W_k}{\nu_{\sigma,s} W_s} H_{\beta,k}^{(A_p)} \dot{m}_p = H_\beta(T_p) \dot{m}_p \quad (1.2.81)$$

où $H_\beta(T_p)$ représente l'enthalpie sensible de mélange calculée à la température de la particule p . D'autre part, le terme ΔH_v représente la chaleur massique dégagée par l'oxydation de la particule, définie par :

$$\Delta H_v = - \sum_{k=1}^{N_e} \frac{\nu_{\sigma,k} W_k}{\nu_{\sigma,s} W_s} \Delta h_{f,k}^o \quad (1.2.82)$$

On rappelle ici que $\Delta h_{f,k}^o$ est l'enthalpie massique de formation de l'espèce k à température de référence T_0 .

1.2. Description Euler-Lagrange utilisée pour les simulations détaillées

A ce stade, on note que la position de la particule s'obtient à partir de la connaissance de sa vitesse. Cependant, pour obtenir l'évolution de la masse, de la quantité de mouvement et de l'énergie, les termes \dot{m}_p , $\mathbf{f}_{\beta p}$ et $Q_{\beta p}$ doivent être modélisés.

1.2.4 Lois de fermeture

L'objectif de ce paragraphe est de présenter les lois de fermeture pour les grandeurs filtrées et les termes de transport par les fluctuations qui apparaissent suite à l'application de l'opérateur moyenne aux équations locales (*cf.* Eqs. (1.2.65) à (1.2.69)).

Grandeurs filtrées Les termes $\bar{\boldsymbol{\tau}}_\beta$, $\bar{\mathbf{q}}_\beta$, $\bar{\mathbf{j}}_{\beta,k}$, \bar{P}_β^{th} et $\bar{\omega}_{\beta,k}$ représentent respectivement les grandeurs filtrées du tenseur des contraintes visqueuses, du flux de chaleur, du flux de diffusion massique, de la pression thermodynamique et du taux de réaction homogène.

Les lois de fermeture qui relient ces termes aux variables principales ($\tilde{Y}_{\beta,k}$, $\bar{\rho}_\beta$, $\tilde{\mathbf{u}}_\beta$ et \tilde{T}_β) sont généralement basées sur des coefficients de transport effectifs traduisant la physique à l'échelle locale. Les fermetures classiques de $\bar{\boldsymbol{\tau}}_\beta$, $\bar{\mathbf{q}}_\beta$, $\bar{\mathbf{j}}_{\beta,k}$ et \bar{P}_β^{th} utilisées pour la modélisation d'un écoulement gaz-particules dilué sont présentées ci-après.

On rappelle que le tenseur des contraintes filtré $\bar{\boldsymbol{\tau}}$ pour un fluide Newtonien s'écrit sous la forme :

$$\bar{\boldsymbol{\tau}}_\beta = \overline{\mu_\beta \left(\nabla \mathbf{u}_\beta + (\nabla \mathbf{u}_\beta)^t \right) - \frac{2}{3} \mu_\beta (\nabla \cdot \mathbf{u}_\beta) \mathbf{I}} \quad (1.2.83)$$

D'autre part, en utilisant la décomposition en moyenne de Favre de la vitesse, la linéarité de la moyenne spatiale, l'équation Eq. (1.2.50) et en posant $\mu_\beta = \bar{\mu}_\beta$, on peut écrire :

$$\begin{aligned} \overline{\mu_\beta \nabla \cdot \mathbf{u}_\beta} &= \frac{1}{\alpha_\beta} \langle \gamma_\beta \mu_\beta \nabla \cdot \mathbf{u}_\beta \rangle \\ &= \frac{\mu_\beta}{\alpha_\beta} \langle \gamma_\beta \nabla \cdot \tilde{\mathbf{u}}_\beta \rangle + \frac{\mu_\beta}{\alpha_\beta} \langle \gamma_\beta \nabla \cdot \mathbf{u}_\beta'' \rangle \\ &= \mu_\beta \nabla \cdot \tilde{\mathbf{u}}_\beta + \frac{\mu_\beta}{\alpha} \nabla \cdot \langle \gamma_\beta \mathbf{u}_\beta'' \rangle + \frac{\mu_\beta}{\alpha_\beta} \langle (\mathbf{u}_\beta'' \otimes \mathbf{n}_{\beta\sigma}) \delta_{\beta\sigma} \rangle \end{aligned} \quad (1.2.84)$$

En assimilant la moyenne de Favre à la moyenne intrinsèque dans le calcul de la moyenne spatiale du tenseur des contraintes, le deuxième terme du second membre de l'équation Eq. (1.2.84) peut être négligé, de sorte que :

$$\begin{aligned} \bar{\boldsymbol{\tau}}_\beta &= \mu_\beta \left(\nabla \tilde{\mathbf{u}}_\beta + (\nabla \tilde{\mathbf{u}}_\beta)^t \right) - \frac{2}{3} \mu_\beta (\nabla \cdot \tilde{\mathbf{u}}_\beta) \mathbf{I} \\ &\quad + \frac{\mu_\beta}{\alpha_\beta} \langle (\mathbf{u}_\beta'' \otimes \mathbf{n}_{\beta\sigma}) \delta_{\beta\sigma} + (\mathbf{n}_{\beta\sigma} \otimes \mathbf{u}_\beta'') \delta_{\beta\sigma} - \frac{2}{3} (\mathbf{u}_\beta'' \cdot \mathbf{n}_{\beta\sigma}) \delta_{\beta\sigma} \mathbf{I} \rangle \end{aligned} \quad (1.2.85)$$

La contribution des deux premiers termes du second membre de l'équation Eq. (1.2.85) correspond au tenseur des contraintes visqueuses volumiques, et la dernière contribution correspond au tenseur des contraintes interfaciales. Ce dernier traduit l'effet de la tortuosité du milieu, c'est-à-dire les effets de la géométrie locale du milieu sur le transport macroscopique. Cette contribution est généralement modélisée à l'aide d'une viscosité additionnelle [16, 55] de sorte que le tenseur des contraintes filtré s'écrit sous une forme similaire à l'expression du tenseur des contraintes visqueuses pour un fluide Newtonien :

$$\bar{\boldsymbol{\tau}}_\beta = \mu_\beta^* \left(\nabla \tilde{\mathbf{u}}_\beta + (\nabla \tilde{\mathbf{u}}_\beta)^t - \frac{2}{3} (\nabla \cdot \tilde{\mathbf{u}}_\beta) \mathbf{I} \right) \quad (1.2.86)$$

où μ_β^* représente la viscosité effective du milieu. Il existe plusieurs corrélations [8, 43, 58] permettant d'estimer la valeur de μ_β^* en fonction de la fraction volumique. Lorsque $\alpha_\beta \rightarrow 1$, la valeur de μ_β^* tend vers μ_β . Cette valeur limite est généralement utilisée pour un mélange gaz-particules très dilué

[11, 24, 136], ce qui revient à négliger les effets de la tortuosité. De la même manière, les flux de diffusion et de chaleur filtrés peuvent s'écrire sous la forme :

$$\bar{\mathbf{q}}_\beta \approx -\lambda_\beta \nabla \tilde{T}_\beta \quad (1.2.87)$$

$$\bar{\mathbf{j}}_{\beta,k} \approx -\bar{\rho}_\beta D_{\beta,k} \nabla \tilde{Y}_{\beta,k} \quad (1.2.88)$$

$$\bar{P}_\beta^{th} \approx \alpha_\beta \bar{\rho}_\beta \frac{R}{\bar{W}_\beta} \tilde{T}_\beta \quad (1.2.89)$$

En revanche, la fermeture du taux de réaction filtré $\bar{\omega}_{\beta,k}$ n'est généralement pas basée sur une approche directe. En effet, les difficultés d'évaluer ce terme résultent de son caractère fortement non linéaire par rapport à la température et aux fractions massiques. Afin d'illustrer ces difficultés, nous considérons la réaction irréversible entre le carburant noté F et l'oxydant noté O :



Le taux de réaction $\dot{\omega}_{\beta,k}$ s'écrit :

$$\dot{\omega}_{\beta,k} = \nu_{\beta,k} C_1^f \rho_\beta^2 T_\beta^n Y_{\beta,F} Y_{\beta,O_2} \exp\left(\frac{-T_a}{T_\beta}\right) \quad (1.2.91)$$

En introduisant la décomposition en valeur moyenne et fluctuations pour la température et les fractions massiques, le taux de réaction homogène s'écrit :

$$\dot{\omega}_{\beta,k} = \nu_{\beta,k} C_1^f \rho_\beta^2 (\bar{T}_\beta + T'_\beta)^n (\bar{Y}_{\beta,F} + Y'_{\beta,F}) (\bar{Y}_{\beta,O_2} + Y'_{\beta,O_2}) \exp\left(\frac{-T_a}{(\bar{T}_\beta + T'_\beta)}\right) \quad (1.2.92)$$

A l'aide d'un développement en série de Taylor du premier ordre par rapport à T'_β/\bar{T}_β et $Y'_{\beta,k}/\bar{Y}_{\beta,k}$, le taux de réaction moyen peut être approximé par [98] :

$$\bar{\dot{\omega}}_{\beta,k} = \nu_{\beta,k} C_1^f \alpha_\beta \bar{\rho}_\beta^2 \bar{T}_\beta^n \bar{Y}_{\beta,F} \bar{Y}_{\beta,O_2} \exp\left(\frac{-T_a}{\bar{T}_\beta}\right) \left(1 + \left(\frac{\overline{Y'_{\beta,F} T'_\beta}}{\bar{Y}_{\beta,F} \bar{T}_\beta} + \frac{\overline{Y'_{\beta,O_2} T'_\beta}}{\bar{Y}_{\beta,O_2} \bar{T}_\beta}\right)\right) \quad (1.2.93)$$

L'approche directe utilisée pour évaluer le taux de réaction filtré conduit à une expansion très complexe en raison du caractère fortement non-linéaire du taux de réaction homogène par rapport à la température et aux fractions massiques. La principale difficulté est due à l'apparition des grandeurs telles que $(\overline{Y'_{\beta,F} T'_\beta}) / (\bar{Y}_{\beta,F} \bar{T}_\beta)$ et $(\overline{Y'_{\beta,O_2} T'_\beta}) / (\bar{Y}_{\beta,O_2} \bar{T}_\beta)$, qui doivent être fermées. Pour cette raison, les fermetures du taux de réaction filtré ne sont pas basées sur une approche directe, mais sur des analyses physiques. Toutefois, pour une réaction homogène en milieu poreux, une fermeture du taux de réaction moyen a été proposée par Yang *et al.* [148] pour une réaction d'ordre zéro en fractions massiques à partir de la méthode de prise de moyenne volumique.

Termes de transport par les fluctuations Le terme \mathbf{R}_β représente le tenseur des contraintes résiduelles associé à la prise de moyenne. Climent *et al.* [22, 23] ont décomposé ce terme en deux contributions. Une contribution due à la fluctuation irrotationnelle liée au déplacement du fluide induit par le glissement des particules et en une deuxième contribution induite par les mouvements rotationnels de petite échelle présents dans la couche limite et dans le sillage de la particule. Cependant, ces deux contributions sont négligeables devant le terme de convection pour un écoulement à faible nombre de Reynolds. Les termes $\mathcal{E}_{\beta,k}$ et \mathcal{H}_β représentent respectivement le transport des espèces k et l'enthalpie sensible par les fluctuations. Ces termes correspondent à la dispersion par les hétérogénéités du profil de vitesse dans la phase continue induite par la présence des particules, ils sont généralement négligés dans les équations macroscopiques.

1.3. Fermeture des termes d'échange aux interfaces : approche classique

Termes des échanges aux interfaces Les termes caractéristiques $\langle \Gamma_{\beta,k} \delta_{\beta\sigma} \rangle$, $\langle \Gamma_{\beta} \delta_{\beta\sigma} \rangle$, $\langle \mathbf{M}_{\beta} \delta_{\beta\sigma} \rangle$ et $\langle \Pi_{\beta} \delta_{\beta\sigma} \rangle$ des écoulements diphasiques correspondent respectivement aux termes source macroscopiques des transferts des espèces, de masse, de quantité de mouvement et d'enthalpie sensible aux interfaces. Ces quantités correspondent aux termes de couplage entre les phases continue et dispersée. Elles seront reliées aux équations régissant le mouvement dans la phase dispersée dans la prochaine section.

1.3 Fermeture des termes d'échange aux interfaces : approche classique

Le couplage entre la description eulérienne et le suivi lagrangien est réciproque. La phase continue agit sur le calcul du suivi lagrangien des particules par l'intermédiaire de \dot{m}_p , $\mathbf{f}_{\beta p}$ et $Q_{\beta p}$. La phase dispersée agit sur le calcul de la phase continue par le biais des différents termes sources $\langle \Gamma_{\beta,k} \delta_{\beta\sigma} \rangle$, $\langle \Gamma_{\beta} \delta_{\beta\sigma} \rangle$, $\langle \mathbf{M}_{\beta} \delta_{\beta\sigma} \rangle$ et $\langle \Pi_{\beta} \delta_{\beta\sigma} \rangle$ présents dans les équations de transport. Ces termes traduisent les échanges aux interfaces entre la phase continue et la phase dispersée.

Avant d'aborder l'approche classique retenue pour la fermeture de ces termes d'échange, nous rappellerons, dans un premier temps, comment les termes sources dans la description eulérienne peuvent être reliés au taux de consommation de la particules, aux forces exercées sur les particules ainsi qu'au flux thermique échangé avec les particules.

Nous nous intéressons dans un deuxième temps aux approches habituellement utilisées pour fermer ces différents termes d'échange. Ces approches sont basées sur l'analyse des transferts de masse, de quantité de mouvement et de chaleur autour d'une particule p isolée dans un milieu infini. Dans ce cadre et à partir de la résolution des problèmes de transferts, les termes \dot{m}_p , $\mathbf{f}_{\beta p}$ et $Q_{\beta p}$ sont exprimés en fonction des propriétés de la particule p (d_p , T_p et \mathbf{u}_p) et des propriétés de la phase continue prise *suffisamment* loin de la particule. Les problèmes de transferts massiques sont généralement abordés sur la base de résolution de problème de couche limite autour de la particule. La résolution des problèmes de transfert de quantité de mouvement et d'énergie s'appuie sur le même type de description mais en introduisant une décomposition des champs caractérisant l'écoulement de la phase porteuse en un champ non-perturbé et un champ perturbé. Historiquement, cette décomposition a été introduite initialement par Maxey et Riley [89] pour décrire la résultante des actions du fluide sur une particule, ensuite, elle a été utilisée par Michaelides et Feng [88] pour décrire le flux thermique reçu par la particule. En pratique, dans le cadre d'une description macroscopique Euler-Lagrange d'un écoulement contenant N_p particules, les champs non-perturbés sont généralement assimilés aux champs macroscopiques [13, 22].

Echange de masse A partir de la relation de saut aux interfaces Eq. (1.2.44), le transfert interfacial de masse, de la phase dispersée vers la phase continue, s'écrit :

$$\langle \Gamma_{\beta} \delta_{\beta\sigma} \rangle = - \langle \mathbf{n}_{\beta\sigma} \cdot (\rho_{\sigma} (\mathbf{u}_{\sigma} - \mathbf{w})) \delta_{\beta\sigma} \rangle \quad (1.3.1)$$

A partir de la définition de la moyenne, l'équation précédente s'écrit :

$$\langle \Gamma_{\beta} \delta_{\beta\sigma} \rangle = - \int_{A_{\beta\sigma}^{\mathcal{V}}} g(\mathbf{x} - \mathbf{r}) \rho_{\sigma} (\mathbf{u}_{\sigma} - \mathbf{w}) \cdot \mathbf{n}_{\beta\sigma} dS \quad (1.3.2)$$

où $A_{\beta\sigma}^{\mathcal{V}}$ correspond à l'interface entre les deux phases dans le volume de prise de moyenne \mathcal{V} . En notant $N_{\mathcal{V}}$ particules dans le volume de prise de moyenne, l'équation précédente s'écrit :

$$\langle \Gamma_{\beta} \delta_{\beta\sigma} \rangle = - \sum_{p=1}^{N_{\mathcal{V}}} \int_{A_p} g(\mathbf{x} - \mathbf{r}) \rho_{\sigma} (\mathbf{u}_{\sigma} - \mathbf{w}) \cdot \mathbf{n}_{\beta\sigma} dS \quad (1.3.3)$$

Nous rappelons ici que nous nous intéresserons à des particules de taille d_p petite par rapport aux échelles caractéristiques de la phase continue L_{β} , et nous souhaitons filtrer spatialement les équations

à une échelle r_0 telle que $d_p \ll r_0 \ll L_\beta$. Ainsi, les variations de la fonction de poids g peuvent être négligées à l'échelle de la particule, on obtient alors :

$$\langle \Gamma_\beta \delta_{\beta\sigma} \rangle = - \sum_{p=1}^{N_V} g(\mathbf{x} - \mathbf{x}_p) \int_{A_p} \rho_\sigma (\mathbf{u}_\sigma - \mathbf{w}) \cdot \mathbf{n}_{\beta\sigma} dS \quad (1.3.4)$$

Dans l'équation précédente, l'intégrale surfacique représente le flux de masse dû à l'oxydation de la particule p . A partir des équations Eqs. (1.2.78) et (1.3.4), le transfert interfacial de l'espèce k de la phase dispersée à la phase continue s'écrit :

$$\langle \Gamma_\beta \delta_{\beta\sigma} \rangle = - \sum_{p=1}^{N_V} g(\mathbf{x} - \mathbf{x}_p) \dot{m}_p \quad (1.3.5)$$

A partir de la relation de saut aux interfaces Eq. (1.2.43), le transfert interfacial de l'espèce k , de la phase dispersée vers la phase continue, s'écrit :

$$\langle \Gamma_{\beta,k} \delta_{\beta\sigma} \rangle = \langle \varpi_k \delta_{\beta\sigma} \rangle \quad (1.3.6)$$

En suivant la même méthodologie utilisée dans le calcul de l'échange de masse, la relation de saut Eq. (1.2.43) et la définition du taux surfacique de réaction Eq. (1.2.14), l'équation précédente devient :

$$\langle \Gamma_{\beta,k} \delta_{\beta\sigma} \rangle = \frac{\nu_{\sigma,k} W_k}{\nu_{\sigma,s} W_s} \sum_{p=1}^{N_V} g(\mathbf{x} - \mathbf{x}_p) \int_{A_p} \varpi_s dS_r \quad (1.3.7)$$

D'autre part, à partir de la relation de saut Eq. (1.2.45) et la définition du taux de consommation de la particule Eq. (1.2.78), on obtient :

$$\langle \Gamma_{\beta,k} \delta_{\beta\sigma} \rangle = \frac{\nu_{\sigma,k} W_k}{\nu_{\sigma,s} W_s} \sum_{p=1}^{N_V} g(\mathbf{x} - \mathbf{x}_p) \dot{m}_p \quad (1.3.8)$$

Echange de quantité de mouvement Le transfert de quantité de mouvement aux interfaces s'écrit sous la forme :

$$\langle \mathbf{M}_\beta \delta_{\beta\sigma} \rangle = \langle \mathbf{n}_{\beta\sigma} \cdot (-p_\beta \mathbf{I} + \boldsymbol{\tau}_\beta) \delta_{\beta\sigma} \rangle + \langle \mathbf{u}_\beta \Gamma_\beta \delta_{\beta\sigma} \rangle \quad (1.3.9)$$

La première contribution du membre de droite d'équation précédente représente, au signe près, les contraintes de la pression et visqueuse. Cette contribution est reliée à la force qui modélise l'action du fluide sur les particules $\mathbf{f}_{\beta p}$:

$$\begin{aligned} \langle \mathbf{n}_{\beta\sigma} \cdot (-p_\beta \mathbf{I} + \boldsymbol{\tau}_\beta) \delta_{\beta\sigma} \rangle &= \sum_{p=1}^{N_V} g(\mathbf{x} - \mathbf{x}_p) \int_{A_p} (-p_\beta \mathbf{I} + \boldsymbol{\tau}_\beta) \cdot \mathbf{n}_{\beta\sigma} dS \\ &= - \sum_{p=1}^{N_V} g(\mathbf{x} - \mathbf{x}_p) \mathbf{f}_{\beta p} \end{aligned} \quad (1.3.10)$$

Le deuxième terme du membre de droite de l'équation Eq. (1.3.9) correspond à la quantité de mouvement transportée par le flux de masse échangé avec les phases dispersées :

$$\begin{aligned} \langle \mathbf{u}_\beta \Gamma_\beta \delta_{\beta\sigma} \rangle &= - \langle \mathbf{u}_\beta \Gamma_\sigma \delta_{\beta\sigma} \rangle \\ &= - \sum_{p=1}^{N_V} g(\mathbf{x} - \mathbf{x}_p) \int_{A_p} \rho_\sigma \mathbf{u}_\beta (\mathbf{u}_\sigma - \mathbf{w}) \cdot \mathbf{n}_{\beta\sigma} dS \end{aligned} \quad (1.3.11)$$

1.3. Fermeture des termes d'échange aux interfaces : approche classique

où l'intégrale surfacique représente la quantité de mouvement induite par la combustion de la particule p , définie par :

$$\int_{A_p} \rho_\sigma \mathbf{u}_\beta (\mathbf{u}_\sigma - \mathbf{w}) \cdot \mathbf{n}_{\beta\sigma} dS = \mathbf{u}_\beta^{(A_p)} \dot{m}_p \quad (1.3.12)$$

Ainsi l'équation Eq. (1.3.11) s'écrit :

$$\langle \mathbf{u}_\beta \Gamma_{\beta\sigma} \delta_{\beta\sigma} \rangle = - \sum_{p=1}^{N_V} g(\mathbf{x} - \mathbf{x}_p) \mathbf{u}_\beta^{(A_p)} \dot{m}_p \quad (1.3.13)$$

Finalement, en regroupant les relations Eqs. (1.3.10) et (1.3.13), l'échange de quantité de mouvement aux interfaces s'écrit :

$$\langle \mathbf{M}_\beta \delta_{\beta\sigma} \rangle = - \sum_{p=1}^{N_V} g(\mathbf{x} - \mathbf{x}_p) \left(\mathbf{f}_{\beta p} + \mathbf{u}_\beta^{(A_p)} \dot{m}_p \right)$$

Echange d'énergie Le terme source macroscopique de transfert d'enthalpie sensible résultant des échanges aux interfaces, peut se décomposer de la manière suivante :

$$\langle \Pi_\beta \delta_{\beta\sigma} \rangle = \langle (-\mathbf{q}_\beta \cdot \mathbf{n}_{\beta\sigma}) \delta_{\beta\sigma} \rangle + \sum_{k=1}^{N_e} \langle H_{\beta,k} \Gamma_{\beta,k} \delta_{\beta\sigma} \rangle \quad (1.3.14)$$

La première contribution dans l'échange d'enthalpie aux interfaces, représente, au signe près, le flux de transfert thermique échangé avec les particules :

$$\begin{aligned} \langle (-\mathbf{q}_\beta \cdot \mathbf{n}_{\beta\sigma}) \delta_{\beta\sigma} \rangle &= - \sum_{p=1}^{N_V} g(\mathbf{x} - \mathbf{x}_p) \int_{S_p} \mathbf{q}_\beta \cdot \mathbf{n}_{\beta\sigma} dS_r \\ &= - \sum_{p=1}^{N_V} g(\mathbf{x} - \mathbf{x}_p) Q_{\beta p} \end{aligned} \quad (1.3.15)$$

La deuxième contribution dans l'équation Eq. (1.3.14) représente la quantité d'enthalpie transportée par le flux de masse échangé avec la phase dispersée (*cf.* annexe B) :

$$\begin{aligned} \sum_{k=1}^{N_e} \langle H_{\beta,k} \Gamma_{\beta,k} \delta_{\beta\sigma} \rangle &= \sum_{k=1}^{N_e} \frac{\nu_{\sigma,k} W_k}{\nu_{\sigma,s} W_s} \langle H_{\beta,k} \Gamma_{\beta,k} \delta_{\beta\sigma} \rangle \\ &= \sum_{k=1}^{N_e} \frac{\nu_{\sigma,k} W_k}{\nu_{\sigma,s} W_s} \sum_{p=1}^{N_V} g(\mathbf{x} - \mathbf{x}_p) \int_{A_p} \rho_\sigma H_{\beta,k} (\mathbf{u}_\sigma - \mathbf{w}) \cdot \mathbf{n}_{\beta\sigma} dS \\ &= \sum_{p=1}^{N_V} g(\mathbf{x} - \mathbf{x}_p) \sum_{k=1}^{N_e} \frac{\nu_{\sigma,k} W_k}{\nu_{\sigma,s} W_s} H_{\beta,k}^{(A_p)} \dot{m}_p \end{aligned} \quad (1.3.16)$$

En regroupant les équations précédentes, l'échange d'enthalpie sensible s'écrit :

$$\langle \Pi_\beta \delta_{\beta\sigma} \rangle = - \sum_{p=1}^{N_V} g(\mathbf{x} - \mathbf{x}_p) \left(Q_p - \sum_{k=1}^{N_e} \frac{\nu_{\sigma,k} W_k}{\nu_{\sigma,s} W_s} H_{\beta,k}^{(A_p)} \dot{m}_p \right) \quad (1.3.17)$$

On rappelle que dans le cas où les espèces gazeuses ont la même capacité thermique et sont produites à la T_p et que le transfert de masse à la surface de la particule est à symétrie sphérique, l'échange

d'enthalpie sensible s'écrit :

$$\langle \Pi_\beta \delta_{\beta\sigma} \rangle = - \sum_{p=1}^{N_Y} g(\mathbf{x} - \mathbf{x}_p) (Q_p + H_\beta(T_p) \dot{m}_p) \quad (1.3.18)$$

A ce stade des développements, il est nécessaire de modéliser les termes \dot{m}_p , $\mathbf{f}_{\beta p}$ et $Q_{\beta p}$ pour fermer les équations Euler-Lagrange. Dans la suite de cette section, nous nous intéressons aux approches habituellement utilisées pour fermer ces termes qui s'appuient sur la résolution de problèmes de couche limite autour de chaque particule.

1.3.1 Echanges de masse

La modélisation du taux de consommation de la particule dépend de la manière avec laquelle cette dernière s'oxyde. Ce terme sera déterminé à partir des techniques de prise de moyenne volumique pour l'oxydation d'une particule de carbone dans le chapitre 3. Nous présentons néanmoins, dans ce paragraphe, la démarche classique appliquée au cas où la particule s'évapore dans une atmosphère oxydante. Les échanges de masse dus à l'oxydation d'une particule sont déterminés à partir de la résolution des problèmes de transferts dans la couche limite massique d'épaisseur δ_Y , définie par :

$$Y_{\beta, O_2}(\delta_Y) = Y_{\beta, O_2}^\infty \quad (1.3.19)$$

où Y_{β, O_2}^∞ représente la fraction massique de l'oxygène non-perturbé. La résolution du problème de couche limite est détaillée dans l'annexe D, seules les hypothèses majeures utilisées sont présentées ici :

- la vitesse de la phase continue est uniforme
- la particule se déplace à la même vitesse que la phase continue
- la réaction hétérogène est de premier ordre par rapport à l'oxygène
- la vitesse de l'interface dans le repère en mouvement est négligeable devant la vitesse de diffusion
- les transferts sont quasi-stationnaires, ce qui implique que les équations de transport dans la phase continue sont indépendantes du temps

Le problème est traité en coordonnées sphériques et en raison de la symétrie sphérique, seule la coordonnée radiale est considérée. Les équations de conservation de masse et de transport d'oxygène sont écrits dans le repère en mouvements. Ensuite, à partir de l'intégrale de ces équations entre la surface de la particule r_p et l'épaisseur de la couche limite, on obtient (*cf.* annexe D) :

$$\dot{m}_p = \frac{\nu_{\sigma, s} W_s B e^{-\frac{T_a}{T_p}}}{1 + \left(1 - \frac{r_p}{\delta_Y}\right) \frac{|\nu_{\sigma, O_2}| W_{O_2} B e^{-\frac{T_a}{T_p}}}{\rho_\beta D_{\beta, O_2}}} A_p Y_{\beta, O_2}^\infty \quad (1.3.20)$$

L'écoulement autour de la particule n'est généralement pas au repos et pour prendre en compte la présence d'écoulement relatif, l'épaisseur de la couche limite est généralement définie à partir du nombre de Sherwood [128] :

$$\frac{\delta_Y}{r_p} = \frac{1}{1 - \frac{2}{Sh}} \quad (1.3.21)$$

où le nombre de Sherwood est estimé à partir de la corrélation de Ranz-Marshall [113] :

$$Sh = 2 + 0.6 \text{Re}_p^{1/2} Sc^{1/3} \quad (1.3.22)$$

Pour une particule placée dans une milieu au repos, on obtient la valeur $Sh = 2$, ce qui implique que les épaisseurs des couches limites deviennent infinies ($\delta_Y \rightarrow \infty$).

1.3. Fermeture des termes d'échange aux interfaces : approche classique

1.3.2 Echange de quantité de mouvement

A partir de la décomposition du champ des variables caractéristiques de l'écoulement en un champ localement non-perturbé par la présence de la particule p et un autre champ perturbé par la seule présence de la particule, la résultante des actions du fluide sur une particule s'écrit [123] :

$$\mathbf{f}_{\beta p} = \mathbf{f}_{\beta p}^{(0)} + \mathbf{f}_{\beta p}^{(1)} \quad (1.3.23)$$

La première contribution $\mathbf{f}_{\beta p}^{(0)}$ désigne la force virtuelle exercée par l'écoulement fluide localement non-perturbé sur une particule fluide qui coïncide avec la particule solide. La deuxième contribution $\mathbf{f}_{\beta p}^{(1)}$ est la force résultant des perturbations du champ de vitesse dues à la présence de la particule.

La force virtuelle $\mathbf{f}_{\beta p}^{(0)}$ exercée par l'écoulement non-perturbé sur une sphère fictive A_p s'écrit sous la forme [53] :

$$\mathbf{f}_{\beta p}^{(0)} = - \int_{A_p} \left(-p_{\beta}^{(0)} \mathbf{I} + \boldsymbol{\tau}_{\beta}^{(0)} \right) \mathbf{n}_{\beta\sigma} dS \quad (1.3.24)$$

où $\boldsymbol{\tau}_{\beta}^{(0)}$ et $p_{\beta}^{(0)}$ représentent respectivement le tenseur des contraintes visqueuses et la pression de la phase continue en l'absence de la particule. Il est également possible d'exprimer $\mathbf{f}_{\beta p}^{(0)}$ sous la forme [53] :

$$\mathbf{f}_{\beta p}^{(0)} = V_p \rho_{\beta} \frac{d_p \mathbf{u}_{\beta}^{(v)}}{dt} - V_p \rho_{\beta} \mathbf{g} \quad (1.3.25)$$

où V_p est le volume de la particule, $\mathbf{u}_{\beta}^{(v)}$ représente la vitesse fluide localement non-perturbée, moyennée sur le volume de la particule solide, et l'opérateur $\frac{d_p(\cdot)}{dt} = \partial_t(\cdot) + \mathbf{u}_{\beta}^{(0)} \cdot \nabla(\cdot)$ représente la dérivée particulaire associée au champ des vitesses non-perturbé $\mathbf{u}_{\beta}^{(0)}$. Les différents termes du membre de droite de l'équation Eq. (1.3.25) représentent respectivement la force de Tchen et la Poussée d'Archimède. La force de Tchen correspond à l'action exercée par l'écoulement non perturbé sur le volume de fluide occupé par l'inclusion. Elle est calculée en intégrant les forces de pression exercées par le fluide non-perturbé sur le volume de l'inclusion et en retranchant la contribution hydrostatique. La poussée d'Archimède est la résultante des forces de pression hydrostatique exercées par le fluide sur la particule.

La deuxième contribution qui prend en compte les perturbations de champs de vitesse dues à la présence de la particule s'écrit [123] :

$$\begin{aligned} \mathbf{f}_{\beta p}^{(1)} = & -\frac{1}{2} C_D \rho_{\beta} \frac{\pi d_p^2}{4} |\mathbf{u}_p - \mathbf{u}_{\beta}^{(s)}| \left(\mathbf{u}_p - \mathbf{u}_{\beta}^{(s)} \right) - \frac{\pi d_p^3}{6} \rho_f C_M \frac{d_p}{dt} \left(\mathbf{u}_p - \mathbf{u}_{\beta}^{(v)} \right) \\ & - \frac{\pi d_p^3}{4} C_H \int_0^t \frac{\sqrt{\rho_{\beta} \mu_{\beta}}}{d} \frac{d_p}{dt} \left(\mathbf{u}_p - \mathbf{u}_{\beta}^{(s)} \right) \frac{d\tau}{\sqrt{\pi(t-\tau)}} \end{aligned} \quad (1.3.26)$$

où C_D , C_M et C_H sont les coefficients de la force de traînée, de masse ajoutée, et de Basset. $\mathbf{u}_{\beta}^{(s)}$ représente la vitesse fluide localement non-perturbé, moyennée sur le surface de la particule solide. Les différents termes du membre de droite de l'équation Eq. (1.3.26) représentent respectivement la force de traînée, la force de masse ajoutée et la force de Basset. La force de traînée désigne la force qui s'oppose au mouvement d'un corps dans un liquide et agit comme un frottement. Il s'agit de la composante des efforts exercés sur la particule, dans le sens opposé au mouvement relatif de la particule par rapport à l'écoulement. La force de masse ajoutée résulte de l'accélération transmise au volume occupé par la particule lorsque le mouvement est instationnaire. La force de Basset, également appelée

force d'histoire, traduit l'écart entre la force visqueuse instantanée et celle qu'exercerait l'écoulement établi correspondant sur la particule.

À l'aide d'un développement limité au premier ordre de $\mathbf{u}_\beta^{(s)}$ et $\mathbf{u}_\beta^{(v)}$, Maxey-Riley [88] et Gatignol [53] ont fait apparaître les termes de Faxen traduisant la non-uniformité du champ de vitesse localement non-perturbé à l'échelle de la particule.

$$\mathbf{u}_\beta^{(v)} = \mathbf{u}_\beta^{(0)} + \frac{d_p^2}{40} \Delta \mathbf{u}_\beta^{(0)} + O\left(d_p^2 \Delta^4 \mathbf{u}_\beta^{(0)}\right) \quad (1.3.27)$$

$$\mathbf{u}_\beta^{(s)} = \mathbf{u}_\beta^{(0)} + \frac{d_p^2}{24} \Delta \mathbf{u}_\beta^{(0)} + O\left(d_p^2 \Delta^4 \mathbf{u}_\beta^{(0)}\right) \quad (1.3.28)$$

Dans le cas où le diamètre caractéristique des particules est suffisamment petit par rapport aux échelles de l'écoulement, les termes de Faxen deviennent négligeables, ce qui revient à remplacer $\mathbf{u}_\beta^{(s)}$ et $\mathbf{u}_\beta^{(v)}$ par $\mathbf{u}_\beta^{(0)}$. D'autre part, pour des mélanges gaz-particules avec un rapport de densité $\rho_\sigma/\rho_\beta > 10^3$, les différentes forces sont généralement négligeables devant la force de traînée [65].

Ainsi, la résultante des forces s'exerçant sur la particule s'écrit :

$$\mathbf{f}_{\beta p} = -\frac{1}{2} C_d \rho_f \frac{\pi d_p^2}{4} |\mathbf{u}_p - \mathbf{u}_\beta^{(0)}| \left(\mathbf{u}_p - \mathbf{u}_\beta^{(0)} \right) \quad (1.3.29)$$

où C_d est défini de façon empirique en fonction du nombre du Reynolds de la particule Re_p :

$$Re_p = \frac{\rho_\beta |\mathbf{u}_p - \mathbf{u}_\beta^{(0)}| d_p}{\mu_\beta} \quad (1.3.30)$$

Dans le cas des particules sphériques de diamètre uniforme d_p , ce coefficient est donné par la loi proposée par Wallis (1969) [123] :

$$\begin{aligned} C_D &= \frac{24}{Re_p} (1 + 0.15 Re_p^{0.687}) & Re_p \leq 1000 \\ C_D &= 0.44 & Re_p > 1000 \end{aligned} \quad (1.3.31)$$

1.3.3 Echanges thermiques

Afin de déterminer le flux thermique reçu par la particule, Michaelides et Feng ont suivi la même démarche que Maxey et Riley [88]. Il s'agit de décomposer le champ de température de la phase continue T_β en un champ localement non-perturbé par la particule $T_\beta^{(0)}$ et un champ perturbé par la présence de la particule $T_\beta^{(1)}$. Cela permet d'exprimer $Q_{\beta p}$ en deux contributions [89] :

$$Q_{\beta p} = Q_{\beta p}^{(0)} + Q_{\beta p}^{(1)} \quad (1.3.32)$$

La première contribution $Q_{\beta p}^{(0)}$ correspond au flux thermique transféré à la particule par l'écoulement non-perturbé, défini par :

$$Q_{\beta p}^{(0)} = - \int_{A_p} \mathbf{n}_{\beta\sigma} \cdot \lambda_\beta \nabla T_{\beta p}^{(0)} dS \quad (1.3.33)$$

Cette contribution représente le flux de chaleur reçu par une particule fluide qui coïncide avec la particule solide, cette contribution est généralement écrite sous une forme similaire à celle de la force de Tchen [89] :

$$Q_{\beta k}^{(0)} = (\rho c_p)_\beta V_p \frac{d_p T_\beta^{(0)}}{dt} \quad (1.3.34)$$

1.3. Fermeture des termes d'échange aux interfaces : approche classique

La deuxième contribution $Q_{\beta p}^{(1)}$ dans l'équation Eq. (1.3.32) désigne le flux thermique résultant des perturbations du champ de température induit par la présence de la particule, il est défini par :

$$Q_{\beta p}^{(1)} = - \int_{A_p} \mathbf{n}_{\beta\sigma} \cdot \lambda_{\beta} \nabla T_{\beta}^{(1)} dS \quad (1.3.35)$$

A partir de la résolution du problème de la couche limite thermique au voisinage d'une particule, ce terme peut être exprimé en fonction de la température non-perturbée [47, 89] :

$$Q_{\beta p}^{(1)} = \lambda_{\beta} \pi d_p \text{Nu}_p (T_{\beta}^{(0)} - T_p) + \lambda_{\beta} \pi d_p \int_0^t K_p(\tau) \frac{d(T_{\beta}^{(0)} - T_p)}{d\tau} d\tau \quad (1.3.36)$$

Le premier terme du membre de droite correspond au transfert de chaleur quasi-stationnaire de la particule vers le fluide environnant, où Nu_p représente le nombre de Nusselt défini par :

$$\text{Nu}_p = \frac{h_p d_p}{\lambda_{\beta}} \quad (1.3.37)$$

où h_p désigne le coefficient d'échange entre la phase continue et la particule. Dans les situations où la particule est immergée dans un gaz au repos, le nombre de Nusselt vaut 2 et pour un nombre de Reynolds fini, Nu_p est donné par des corrélations empiriques (*cf.* [47, 140]).

Le deuxième terme dans l'équation Eq. (1.3.36), ayant une forme similaire à celle de la force de Basset, correspond à la diffusion thermique instationnaire dans l'évolution temporelle de la température au voisinage de la particule, il dépend de l'historique des accélérations thermiques relatives. La fonction du noyau $K_p(\tau)$ qui apparaît dans l'intégrale d'histoire a été calculée analytiquement dans [89] en régime de Stokes et les résultats ont été étendus à un nombre de Reynolds fini à partir des corrélations empiriques dans [6, 47].

Le flux thermique non-perturbé est généralement négligeable devant le flux de diffusion quasi-stationnaire pour les mélanges gaz-particule avec une capacité thermique volumique de la phase continue négligeable devant celle des particules. D'autre part, le flux instationnaire peut être négligé si la taille des particules est beaucoup plus petite que la dimension caractéristique de l'écoulement [81]. Cependant nous garderons ces termes dans la suite du manuscrit, dans le but de comparer l'approche classique et celle choisie dans cette étude qui est basée sur la technique de la prise de moyenne volumique dans le chapitre 2.

1.4 Motivations et objectifs

L'objectif de ce travail est double; il s'agit d'une part d'apporter une contribution à la description macroscopique Euler-Lagrange fréquemment utilisée pour les simulations détaillées des écoulements diphasiques réactifs et, d'autre part, de réaliser une première étude sur la combustion laminaire d'un nuage de particules de graphite.

Dans la démarche classique que nous avons présentée précédemment, la fermeture des termes d'échange entre la phase porteuse continue et la phase dispersée est établie en considérant chaque particule du nuage comme isolée dans un champ fluide infini. La résolution des problèmes de couche limite au voisinage de chaque particule est réalisée en introduisant pour chaque champ de la phase porteuse (température, ...) une partie dite localement perturbée et localement non-perturbée par la présence de la particule. Pour un nuage contenant N_p particules, les champs localement non-perturbés correspondent aux champs fluides virtuels coïncidant avec la particule p et n'étant localement pas perturbés par cette dernière. Par contre, ces champs prennent en compte les perturbations dues aux autres $N_p - 1$ particules [13].

Si ce type d'approche conduit généralement en pratique à une bonne prédiction du comportement macroscopique, en particulier pour les mélanges gaz-particules très dilués, elle soulève néanmoins de nombreuses questions. Si dans le cas du couplage dit *one-way* (Fig. 1.7), le champ localement non-perturbé est parfaitement défini et correspond au champ macroscopique puisque les particules n'agissent pas sur la phase porteuse, la détermination du champ localement non-perturbé est moins directe dans le cas du couplage *two-way* (Fig. 1.7). En effet, dans le cas du couplage *two-way*, il n'est plus possible de négliger les interactions entre les particules via la phase continue et la détermination du champ localement non-perturbé nécessite de prendre en compte les perturbations des autres particules, dépendantes elles-mêmes de la particule considérée. En pratique, la taille du filtre est choisie suffisamment grande pour contenir assez de particules afin de négliger la perturbation induite par une seule particule et, dans ce cas, le champ localement non-perturbé peut être assimilé au champ filtré (e.g. [10, 15, 24, 96]).

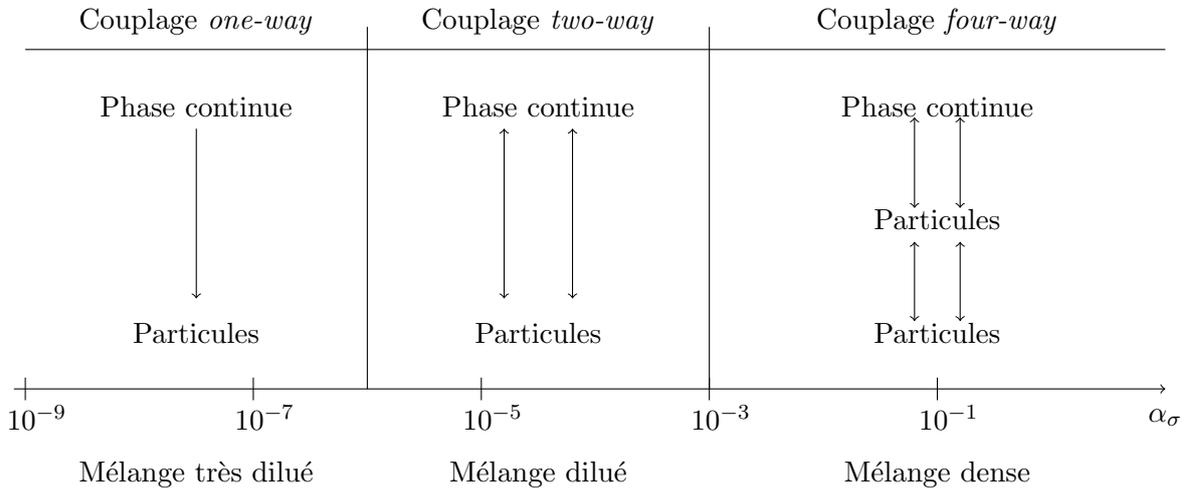


FIGURE 1.7 – Différents types de couplage entre les phases solide et fluide en fonction de la fraction volumique de la phase dispersée α_σ [44]

Dans ce contexte, l'objectif principal de ce travail consiste à proposer une approche alternative pour la modélisation macroscopique Euler-Lagrange des transferts de masse et de chaleur pour la combustion laminaire d'un nuage de particules. Dans ce premier travail, la modélisation des transferts de quantité de mouvement ne sera pas abordé et nous adopterons les fermetures correspondentes classiques présentées dans ce chapitre d'introduction. On se propose ici de relier les processus aux petites échelles

1.4. Motivations et objectifs

aux grandeurs macroscopiques en utilisant une approche de changement d'échelle correspondant ici à la méthode de prise de moyenne volumique avec fermetures (*e.g.* [33, 104]). Cette démarche consiste à obtenir les équations de transport macroscopiques et les termes d'échange entre phases à partir d'une prise de moyenne des équations de transport à la petite échelle et d'une proposition de représentation pour les fluctuations. Cette démarche permet d'identifier précisément les hypothèses nécessaires pour établir le modèle Euler-Lagrange. En outre, cette approche conduit à des problèmes locaux pour les fluctuations, appelés problèmes de fermeture, pouvant être résolus pour des micro-structures représentatives du milieu et permettant ainsi d'estimer les coefficients effectifs paramétrant le modèle macroscopique.

On se propose également dans ce travail de réaliser une première étude sur la combustion laminaire d'un nuage de particules de graphite. Il s'agit d'estimer la vitesse de flamme laminaire d'un nuage monodisperse de particules de graphite. Cette estimation est menée à partir de simulations détaillées Euler-Lagrange réalisées à partir du logiciel P²REMICS développé à l'IRSN. Les simulations sont réalisées dans le cas d'une configuration de flamme plane non étirée 1D de manière analogue aux simulations détaillées mise en oeuvre pour la combustion laminaire prémélangée. Il s'agit ici d'étudier l'influence de quelques caractéristiques du mélange gazeux et du nuage de poussières (chargement, diamètre de particule) sur la vitesse de flamme laminaire.

Pour atteindre ces objectifs, la suite du manuscrit de thèse est organisé de la façon suivante :

- Dans le Chapitre 2, on dérive un modèle macroscopique qui comporte deux différences principales avec les modèles classiques. Tout d'abord, on prend en compte des termes supplémentaires pour les transferts de chaleur faisant intervenir des échanges particule-particule à l'échelle macroscopique, et pas uniquement un échange particules-fluide. La deuxième différence réside dans le fait que les coefficients des échanges sont fonction du taux de dilution. Par ailleurs, on s'attache également à comparer le modèle proposé avec les modèles classiques. Des calculs analytiques et des simulations numériques directes sont réalisés dans le but de tester la validité des modèles proposés ainsi que des hypothèses qui amènent aux formulations locales classiques.
- Dans le Chapitre 3, un modèle macroscopique avec une fermeture quasi-stationnaire est proposé pour la description des transferts de masse associés à la combustion des particules de carbone. Les problèmes de fermeture sont résolus analytiquement, ce qui amène à un taux effectif de combustion des particules qui dépend directement de la fraction volumique. Les résultats macroscopiques obtenus sont comparés à des références analytiques et numériques obtenues pour une particule de carbone isolée, ce qui permet de valider l'approche proposée.
- Dans le Chapitre 4, on rassemble tous ces éléments afin de réaliser des simulations Euler-Lagrange utilisées pour déterminer la vitesse de flamme laminaire diphasique plane en fonction des caractéristiques du mélange gazeux et des poussières de graphite.

Chapitre 2

Modélisation macroscopique des échanges thermiques gaz-particules

Sommaire

2.1	Problème à l'échelle locale	41
2.2	Changement d'échelle	41
2.2.1	Equations de transport à l'échelle macroscopique	41
2.2.2	Problème local pour les fluctuations	44
2.3	Fermetures des équations filtrées	46
2.3.1	Proposition de fermeture pour les fluctuations	47
2.3.2	Modèle macroscopique : Euler-Lagrange	49
2.4	Comparaison théorique avec l'approche classique	58
2.5	Résultats et discussion	61
2.5.1	Evaluation de la fermeture quasi-stationnaire	61
2.5.2	Evaluation de l'approximation diagonale de la matrice des coefficients d'échange	65
2.5.3	Discussion	69
2.6	Conclusion	70

Comme nous l'avons vu dans le chapitre précédent, la modélisation du mélange dilué gaz-particules repose sur l'approche macroscopique où la phase continue est décrite de manière eulérienne filtrée et où un suivi lagrangien est appliqué aux particules. Une des difficultés principales de cette description est liée à la modélisation des échanges macroscopiques entre la phase continue et les particules. Dans l'approche classique, cette modélisation est généralement réalisée par extrapolation des résultats obtenus pour une particule isolée dans un milieu infini.

Dans ce chapitre, nous proposons une approche alternative pour décrire les échanges thermiques gaz-particules où le changement d'échelle est basé sur la technique de prise de moyenne volumique. Cette approche consiste à fermer les équations macroscopiques à partir des caractéristiques microscopiques. Ceci permet d'une part, d'identifier précisément le couplage micro-macro et d'autre part, d'estimer les coefficients effectifs qui paramètrent le modèle macroscopique à partir des problèmes locaux appelés problèmes de fermeture.

Nous nous focaliserons, dans ce chapitre, sur la description macroscopique des échanges thermiques entre les deux phases. Ainsi, la réaction homogène ne sera pas prise en compte et l'oxydation des particules sera modélisée par un terme source qui ne dépend ni de la température ni de la fraction massique d'oxygène. Dans ce cadre, nous commencerons par présenter le problème à l'échelle microscopique.

2.1. Problème à l'échelle locale

Ensuite, nous détaillerons le changement d'échelle permettant d'établir les équations filtrées. Enfin, une fermeture instationnaire du modèle macroscopique sera proposée.

Le modèle complet obtenu comprend des termes additionnels qui n'apparaissent pas dans les modèles classiques. L'importance de ces termes sera discutée et une version simplifiée du modèle sera présentée. La version définitive du modèle sera comparée aux modèles classiques, ensuite la validité du modèle sera évaluée à partir des résultats analytiques et numériques.

2.1 Problème à l'échelle locale

Nous nous focalisons dans ce chapitre sur les échanges thermiques entre la phase continue et les particules. La présence des réactions hétérogène et homogène rend le problème du transfert de chaleur fortement couplé avec les équations de conservation de masse et les équations de transport des espèces. Devant la complexité du problème couplé, nous supposons que la réaction hétérogène dans la phase dispersée peut être modélisée par un terme source constant généré dans les particules ψ_σ . Le terme source considéré est supposé indépendant de la température mais peut varier en espace selon la position de la particule. La réaction homogène dans la phase continue ne sera pas prise en compte car nous nous intéressons plus particulièrement à la description macroscopique des échanges entre la phase continue et la phase dispersée. Le lecteur intéressé pourra se reporter à Yong *et al.* [148] pour un exemple de changement d'échelle avec une réaction homogène de type Arrhenius. Sous ces hypothèses, les équations locales de conservation de l'énergie relatives à la phase β et σ (*i.e.* Eqs. (1.2.24) et Eqs. (B.0.3)) s'écrivent :

$$\partial_t \left((\rho c_p)_\beta T_\beta \right) + \nabla \cdot \left((\rho c_p)_\beta T_\beta \mathbf{u}_\beta \right) = \nabla \cdot \lambda_\beta \nabla T_\beta \quad \text{dans } \Omega_\beta \quad (2.1.1)$$

$$\partial_t \left((\rho c_p)_\sigma T_\sigma \right) + \nabla \cdot \left((\rho c_p)_\sigma T_\sigma \mathbf{u}_\sigma \right) = \nabla \cdot \lambda_\sigma \nabla T_\sigma + \psi_\sigma \quad \text{dans } \Omega_\sigma \quad (2.1.2)$$

où $(\rho c_p)_\eta$, T_η , λ_η et \mathbf{u}_η représentent respectivement la capacité thermique volumique, la température, la conductivité thermique et la vitesse de la phase η , $\eta = \beta, \sigma$. Les équations de transport précédentes sont accompagnées des conditions de continuité aux interfaces :

$$\mathbf{n}_{\beta\sigma} \cdot \lambda_\beta \nabla T_\beta = \mathbf{n}_{\beta\sigma} \cdot \lambda_\sigma \nabla T_\sigma \quad \text{sur } A_{\beta\sigma} \quad (2.1.3)$$

$$T_\beta = T_\sigma \quad \text{sur } A_{\beta\sigma} \quad (2.1.4)$$

où $A_{\beta\sigma}$ représente l'interface entre les deux phases et $\mathbf{n}_{\beta\sigma}$ la normale sortante de la phase β vers la phase σ . Les équations de transport ainsi que les conditions aux interfaces doivent être complétées par des conditions aux limites en entrée et en sortie du milieu considéré et des conditions initiales afin de compléter le problème local. Cependant, ces conditions ne sont généralement connues que pour les termes macroscopiques, il n'est donc pas nécessaire de les prescrire à ce stade [104, 143].

Nous supposons également que le problème d'écoulement diphasique peut être découplé du problème de transfert de chaleur et peut être résolu indépendamment. En conséquence, la vitesse des deux phases est supposée comme un champ connu.

2.2 Changement d'échelle

2.2.1 Equations de transport à l'échelle macroscopique

On rappelle que dans le cadre de l'approche macroscopique Euler-Lagrange, la description du transfert de chaleur dans la phase continue est réalisée de façon eulérienne par l'équation de transport de la température en grandeurs moyennes. Ces grandeurs sont définies sur un volume de prise de moyenne avec une taille caractéristique r_0 plus grande que la taille des particules d_p , mais suffisamment petite devant l'échelle caractéristique des variations significatives dans la phase continue L_β (*i.e.* $d_p \ll r_0 \ll L_\beta$). Pour la phase dispersée, la modélisation est basée sur l'approche lagrangienne, ce qui signifie qu'on suit l'évolution de la température de chaque particule dans le volume de prise de moyenne.

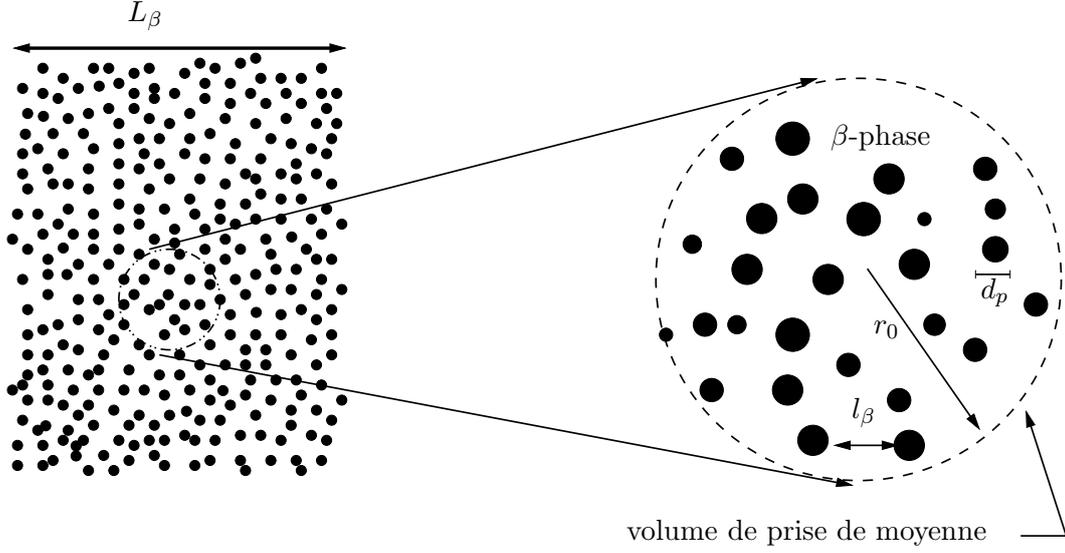


FIGURE 2.1 – Région macroscopique d'un milieu diphasique et volume de prise de moyenne associé

Pour déterminer l'équation de transport pour la température de la particule p , nous intégrons l'équation locale de transport de la température dans la phase dispersée Eq. (2.1.2) sur le volume V_p de la particule p , ce qui conduit à :

$$\int_{V_p} (\partial_t ((\rho c_p)_\sigma T_\sigma) + \nabla \cdot ((\rho c_p)_\sigma T_\sigma \mathbf{u}_\sigma)) dV = \int_{V_p} (\nabla \cdot \lambda_\sigma \nabla T_\sigma + \psi_\sigma) dV \quad (2.2.1)$$

En utilisant le théorème de transport de Reynolds et le théorème de la divergence [141], l'équation précédente s'écrit :

$$(m c_p)_p \frac{dT_p}{dt} = \int_{A_p} \mathbf{n}_{\beta\sigma} \cdot \lambda_\sigma \nabla T_\sigma dS + V_p \psi_p \quad (2.2.2)$$

où A_p est la surface de la particule p , et où T_p et ψ_p représentent respectivement la température et la puissance résiduelle générée dans la particule, définies par :

$$T_p = \frac{1}{V_p} \int_{V_p} T_\sigma dV \quad (2.2.3)$$

$$\psi_p = \frac{1}{V_p} \int_{V_p} \psi_\sigma dV \quad (2.2.4)$$

En utilisant la condition de saut Eq. (2.1.3), l'équation d'évolution de la température de la particule p peut s'écrire sous la forme :

$$(m c_p)_p \frac{dT_p}{dt} = - \int_{A_p} \mathbf{n}_{\beta\sigma} \cdot \lambda_\beta \nabla T_\beta dS + V_p \psi_p \quad (2.2.5)$$

En introduisant la décomposition en valeur moyenne et fluctuations pour la température de la phase continue :

$$\gamma_\beta T_\beta = \gamma_\beta \bar{T}_\beta + \gamma_\beta T'_\beta \quad (2.2.6)$$

2.2. Changement d'échelle

Nous rappelons, dans ce chapitre, que la masse volumique est supposée constante, ainsi nous nous limitons à l'utilisation de la moyenne intrinsèque. En introduisant la décomposition précédente dans l'équation Eq. (2.2.3), on obtient :

$$(mc_p)_p \frac{dT_p}{dt} = - \int_{A_p} \mathbf{n}_{\beta\sigma} \cdot \lambda_\beta \nabla \bar{T}_\beta \, dS - \int_{A_p} \mathbf{n}_{\beta\sigma} \cdot \lambda_\beta \nabla T'_\beta \, dS + V_p \psi_p \quad (2.2.7)$$

Nous nous intéressons, dans cette étude, à un mélange de gaz-particules dans lequel la conductivité thermique des particules est beaucoup plus grande que celle du fluide ($\lambda_\beta \ll \lambda_\sigma$). En utilisant la relation de saut (2.1.3), on obtient :

$$|\nabla T_p| = \left| \frac{\lambda_\beta}{\lambda_\sigma} \nabla T_\beta \right| \ll |\nabla T_\beta| \quad (2.2.8)$$

De ce fait, le gradient de la température à l'intérieur de la particule peut être négligé, la température au sein de la particule est donc considérée homogène. Cette hypothèse est également soutenue par le fait que la taille des particules qui nous intéressent ($\leq 100 \mu m$) est très petite devant les autres grandeurs caractéristiques, ce qui implique que le nombre de Biot ($Bi = h_p d_p / \lambda_\sigma$) est très petit devant l'unité [45, 89]. Dans la suite, nous adoptons l'approximation suivante :

$$T_\sigma \simeq T_p \quad \text{sur } A_p \quad (2.2.9)$$

Ainsi, la condition limite à l'interface Eq. (2.1.3) peut être éliminée des problèmes locaux.

D'autre part, pour obtenir l'équation macroscopique de transport de la température dans la phase continue, nous multiplions l'équation Eq. (2.1.1) relative à la phase continue β par la fonction caractéristique γ_β et nous utilisons les propriétés de la fonction caractéristique Eqs. (1.2.49) à (1.2.52). L'équation de transport de la température dans Ω s'écrit :

$$\partial_t \left(\gamma_\beta (\rho c_p)_\beta T_\beta \right) + \nabla \cdot \left(\gamma_\beta (\rho c_p)_\beta T_\beta \mathbf{u}_\beta \right) = \nabla \cdot (\gamma_\beta \lambda_\beta \nabla T_\beta) + \mathbf{n}_{\beta\sigma} \cdot \lambda_\beta \nabla T_\beta \delta_{\beta\sigma} \quad (2.2.10)$$

En appliquant l'opérateur de moyenne, défini par l'équation Eq (1.2.53) à l'équation précédente et en utilisant la commutativité de l'opérateur de moyenne avec les opérateurs de différenciation, on obtient :

$$\partial_t \left(\alpha_\beta (\rho c_p)_\beta \bar{T}_\beta \right) + \nabla \cdot \left(\gamma_\beta (\rho c_p)_\beta T_\beta \mathbf{u}_\beta \right) = \nabla \cdot (\langle \gamma_\beta \lambda_\beta \nabla T_\beta \rangle) + \langle \mathbf{n}_{\beta\sigma} \cdot \lambda_\beta \nabla T_\beta \delta_{\beta\sigma} \rangle \quad (2.2.11)$$

Nous avons supposé ici que les variations des propriétés physiques peuvent être négligées dans le volume de prise de moyenne, mais il faut noter que cette hypothèse ne signifie pas que ces propriétés sont constantes à l'échelle macroscopique [142].

A partir de la décomposition en valeur moyenne et fluctuations Eq. (1.2.61) pour la température et la vitesse de la phase continue, le terme convectif dans l'équation précédente s'écrit :

$$\nabla \cdot \left(\langle \gamma_\beta (\rho c_p)_\beta T_\beta \mathbf{u}_\beta \rangle \right) = \nabla \cdot \left(\alpha_\beta (\rho c_p)_\beta \bar{T}_\beta \bar{\mathbf{u}}_\beta \right) + \nabla \cdot \left(\alpha_\beta (\rho c_p)_\beta \overline{T'_\beta \mathbf{u}'_\beta} \right) \quad (2.2.12)$$

D'autre part, en se basant sur la propriété de la fonction caractéristique Eq. (1.2.49) et la linéarité de l'opérateur moyenne, le premier terme du membre de droite de l'équation Eq. (2.2.11) peut s'écrire sous la forme :

$$\nabla \cdot (\langle \gamma_\beta \lambda_\beta \nabla T_\beta \rangle) = \nabla \cdot (\langle \lambda_\beta \nabla \gamma_\beta T_\beta \rangle + \langle \lambda_\beta T_\beta \mathbf{n}_{\beta\sigma} \delta_{\beta\sigma} \rangle) \quad (2.2.13)$$

En utilisant la commutativité de l'opérateur de moyenne et la décomposition spatiale pour la température Eq. (2.2.6), l'équation précédente s'écrit :

$$\begin{aligned} \nabla \cdot (\langle \gamma_\beta \lambda_\beta \nabla T_\beta \rangle) &= \nabla \cdot \lambda_\beta \left(\nabla (\alpha_\beta \bar{T}_\beta) + \overline{\bar{T}_\beta \mathbf{n}_{\beta\sigma} \delta_{\beta\sigma}} + \langle T'_\beta \mathbf{n}_{\beta\sigma} \delta_{\beta\sigma} \rangle \right) \\ &= \nabla \cdot \lambda_\beta \left(\alpha_\beta \nabla \bar{T}_\beta + \bar{T}_\beta \nabla \alpha_\beta + \overline{\bar{T}_\beta \mathbf{n}_{\beta\sigma} \delta_{\beta\sigma}} + \langle T'_\beta \mathbf{n}_{\beta\sigma} \delta_{\beta\sigma} \rangle \right) \end{aligned} \quad (2.2.14)$$

Enfin, à partir des développements relatifs à la propriété de l'idempotence de l'opérateur de moyenne, les deuxième et troisième termes du second membre de l'équation précédente s'annulent entre eux et cette dernière devient :

$$\nabla \cdot (\langle \gamma_\beta \lambda_\beta \nabla T_\beta \rangle) = \nabla \cdot \lambda_\beta (\alpha_\beta \nabla \bar{T}_\beta + \langle T'_\beta \mathbf{n}_{\beta\sigma} \delta_{\beta\sigma} \rangle) \quad (2.2.15)$$

De la même manière, le deuxième terme du second membre de l'équation Eq. (2.2.11) peut s'écrire sous la forme :

$$\begin{aligned} \langle \mathbf{n}_{\beta\sigma} \cdot \lambda_\beta \nabla T_\beta \delta_{\beta\sigma} \rangle &= \langle \mathbf{n}_{\beta\sigma} \cdot \lambda_\beta \nabla \bar{T}_\beta \delta_{\beta\sigma} \rangle + \langle \mathbf{n}_{\beta\sigma} \cdot \lambda_\beta \nabla T'_\beta \delta_{\beta\sigma} \rangle \\ &= -\lambda_\beta \nabla \bar{T}_\beta \cdot \nabla \alpha_\beta + \langle \mathbf{n}_{\beta\sigma} \cdot \lambda_\beta \nabla T'_\beta \delta_{\beta\sigma} \rangle \end{aligned} \quad (2.2.16)$$

En regroupant les relations Eqs. (2.2.11)-(2.2.12)-(2.2.15)-(2.2.16), on obtient :

$$\begin{aligned} \partial_t (\alpha_\beta (\rho c_p)_\beta \bar{T}_\beta) + \nabla \cdot (\alpha_\beta (\rho c_p)_\beta \bar{T}_\beta \bar{\mathbf{u}}_\beta) + \nabla \cdot (\alpha_\beta (\rho c_p)_\beta \overline{T'_\beta \mathbf{u}'_\beta}) = \\ \lambda_\beta \nabla \cdot (\alpha_\beta \nabla \bar{T}_\beta + \langle T'_\beta \mathbf{n}_{\beta\sigma} \delta_{\beta\sigma} \rangle) - \nabla \alpha_\beta \cdot \lambda_\beta \nabla \bar{T}_\beta + \langle \mathbf{n}_{\beta\sigma} \cdot \lambda_\beta \nabla T'_\beta \delta_{\beta\sigma} \rangle \end{aligned} \quad (2.2.17)$$

A ce stade, l'équation de transport Eq. (2.1.1) à été réécrite en grandeurs moyennes et fluctuations de la température de la phase continue. Dans cette équation, le premier et le deuxième terme du membre de gauche représentent respectivement les termes classiques d'accumulation et de convection. Le troisième terme qui s'écrit sous la forme d'un produit de fluctuations de la température et de fluctuations de la vitesse désigne, quant à lui, le transport convectif de la température par les fluctuations à l'échelle microscopique. Il caractérise la dispersion hydrodynamique. D'autre part, le premier terme du membre de droite de l'équation Eq. (2.2.17) désigne la conduction thermique dans la phase continue et les deux derniers termes correspondent aux termes macroscopiques des transferts thermiques aux interfaces. Nous nous sommes inspirés ici de l'analyse de Quintard et Whitaker [106] pour interpréter le terme proportionnel au gradient de la fraction volumique α_β dans l'équation Eq. (2.2.17) comme un terme d'échange interfacial. On montrera dans la suite de ce chapitre que ce terme peut effectivement être assimilé à un terme d'échange interfacial.

A ce stade des développements, l'équation de transport macroscopique dans la phase continue Eq. (2.2.17) et l'équation d'évolution de la température des particules Eq. (2.2.7) font intervenir la température macroscopique \bar{T}_β avec une longueur caractéristique de variations L_β et les fluctuations T'_β qui sont des grandeurs microscopiques. Ainsi, les équations Eqs. (2.2.17) et (2.2.7) constituent une forme non fermée des équations macroscopiques qui ne permettent pas de calculer les champs des températures moyennes. En effet, ces équations doivent être exprimées sous forme de quantités moyennes et de propriétés effectives de transport. L'établissement des problèmes de fermeture permet de déterminer ces propriétés [14, 38].

2.2.2 Problème local pour les fluctuations

L'objectif maintenant est d'établir les relations de fermeture permettant d'obtenir une représentation des équations Eqs. (2.2.17) et (2.2.7) en fonction des variables macroscopiques uniquement. Pour relier les termes de fluctuations de la température aux températures macroscopiques, nous établissons tout d'abord les équations auxquelles obéissent les fluctuations. Pour cela, en multipliant l'équation locale de transport de la température dans la phase continue Eq. (2.1.1) sous la forme non-conservative par la fraction volumique et en introduisant la décomposition en valeur moyenne et fluctuations pour la vitesse et la température, on obtient :

$$\alpha_\beta (\rho_\beta c_p)_\beta (\partial_t \bar{T}_\beta + \partial_t T'_\beta + (\bar{\mathbf{u}}_\beta + \mathbf{u}'_\beta) \cdot \nabla (\bar{T}_\beta + T'_\beta)) = \alpha_\beta \lambda_\beta \nabla^2 (\bar{T}_\beta + T'_\beta) \quad (2.2.18)$$

L'équation de transport de température en grandeurs moyennes Eq. (2.2.17) peut s'écrire sous la forme non-conservative suivante :

$$\begin{aligned} \alpha_\beta (\rho c_p)_\beta (\partial_t \bar{T}_\beta + \bar{\mathbf{u}}_\beta \cdot \nabla \bar{T}_\beta) &= \alpha_\beta \lambda_\beta \nabla^2 \bar{T}_\beta + \lambda_\beta \nabla \cdot \langle T'_\beta \mathbf{n}_{\beta\sigma} \delta_{\beta\sigma} \rangle + \langle \mathbf{n}_{\beta\sigma} \cdot \lambda_\beta \nabla T'_\beta \delta_{\beta\sigma} \rangle \\ &\quad - \nabla \cdot (\alpha_\beta (\rho c_p)_\beta \overline{T'_\beta \mathbf{u}'_\beta}) \end{aligned} \quad (2.2.19)$$

2.2. Changement d'échelle

En soustrayant l'équation Eq. (2.2.19) de l'équation Eq. (2.2.18), on obtient l'équation locale pour les fluctuations :

$$(\rho_\beta c_p)_\beta (\partial_t T'_\beta + \mathbf{u}_\beta \cdot \nabla T'_\beta + \mathbf{u}'_\beta \cdot \nabla \bar{T}_\beta) = \lambda_\beta \nabla^2 T'_\beta - \alpha_\beta^{-1} \nabla \cdot \langle \lambda_\beta T'_\beta \mathbf{n}_{\beta\sigma} \delta_{\beta\sigma} \rangle - \alpha_\beta^{-1} \langle \mathbf{n}_{\beta\sigma} \cdot \lambda_\beta \nabla T'_\beta \delta_{\beta\sigma} \rangle + \alpha_\beta^{-1} \nabla \cdot \left(\alpha_\beta (\rho c_p)_\beta \overline{T'_\beta \mathbf{u}'_\beta} \right) \quad (2.2.20)$$

L'équation locale de transport pour les fluctuations développée ici peut être simplifiée sur la base d'une analyse de l'ordre de grandeur de ses différents termes. Cette analyse a été largement discutée dans la littérature [18, 104, 111], seules les principales étapes conduisant à la simplification de l'équation Eq. (2.2.20) seront présentées ci-dessous.

La première étape de cette analyse consiste à estimer les ordres de grandeur des fluctuations de la température et de la vitesse dans la phase continue. Ces estimations peuvent être obtenues en introduisant la décomposition en valeur moyenne et fluctuations pour T_β et \mathbf{u}_β respectivement dans la relation de saut Eq. (2.1.3) et dans la condition de non glissement aux interfaces, on obtient ainsi les estimations suivantes :

$$\mathbf{u}'_\beta = O(\bar{\mathbf{u}}_\beta) \quad (2.2.21)$$

$$T'_\beta = O\left(\frac{l_\beta}{L_\beta} \bar{T}_\beta\right) \quad (2.2.22)$$

Par ailleurs, en se basant sur les développements présentés dans [105], l'ordre de grandeur de la surface spécifique peut être estimé par :

$$\langle \mathbf{n}_{\beta\sigma} \gamma_\beta \delta_\beta \rangle = \frac{A_{\beta\sigma}}{\mathcal{V}} = O\left(\frac{\alpha_\beta}{l_\beta}\right) \quad (2.2.23)$$

où \mathcal{V} est le volume élémentaire représentatif associé à la fonction de prise de moyenne. À partir des approximations Eqs. (2.2.21) à (2.2.23), on obtient les ordres de grandeur des termes de l'équation Eq. (2.2.20) :

$$\lambda_\beta \nabla^2 T'_\beta = O\left(\frac{\lambda_\beta}{l_\beta L_\beta} \bar{T}_\beta\right) \quad (2.2.24)$$

$$\alpha_\beta^{-1} \nabla \cdot \langle \lambda_\beta T'_\beta \mathbf{n}_{\beta\sigma} \delta_{\beta\sigma} \rangle = O\left(\frac{\lambda_\beta}{L_\beta^2} \bar{T}_\beta\right) \quad (2.2.25)$$

$$\alpha_\beta^{-1} \nabla \cdot \left(\alpha_\beta (\rho c_p)_\beta \overline{T'_\beta \mathbf{u}'_\beta} \right) = O\left(\rho_\beta C_{p,\beta} \frac{l_\beta}{L_\beta^2} \bar{T}_\beta \bar{\mathbf{u}}_\beta\right) \quad (2.2.26)$$

$$(\rho_\beta c_p)_\beta \mathbf{u}_\beta \cdot \nabla T'_\beta = O\left((\rho_\beta c_p)_\beta \frac{1}{L_\beta} \bar{T}_\beta \bar{\mathbf{u}}_\beta\right) \quad (2.2.27)$$

$$\alpha_\beta^{-1} \langle \mathbf{n}_{\beta\sigma} \cdot \lambda_\beta \nabla T'_\beta \delta_{\beta\sigma} \rangle = O\left(\frac{\lambda_\beta}{L_\beta l_\beta} \bar{T}_\beta\right) \quad (2.2.28)$$

Sur la base de ces relations et de la contrainte de changement d'échelle $l_\beta \ll L_\beta$, on déduit les relations suivantes :

$$\alpha_\beta^{-1} \nabla \cdot \langle \lambda_\beta T'_\beta \mathbf{n}_{\beta\sigma} \delta_{\beta\sigma} \rangle \ll \lambda_\beta \nabla^2 T'_\beta \quad (2.2.29)$$

$$\alpha_\beta^{-1} \nabla \cdot \left(\alpha_\beta (\rho c_p)_\beta \overline{T'_\beta \mathbf{u}'_\beta} \right) \ll (\rho_\beta c_p)_\beta \mathbf{u}_\beta \cdot \nabla T'_\beta \quad (2.2.30)$$

Ainsi, l'équation locale de transport des fluctuations Eq. (2.2.20) peut s'écrire sous la forme simplifiée suivante :

$$(\rho_\beta c_p)_\beta (\partial_t T'_\beta + \mathbf{u}_\beta \cdot \nabla T'_\beta + \mathbf{u}'_\beta \cdot \nabla \bar{T}_\beta) = \lambda_\beta \nabla^2 T'_\beta - \alpha_\beta^{-1} \langle \mathbf{n}_{\beta\sigma} \cdot \lambda_\beta \nabla T'_\beta \delta_{\beta\sigma} \rangle \quad (2.2.31)$$

La relation de saut aux interfaces relative aux fluctuations de la température s'obtient directement à partir de la relation de saut Eq. (2.1.4) dans laquelle on introduit la décomposition en valeurs moyennes et fluctuations Eq. (2.2.6). Cette procédure peut être répétée pour les autres équations du problème local relatif à la phase continue, fournissant ainsi le problème local complet pour les fluctuations :

$$(\rho_\beta c_p)_\beta (\partial_t T'_\beta + \mathbf{u}_\beta \cdot \nabla T'_\beta + \mathbf{u}'_\beta \cdot \nabla \bar{T}_\beta) = \lambda_\beta \nabla^2 T'_\beta - \alpha_\beta^{-1} \langle \mathbf{n}_{\beta\sigma} \cdot \lambda_\beta \nabla T'_\beta \delta_{\beta\sigma} \rangle \quad (2.2.32)$$

$$T'_\beta = T_p - \bar{T}_\beta \quad \text{sur } A_{\beta\sigma} \quad (2.2.33)$$

$$T'_\beta = \mathcal{I}_\beta(\mathbf{r}) \quad t = 0 \quad (2.2.34)$$

$$T'_\beta = \mathcal{L}_\beta(\mathbf{r}, t) \quad \text{sur } A_{\beta l} \quad (2.2.35)$$

$$\langle \gamma_\beta T'_\beta \rangle = 0 \quad (2.2.36)$$

La condition Eq. (2.2.36) est une condition supplémentaire qui traduit une condition de moyenne nulle pour les fluctuations et qui assure l'unicité des solutions des problèmes quasi-stationnaires [38]. Pour que le problème local des fluctuations soit complet, nous avons écrit ici les conditions aux limites en entrée et en sortie du milieu considéré $A_{\beta l}$ ainsi que la condition initiale. Toutefois, il faut noter que ces conditions ne sont généralement connues que pour les variables macroscopiques. Ces conditions représentent un rappel de ce que nous ignorons du problème de fermeture [144].

A ce stade, pour obtenir une description macroscopique du système diphasique, nous devons résoudre simultanément les équations macroscopiques de transport dans la phase continue Eq. (2.2.17), l'équation d'évolution de la température des particules Eq. (2.2.7), ainsi que le problème local pour les fluctuations Eqs. (2.2.32) à (2.2.36). Cela conduit à un problème plus complexe que le problème initial de transport à l'échelle locale. Il faut noter que nous n'avons aucune intention de résoudre ce problème couplé entre les variables macroscopiques et microscopiques, mais de construire une estimation du problème de couplage micro-macro sur un volume représentatif des propriétés du milieu à l'échelle microscopique.

En effet, les fluctuations peuvent être associées à deux échelles de longueur caractéristique. La première est l'échelle microscopique qui influence les fluctuations à travers les variations dues aux conditions limites aux interfaces $A_{\beta\sigma}$. La seconde est la grande échelle de longueur qui influence les fluctuations, à travers les variations des variables macroscopiques [142].

D'une part, compte tenu de la contrainte de séparation d'échelle, les conditions limites n'influencent les fluctuations que dans une région d'épaisseur l_β au voisinage des frontières du domaine macroscopique [83] et d'autre part, les variables macroscopiques présentes dans le problème local pour les fluctuations, peuvent être considérées comme des fonctions variant lentement par rapport aux fluctuations [18, 104, 111, 149]. Ainsi, nous avons seulement besoin de déterminer T'_β dans une région représentative du volume macroscopique. Pour un milieu ordonné, le volume peut être représenté par une cellule unitaire périodique. On peut alors remplacer les conditions aux limites en entrée et en sortie du volume représentatif par des conditions de périodicité :

$$T'_\beta(\mathbf{x} + \mathbf{r}_i) = T'_\beta(\mathbf{x}) \quad \text{sur } A_{\beta e} \quad (2.2.37)$$

où \mathbf{r}_i désigne le vecteur de périodicité dans la direction i . Concernant les milieux désordonnés, le lecteur pourra se référer à Quintard *et al.* [103] et Quintard et Whitaker [104, 105], pour une discussion complète sur l'utilisation des cellules unitaires périodiques et leur validité concernant les milieux désordonnés. Notons toutefois que pour un milieu désordonné, les conditions de périodicité peuvent être utilisées sous réserve que la taille de la cellule unitaire soit suffisamment grande devant les longueurs de corrélation des hétérogénéités [103].

2.3 Fermetures des équations filtrées

Le problème local pour les fluctuations Eqs (2.2.32) à (2.2.36) n'est pas homogène en T'_β puisque des termes macroscopiques y sont présents. Sous l'hypothèse de la séparation des échelles, ces termes

2.3. Fermetures des équations filtrées

peuvent être considérés constants au sein du volume de la prise de moyenne. Ainsi, ils peuvent être vus comme des termes sources macroscopiques responsables des fluctuations [90, 104, 149]. Notre objectif dans cette partie est de construire une approximation des fluctuations en fonction des termes sources et des variables de fermeture qui peuvent être déterminées en résolvant les problèmes de fermeture.

La première approximation du problème mixte a été introduite initialement pour des fermetures quasi-stationnaires. Ces fermetures sont basées sur l'hypothèse que les variations spatiales à l'échelle locale sont quasi-stationnaires par rapport aux variations des grandeurs macroscopiques, ainsi les fluctuations peuvent être traitées de manière quasi-stationnaire, même si le problème à l'échelle macroscopique est instationnaire [103, 104, 149]. Cette hypothèse est largement utilisée pour dériver les modèles macroscopiques de transport dans les milieux poreux avec la méthode de prise de moyenne volumique [33, 111, 143].

Dans ce cas, la solution pour les fluctuations est recherchée sous la forme d'une combinaison linéaire des termes sources macroscopiques responsables des fluctuations dans le problème local et des variables de fermeture dépendant uniquement des paramètres physiques et de la variable d'espace. Le modèle macroscopique qui en résulte est caractérisé par des coefficients de transport effectifs qui ne dépendent que des paramètres physiques. Par conséquent, les effets d'histoire peuvent être perdus dans les équations macroscopiques.

Afin d'incorporer les phénomènes liés aux effets d'histoire dans le modèle macroscopique pour les problèmes nécessitant une modélisation plus riche du comportement transitoire, l'hypothèse de quasi-stationnarité est abandonnée et des fermetures instationnaires sont proposées [32, 75, 90]. Dans ce cas, l'approximation des fluctuations est définie sous la forme de produits de convolution des grandeurs macroscopiques responsables des fluctuations et des variables de fermeture dépendant non seulement de la variable d'espace et les paramètres physiques mais également du temps. Comme pour l'approximation quasi-stationnaire, les variables de fermeture sont solutions des problèmes de fermeture qui sont, dans ce cas, instationnaires.

Le modèle macroscopique qui résulte de la fermeture instationnaire est caractérisé par des coefficients de transport effectifs en fonction du temps. Il faut noter qu'aux temps longs, la vision instationnaire de l'approximation du problème mixte micro-macro converge vers la vision quasi-stationnaire, ce comportement asymptotique se traduit par une convergence du modèle macroscopique instationnaire vers le modèle quasi-stationnaire.

2.3.1 Proposition de fermeture pour les fluctuations

Dans les équations Eqs.(2.2.32) à (2.2.36) qui constituent le problème local pour les fluctuations on peut identifier les termes sources macroscopiques responsables des fluctuations $\nabla \bar{T}_\beta$ et $(\bar{T}_\beta|_{\mathbf{x}_p} - T_p)$ avec $1 \leq p \leq N_{\mathcal{V}}$, où $N_{\mathcal{V}}$ est le nombre de particules dans le volume de prise de moyenne \mathcal{V} . Pour représenter les fluctuations de température par une approximation instationnaire, nous nous appuyerons sur les travaux de [32, 90] :

$$T'_\beta = - \sum_{p=1}^{N_{\mathcal{V}}} s_p * \partial_t (\bar{T}_\beta|_{\mathbf{x}_p} - T_p) + \mathbf{b}_\beta \cdot * \partial_t (\nabla \bar{T}_\beta) \quad (2.3.1)$$

où \mathbf{x} et \mathbf{x}_p désignent respectivement, un point du volume de prise de moyenne et la position de la particule p . Les termes s_p et \mathbf{b}_β représentent les variables de fermeture et permettent de relier les fluctuations de la température aux variables macroscopiques. Ces inconnues dépendent du temps, de la variable d'espace \mathbf{x} (qui caractérise les variations spatiales à l'échelle locale) et des paramètres physiques de problème local. La notation $*$ dans l'équation Eq.(2.3.1) représente le produit de convolution en temps, défini pour les fonctions f_1 et f_2 par :

$$f_1(t) * f_2(t) = \int_0^t f(t-\tau)g(\tau) d\tau \quad (2.3.2)$$

Les inconnues des fermetures scalaires et vectorielles des représentations (2.3.1) sont solutions des problèmes de fermeture, lesquels doivent être résolus sur une région représentative du milieu considéré. Pour obtenir ces problèmes, la représentation des fluctuations est introduite dans les équations Eqs. (2.2.32) à (2.2.36), sous l'hypothèse de séparation d'échelles, les termes sources $(\bar{T}_\beta - T_p)$ et $\nabla\bar{T}_\beta$ sont considérés constants et indépendants au sein du volume élémentaire représentatif. Ensuite, les termes proportionnels aux $(\bar{T}_\beta - T_p)$ pour $1 \leq p \leq N$ et $\nabla\bar{T}_\beta$ sont regroupés [104]. On obtient ainsi p problèmes de fermeture identiques I_p pour les variables de fermeture s_p et un problème de fermeture II pour le variable \mathbf{b}_β .

Lors de l'introduction des représentations dans le problème local, nous adopterons l'approximation classique :

$$\nabla T'_\beta \simeq - \sum_{p=1}^{N_V} \nabla s_p * \partial_t (\bar{T}_\beta|_{\mathbf{x}_p} - T_p) + \nabla \mathbf{b}_\beta \cdot * \partial_t (\nabla \bar{T}_\beta) \quad (2.3.3)$$

Cette approximation est justifiée sur la base d'une analyse de l'ordre de grandeur de $\nabla T'_\beta$ (cf. [18, 104]). On note que dans le cadre du problème de Graetz sur un tube cylindrique, Golfier *et al.* [57] ont montré que la description macroscopique est plus précise lorsque les termes $s_p \nabla \bar{T}_\beta$ sont retenus dans les problèmes de fermeture instationnaire. Toutefois, ces termes ont été négligés pour un grand nombre de problèmes [18, 104].

Problème instationnaire I_p :

$$(\rho_\beta c_p)_\beta (\partial_t s_p + \mathbf{u}_\beta \cdot \nabla s_p) = \lambda_\beta \nabla^2 s_p - \alpha_\beta^{-1} H_p \quad \text{dans } \Omega_\beta \quad (2.3.4)$$

$$s_p = 1 \quad \text{sur } A_p \quad (2.3.5)$$

$$s_p = 0 \quad \text{sur } A_j \text{ avec } j \neq p \quad (2.3.6)$$

$$s_p(\mathbf{x} + \mathbf{r}_i) = s_p(\mathbf{x}), \quad \text{sur } A_{\beta e} \quad (2.3.7)$$

$$\langle \gamma_\beta s_p \rangle = 0 \quad (2.3.8)$$

$$s_p = 0 \quad \text{à } t = 0 \quad (2.3.9)$$

avec :

$$H_p = \langle \mathbf{n}_{\beta\sigma} \cdot \lambda_\beta \nabla s_p \delta_{\beta\sigma} \rangle \quad (2.3.10)$$

Problème instationnaire II :

$$(\rho_\beta c_p)_\beta (\partial_t \mathbf{b}_\beta + \mathbf{u}_\beta \cdot \nabla \mathbf{b}_\beta + \mathbf{u}'_\beta) = \lambda_\beta \nabla^2 \mathbf{b}_\beta - \alpha_\beta^{-1} \mathbf{v}_{\beta\beta} \quad \text{dans } \Omega_\beta \quad (2.3.11)$$

$$\mathbf{b}_\beta = 0 \quad \text{sur } A_p, 1 \leq p \leq N \quad (2.3.12)$$

$$\mathbf{b}_\beta(\mathbf{x} + \mathbf{r}_i) = \mathbf{b}_\beta(\mathbf{x}) \quad \text{sur } A_{\beta e} \quad (2.3.13)$$

$$\langle \gamma_\beta \mathbf{b}_\beta \rangle = 0 \quad (2.3.14)$$

$$\mathbf{b}_\beta = 0 \quad \text{à } t = 0 \quad (2.3.15)$$

avec :

$$\mathbf{v}_{\beta\beta} = \langle \mathbf{n}_{\beta\sigma} \cdot \lambda_\beta \nabla \mathbf{b}_\beta \delta_{\beta\sigma} \rangle \quad (2.3.16)$$

La prise de moyenne des équations Eq. (2.3.4) (*resp.* Eq. (2.3.11)) conduit aux conditions de moyennes Eq. (2.3.8) (*resp.* Eq. (2.3.14)) si les conditions initiales Eq. (2.3.9) (*resp.* Eq. (2.3.15)) sont vérifiées. En effet, les conditions de moyennes sont consistantes avec les conditions initiales, ces dernières peuvent donc être éliminées des problèmes de fermeture [90]. La démonstration est basée sur des intégrations par parties pour calculer la moyenne du deuxième terme du membre de gauche et sur le fait que les coefficients H_p et $\mathbf{v}_{\beta\beta}$ sont constants sur le volume de prise de moyenne.

2.3. Fermetures des équations filtrées

2.3.2 Modèle macroscopique : Euler-Lagrange

2.3.2.1 Forme fermée des équations à grande échelle

La forme fermée de l'équation macroscopique de transport de température dans la phase continue et l'équation d'évolution de la température des particules s'obtiennent en introduisant la représentation des fluctuations respectivement dans les équations Eqs. (2.2.17) et (2.2.7).

Afin d'obtenir les formes fermées de ces équations, nous commençons par rappeler que l'équation macroscopique de transfert dans la phase continue s'écrit sous la forme :

$$\begin{aligned}
 \underbrace{\partial_t \left(\alpha_\beta (\rho c_p)_\beta \bar{T}_\beta \right)}_{\text{accumulation}} + \underbrace{\nabla \cdot \left(\alpha_\beta (\rho c_p)_\beta \bar{T}_\beta \bar{\mathbf{u}}_\beta \right)}_{\text{convection}} &= \underbrace{\nabla \cdot \left(\alpha_\beta \lambda_\beta \nabla \bar{T}_\beta + \langle \lambda_\beta T'_\beta \mathbf{n}_{\beta\sigma} \delta_{\beta\sigma} \rangle \right)}_{\text{conduction}} \\
 &\quad - \underbrace{\nabla \alpha_\beta \cdot \lambda_\beta \nabla \bar{T}_\beta + \langle \mathbf{n}_{\beta\sigma} \cdot \lambda_\beta \nabla T'_\beta \delta_{\beta\sigma} \rangle}_{\text{termes d'échange}} \\
 &\quad - \underbrace{\nabla \cdot \left(\alpha_\beta (\rho c_p)_\beta \bar{T}_\beta \bar{\mathbf{u}}'_\beta \right)}_{\text{dispersion}} \quad (2.3.17)
 \end{aligned}$$

En introduisant l'expression des fluctuations en fonction des variables de fermeture Eq. (2.3.1) dans le terme d'échange aux interfaces, on obtient :

$$\langle \mathbf{n}_{\beta\sigma} \cdot \lambda_\beta \nabla T'_\beta \delta_{\beta\sigma} \rangle = - \sum_{p=1}^{N_\nu} H_p * \partial_t (\bar{T}_\beta|_{\mathbf{x}_p} - T_p) + \mathbf{v}_{\beta\beta} \cdot * \partial_t (\nabla \bar{T}_\beta) \quad (2.3.18)$$

où le coefficient H_p représente le coefficient macroscopique d'échange entre la phase continue et la particule p et le coefficient de transport effectif $\mathbf{v}_{\beta\beta}$ est assimilé à une vitesse de transport de la température \bar{T}_β induite par les particules. Ces coefficients sont définis respectivement dans les problèmes de fermeture I_p et II par Eqs. (2.3.10) et (2.3.16).

L'introduction de la représentation de T'_β dans le terme de dispersion conduit à l'expression :

$$\begin{aligned}
 \nabla \cdot \left((\rho c_p)_\beta \langle T'_\beta \mathbf{u}'_\beta \rangle \right) &= - \nabla \cdot \left(\sum_{p=1}^{N_\nu} (\rho c_p)_\beta \langle s_p \mathbf{u}'_\beta \rangle * \partial_t (\bar{T}_\beta|_{\mathbf{x}_p} - T_p) \right) \\
 &\quad + \nabla \cdot \left((\rho c_p)_\beta \langle \mathbf{u}'_\beta \mathbf{b}_\beta \rangle \cdot * \partial_t (\nabla \bar{T}_\beta) \right) \quad (2.3.19)
 \end{aligned}$$

De la même manière, en introduisant la représentation de T'_β dans le terme de conduction de l'équation (2.3.17), on obtient :

$$\begin{aligned}
 \nabla \cdot \left(\alpha_\beta \lambda_\beta \nabla \bar{T}_\beta + \langle \lambda_\beta T'_\beta \mathbf{n}_{\beta\sigma} \delta_{\beta\sigma} \rangle \right) &= \nabla \cdot \left((\alpha_\beta \lambda_\beta \mathbf{I} + \langle \lambda_\beta \mathbf{n}_{\beta\sigma} \cdot \mathbf{b}_\beta \delta_{\beta\sigma} \rangle) \cdot * \partial_t (\nabla \bar{T}_\beta) \right) \\
 &\quad - \nabla \cdot \left(\sum_{p=1}^{N_\nu} \langle \lambda_\beta s_p \mathbf{n}_{\beta\sigma} \delta_{\beta\sigma} \rangle * \partial_t (\bar{T}_\beta|_{\mathbf{x}_p} - T_p) \right) \quad (2.3.20)
 \end{aligned}$$

Nous introduisons le tenseur de conductivité thermique effective $\mathbf{K}_{\beta\beta}$ par :

$$\mathbf{K}_{\beta\beta} = \underbrace{\alpha_\beta \lambda_\beta \mathbf{I}}_{\text{diffusion}} + \underbrace{\langle \lambda_\beta \mathbf{n}_{\beta\sigma} \cdot \mathbf{b}_\beta \delta_{\beta\sigma} \rangle}_{\text{tortuosité}} - \underbrace{(\rho c_p)_\beta \langle \mathbf{u}'_\beta \mathbf{b}_\beta \rangle}_{\text{dispersion}} \quad (2.3.21)$$

Le tenseur $\mathbf{K}_{\beta\beta}$ tient compte de la diffusion thermique, de la tortuosité du milieu et de la dispersion thermique (traduit les effets de la dispersion hydrodynamique sur le transport thermique macroscopique). D'autre part, nous regroupons les termes associés aux déséquilibres thermiques dans les termes de dispersion Eq. (2.3.19) et de conduction Eq. (2.3.20) et nous définissons les coefficients :

$$\mathbf{d}_{\beta p} = \rho_\beta C_{p,\beta} \langle s_p \mathbf{u}'_\beta \rangle - \langle \lambda_\beta s_p \mathbf{n}_{\beta\sigma} \delta_{\beta\sigma} \rangle \quad (2.3.22)$$

Chapitre 2. Modélisation macroscopique des échanges thermiques gaz-particules

Le coefficient de transfert $\mathbf{d}_{\beta p}$ est assimilé à la vitesse de transport des déséquilibres thermiques macroscopiques entre la phase continue et la particule p , ce coefficient est appelé pseudo-vitesse couplée [106, 38].

A partir des équations Eqs. (2.3.18) à (2.3.20) et des définitions des coefficients effectifs $\mathbf{K}_{\beta\beta}$ et $\mathbf{d}_{\beta p}$, la forme fermée de l'équation de transport macroscopique dans la phase continue s'écrit :

$$\begin{aligned} \partial_t \left(\alpha_\beta (\rho c_p)_\beta \bar{T}_\beta \right) + \nabla \cdot \left(\alpha_\beta (\rho c_p)_\beta \bar{T}_\beta \bar{\mathbf{u}}_\beta \right) &= \nabla \cdot \left(\mathbf{K}_{\beta\beta} \cdot * \partial_t (\nabla \bar{T}_\beta) \right) - \sum_{p=1}^{N_V} H_p * \partial_t (\bar{T}_\beta|_{\mathbf{x}_p} - T_p) \\ &\quad + \mathbf{v}_{\beta\beta} \cdot * \partial_t (\nabla \bar{T}_\beta) - \lambda_\beta \nabla \alpha_\beta \cdot \nabla \bar{T}_\beta \\ &\quad + \sum_{p=1}^{N_V} \nabla \cdot \left(\mathbf{d}_{\beta p} * \partial_t (\bar{T}_\beta|_{\mathbf{x}_p} - T_p) \right) \end{aligned} \quad (2.3.23)$$

Par ailleurs, l'introduction de la représentation pour les fluctuations dans l'équation Eq. (2.2.7) conduit à la forme fermée de l'équation de l'évolution de la température pour la particule p :

$$(m c_p)_p \frac{dT_p}{dt} = - \int_{A_p} \mathbf{n}_{\beta\sigma} \cdot \lambda_\beta \nabla \bar{T}_\beta \, dS + \sum_{j=1}^{N_V} h_{pj} * \partial_t (\bar{T}_\beta|_{\mathbf{x}_j} - T_j) - \mathbf{v}_{\beta p} \cdot * \partial_t (\nabla \bar{T}_\beta) + V_p \psi_p \quad (2.3.24)$$

où on a posé :

$$h_{pj} = \int_{A_p} \mathbf{n}_{\beta\sigma} \cdot \lambda_\beta \nabla s_j \delta_{\beta\sigma} \, dS, \quad \mathbf{v}_{\beta p} = \int_{A_p} \mathbf{n}_{\beta\sigma} \cdot \lambda_\beta \nabla \mathbf{b}_\beta \delta_{\beta\sigma} \, dS \quad (2.3.25)$$

Le coefficient h_{pj} et le coefficient effectif $\mathbf{v}_{\beta p}$ désignent, respectivement, le coefficient macroscopique d'échange entre la particule p et la particule j à travers la phase continue, et la vitesse de transport de la température macroscopique \bar{T}_β induite par la présence de la particule p .

Afin de mettre en évidence le couplage macroscopique entre la phase continue et les particules, les coefficients de transport effectif H_p et $\mathbf{v}_{\beta\beta}$ de l'équation macroscopique de transport dans la phase continue Eq. (2.3.23) peuvent être liés aux coefficients effectifs apparaissant dans l'équation de l'évolution de la température de la particule Eq. (2.3.24). Pour cela, nous rappelons ici la définition du coefficient H_p :

$$H_p = \langle \mathbf{n}_{\beta\sigma} \cdot \lambda_\beta \nabla s_p \delta_{\beta\sigma} \rangle \quad (2.3.26)$$

En négligeant les variations de la fonction poids sur la surface des particules (*cf.* 1.2.2), l'équation précédente peut s'écrire sous la forme :

$$H_p = \sum_{j=1}^{N_V} g(\mathbf{x} - \mathbf{x}_p) \int_{A_j} \nabla s_p \cdot \mathbf{n}_{\beta\sigma} \, dS = \sum_{j=1}^{N_V} g(\mathbf{x} - \mathbf{x}_j) h_{jp} \quad (2.3.27)$$

De la même manière, on obtient la relation entre le coefficient $\mathbf{v}_{\beta\beta}$ et $\mathbf{v}_{\beta p}$

$$\mathbf{v}_{\beta\beta} = \langle \mathbf{n}_{\beta\sigma} \cdot \lambda_\beta \nabla \mathbf{b}_\beta \delta_{\beta\sigma} \rangle = \sum_{p=1}^{N_V} g(\mathbf{x} - \mathbf{x}_p) \mathbf{v}_{\beta p} \quad (2.3.28)$$

D'autre part, le terme proportionnel au gradient de la fraction volumique α_β dans l'équation Eq. (2.3.23) peut être lié au premier terme du membre de droite de l'équation d'évolution de la température de la particule, pour cela nous utilisons la relation Eq. (C.0.11) développée dans l'annexe C avec $a_\beta = T_\beta$, on obtient :

$$\nabla \alpha_\beta \cdot \lambda_\beta \nabla \bar{T}_\beta = \langle \lambda_\beta \mathbf{n}_\beta \cdot \nabla \bar{T}_\beta \delta_{\beta\sigma} \rangle \quad (2.3.29)$$

2.3. Fermetures des équations filtrées

En appliquant le développement utilisé pour relier les coefficients effectifs, l'équation précédente peut s'écrire sous la forme :

$$\nabla \alpha_\beta \cdot \lambda_\beta \nabla \bar{T}_\beta = \sum_{p=1}^{N_V} g(\mathbf{x} - \mathbf{x}_p) \int_{A_p} \mathbf{n}_{\beta\sigma} \cdot \lambda_\beta \nabla \bar{T}_\beta dS \quad (2.3.30)$$

A partir des relations Eqs. (2.3.27), (2.3.28) et (2.3.30), la forme fermée des équations Euler-Lagrange peut s'écrire sous la forme :

$$\partial_t \left(\alpha_\beta (\rho c_p)_\beta \bar{T}_\beta \right) + \nabla \cdot \left(\alpha_\beta (\rho c_p)_\beta \bar{T}_\beta \bar{\mathbf{u}}_\beta \right) = \nabla \cdot \left(\mathbf{K}_{\beta\beta} \cdot * \partial_t (\nabla \bar{T}_\beta) \right) \quad (2.3.31)$$

$$\begin{aligned} & - \sum_{p=1}^N g(\mathbf{x} - \mathbf{x}_p) Q_{\beta p} \\ & \sum_{p=1}^{N_V} \nabla \cdot \left(\mathbf{d}_{\beta p} \cdot * \partial_t (\bar{T}_\beta|_{\mathbf{x}_p} - T_p) \right) \\ (m c_p)_p \frac{dT_p}{dt} & = Q_{\beta p} + V_p \psi_p \end{aligned} \quad (2.3.32)$$

où $Q_{\beta p}$ représente le flux thermique macroscopique reçu par la particule p , défini par :

$$Q_{\beta p} = - \int_{A_p} \mathbf{n}_{\beta\sigma} \cdot \lambda_\beta \nabla \bar{T}_\beta dS + \sum_{j=1}^{N_V} h_{pj} \cdot * \partial_t (\bar{T}_\beta|_{\mathbf{x}_j} - T_j) - \mathbf{v}_{\beta p} \cdot * \partial_t (\nabla \bar{T}_\beta) \quad (2.3.33)$$

Le modèle macroscopique Eqs. (2.3.31)-(2.3.33) proposé ici se présente sous une forme similaire à celle des modèles classiques. Autrement-dit, la phase continue est décrite de façon eulérienne à l'aide de la température filtrée, la phase dispersée est décrite de façon lagrangienne en suivant chaque particule dans la phase continue et enfin l'échange entre les deux phases est modélisé à partir des coefficients effectifs. En revanche, si le tenseur de dispersion thermique $\mathbf{K}_{\beta\beta}$ et les coefficients d'échange de chaleur h_{pj} apparaissant dans le modèle proposé sont classiques pour la description eulérienne-lagrangienne macroscopique, les termes tels que la pseudo-vitesse $\mathbf{v}_{\beta p}$ et la pseudo-vitesse couplés $\mathbf{d}_{\beta p}$ n'apparaissent pas dans les modèles classiques [27, 81, 89, 124, 150]. Ces derniers peuvent être déterminés à partir des problèmes de fermeture et de leurs contributions étudiées dans la littérature [39, 103, 106, 151] pour le transfert de chaleur dans les milieux poreux avec des modèles macroscopiques quasi-stationnaires à non équilibre thermique local. Pour la suite, nous nous attendons à ce que les tenseurs de dispersion thermique et les coefficients d'échange thermique soient les contributions dominantes dans les équations macroscopiques par rapport aux termes non-classiques. Cependant, à ce stade de l'étude il n'est pas clair si ces termes supplémentaires sont d'une certaine importance dans les cas pratiques.

Notons, par ailleurs, que les équations d'Euler-Lagrange Eqs. (2.3.31)-(2.3.33) sont obtenues à l'aide d'une représentation instationnaire des fluctuations. Cette approximation du problème mixte micro-macro implique un produit de convolution entre les grandeurs macroscopiques responsables des fluctuations et les variables de fermeture instationnaires. De cette manière, les coefficients de transport effectifs résultant dans le modèle ne dépendent pas seulement des paramètres physiques, mais aussi des variations temporelles. Les effets d'histoire sont, par conséquent, pris en compte implicitement.

2.3.2.2 Décomposition des coefficients effectifs

Il est important de rappeler que le modèle macroscopique avec la fermeture instationnaire doit converger vers la version quasi-stationnaire lorsque les temps macroscopiques sont significativement plus grands que les temps caractéristiques associés à la relaxation de la conduction à l'échelle microscopique [32, 90]. Cette contrainte a été discutée dans la littérature [104] et peut être écrite sous la

forme :

$$\frac{\lambda_\beta t_c}{(\rho c_p)_\beta l_\beta^2} \gg 1 \quad (2.3.34)$$

où t_c représente le temps caractéristique associé au processus étudié. L'hypothèse de quasi-stationnarité consiste à négliger le terme d'accumulation par rapport au terme de diffusion dans l'équation de transport des fluctuations Eq. (2.2.32), de façon à ce que les fluctuations puissent être traitées de manière quasi-stationnaire, et ce, malgré l'instationnarité du problème à l'échelle macroscopique. Dans ce cas, les fluctuations peuvent être représentées sous la forme :

$$T'_\beta = - \sum_{p=1}^{N_V} s_p^\infty (\bar{T}_\beta|_{\mathbf{x}_p} - T_p) + \mathbf{b}_\beta^\infty \cdot \nabla \bar{T}_\beta \quad (2.3.35)$$

Les termes s_p^∞ et \mathbf{b}_β^∞ représentent les variables de fermeture, ces inconnues dépendent uniquement de la variable d'espace \mathbf{x} . A l'instar de la fermeture instationnaire, en introduisant la décomposition des fluctuations donnée par la relation Eq. (2.3.35) dans le problème Eqs. (2.2.32) à (2.2.36), les variables de fermeture sont données par les problèmes de fermeture quasi-stationnaires suivants :

Problème quasi-stationnaire I_p^∞ :

$$(\rho_\beta c_p)_\beta (\mathbf{u}_\beta \cdot \nabla s_p^\infty) = \lambda_\beta \nabla^2 s_p^\infty - \alpha_\beta^{-1} H_p^\infty \quad \text{dans } \Omega_\beta \quad (2.3.36)$$

$$s_p^\infty = 1 \quad \text{sur } A_p \quad (2.3.37)$$

$$s_p^\infty = 0 \quad \text{sur } A_j \text{ avec } j \neq p \quad (2.3.38)$$

$$s_p^\infty(\mathbf{x} + \mathbf{r}) = s_p^\infty(\mathbf{x}) \quad \text{sur } A_{\beta e} \quad (2.3.39)$$

$$\langle \gamma_\beta s_p^\infty \rangle = 0 \quad (2.3.40)$$

avec :

$$H_p^\infty = \langle \mathbf{n}_{\beta\sigma} \cdot \lambda_\beta \nabla s_p^\infty \delta_{\beta\sigma} \rangle \quad (2.3.41)$$

Problème quasi-stationnaire II^∞ :

$$(\rho_\beta c_p)_\beta (\mathbf{u}_\beta \cdot \nabla \mathbf{b}_\beta^\infty + \mathbf{u}'_\beta) = \lambda_\beta \nabla^2 \mathbf{b}_\beta^\infty - \alpha_\beta^{-1} \mathbf{v}_{\beta\beta}^\infty \quad \text{dans } \Omega_\beta \quad (2.3.42)$$

$$\mathbf{b}_\beta^\infty = 0 \quad \text{sur } A_p, \quad 1 \leq p \leq N \quad (2.3.43)$$

$$\mathbf{b}_\beta^\infty(\mathbf{x} + \mathbf{r}_i) = \mathbf{b}_\beta^\infty(\mathbf{x}) \quad \text{sur } A_{\beta e} \quad (2.3.44)$$

$$\langle \gamma_\beta \mathbf{b}_\beta^\infty \rangle = 0 \quad (2.3.45)$$

avec

$$\mathbf{v}_{\beta\beta}^\infty = \langle \mathbf{n}_{\beta\sigma} \cdot \lambda_\beta \nabla \mathbf{b}_\beta^\infty \delta_{\beta\sigma} \rangle \quad (2.3.46)$$

Comme nous l'avons déjà signalé, l'approximation instationnaire du problème mixte micro-macro donnée par la relation Eq.(2.3.1) doit converger vers l'approximation quasi-stationnaire Eq.(2.3.35). Ce comportement asymptotique correspond au passage de s_p et \mathbf{b}_β respectivement aux limites $u(t)s_p^\infty$ et $u(t)\mathbf{b}_\beta^\infty$ dans le produit de convolution défini par l'équation Eq (2.3.2), où $u(t)$ est la fonction d'échelon unitaire. Cette décomposition peut s'écrire sous la forme [32] :

$$s_p - u(t)s_p^\infty = s_p^* \quad (2.3.47)$$

$$\mathbf{b}_\beta - u(t)\mathbf{b}_\beta^\infty = \mathbf{b}_\beta^* \quad (2.3.48)$$

où s_p^* et \mathbf{b}_β^* correspondent aux contributions des effets d'histoire dans les fermeture instationnaires, ces variables vérifient :

$$\lim_{t \rightarrow +\infty} s_p^* = 0 \quad \text{et} \quad \lim_{t \rightarrow +\infty} \mathbf{b}_\beta^* = 0 \quad (2.3.49)$$

2.3. Fermetures des équations filtrées

En introduisant les décompositions Eq. (2.3.47) (*resp.* Eq. (2.3.48)) dans le problème de fermeture instationnaire I_p (*resp.* II), et en soustrayant le problème de fermetures quasi-stationnaires I_p^∞ (*resp.* II^∞) multiplié par $u(t)$, on obtient ainsi les problèmes de fermeture liés aux effets d'histoire :

Problème lié aux effets d'histoire I_p^* :

$$(\rho_\beta c_p)_\beta (\partial_t s_p^* + \mathbf{u}_\beta \cdot \nabla s_p^* + \delta(t) s_p^\infty) = \lambda_\beta \nabla^2 s_p^* - \alpha_\beta^{-1} H_p^* \quad \text{dans } \Omega_\beta \quad (2.3.50)$$

$$s_p^* = 1 - u(t) \quad \text{sur } A_p \quad (2.3.51)$$

$$s_p^* = 0 \quad \text{sur } A_j \quad \text{avec } j \neq p \quad (2.3.52)$$

$$s_p^*(\mathbf{x} + \mathbf{r}_i) = s_p^*(\mathbf{x}) \quad \text{sur } A_{\beta e} \quad (2.3.53)$$

$$\langle \gamma_\beta s_p^* \rangle = 0 \quad (2.3.54)$$

avec :

$$H_p^* = \langle \mathbf{n}_{\beta\sigma} \cdot \lambda_\beta \nabla s_p^* \delta_{\beta\sigma} \rangle \quad (2.3.55)$$

Problème lié aux effets d'histoire II^* :

$$(\rho_\beta c_p)_\beta (\partial_t \mathbf{b}_\beta^* + \mathbf{u}_\beta \cdot \nabla \mathbf{b}_\beta^* + \delta(t) s_p^\infty + (1 - u(t)) \mathbf{u}'_\beta) = \lambda_\beta \nabla^2 \mathbf{b}_\beta^* - \alpha_\beta^{-1} \mathbf{v}_{\beta\beta}^* \quad \text{dans } \Omega_\beta \quad (2.3.56)$$

$$\mathbf{b}_\beta^* = 0 \quad \text{sur } A_p, \quad 1 \leq p \leq N \quad (2.3.57)$$

$$\mathbf{b}_\beta^*(\mathbf{x} + \mathbf{r}_i) = \mathbf{b}_\beta^*(\mathbf{x}) \quad \text{sur } A_{\beta e} \quad (2.3.58)$$

$$\langle \gamma_\beta \mathbf{b}_\beta^* \rangle = 0 \quad (2.3.59)$$

$$\mathbf{b}_\beta^* = 0 \quad \text{à } t = 0 \quad (2.3.60)$$

avec :

$$\mathbf{v}_{\beta\beta}^* = \langle \mathbf{n}_{\beta\sigma} \cdot \lambda_\beta \nabla \mathbf{b}_\beta^* \delta_{\beta\sigma} \rangle \quad (2.3.61)$$

L'introduction de la décomposition Eq. (2.3.47) dans l'expression du coefficient h_{pj} Eq. (2.3.25), conduit à :

$$h_{pj} = u(t) h_{pj}^\infty + h_{pj}^* \quad (2.3.62)$$

où h_{pj}^∞ et h_{pj}^* représentent respectivement le coefficient d'échange quasi-stationnaire et le coefficient d'échange lié aux effets d'histoire, définis par :

$$h_{pj}^\infty = \int_{A_p} \mathbf{n}_{\beta\sigma} \cdot \lambda_\beta \nabla s_p^\infty \delta_{\beta\sigma} dS \quad \text{et} \quad h_{pj}^* = \int_{A_p} \mathbf{n}_{\beta\sigma} \cdot \lambda_\beta \nabla s_p^* \delta_{\beta\sigma} dS \quad (2.3.63)$$

L'introduction de la décomposition Eq. (2.3.62) dans le terme des échanges thermiques entre la phase continue et la particule p , conduit à :

$$\begin{aligned} h_{pj} * \partial_t (\bar{T}_\beta|_{\mathbf{x}_p} - T_p) &= h_{pj}^\infty (u(t) * \partial_t (\bar{T}_\beta|_{\mathbf{x}_p} - T_p)) + h_{pj}^* * \partial_t (\bar{T}_\beta|_{\mathbf{x}_p} - T_p) \\ &= h_{pj}^\infty (\partial_t u(t) * (\bar{T}_\beta|_{\mathbf{x}_p} - T_p)) + h_{pj}^* * \partial_t (\bar{T}_\beta|_{\mathbf{x}_p} - T_p) \\ &= h_{pj}^\infty (\delta(t) * (\bar{T}_\beta|_{\mathbf{x}_p} - T_p)) + h_{pj}^* * \partial_t (\bar{T}_\beta|_{\mathbf{x}_p} - T_p) \\ &= h_{pj}^\infty (\bar{T}_\beta|_{\mathbf{x}_p} - T_p) + h_{pj}^* * \partial_t (\bar{T}_\beta|_{\mathbf{x}_p} - T_p) \end{aligned} \quad (2.3.64)$$

où $\delta(t)$ représente la distribution de Dirac. Les deux termes du membre de droite de l'équation précédente représentent respectivement la contribution quasi-stationnaire et la contribution liée aux effets d'histoire des échanges thermiques entre la phase continue et la particule p .

De la même manière, le terme de conduction thermique dans la phase continue Eq. (2.3.31) peut être décomposé sous la forme :

$$\nabla \cdot (\mathbf{K}_{\beta\beta} * \partial_t (\nabla \bar{T}_\beta)) = \nabla \cdot (\mathbf{K}_{\beta\beta}^\infty \cdot \nabla \bar{T}_\beta) + \nabla \cdot (\mathbf{K}_{\beta\beta}^* \cdot * \partial_t (\nabla \bar{T}_\beta)) \quad (2.3.65)$$

où $\mathbf{K}_{\beta\beta}^\infty$ et $\mathbf{K}_{\beta\beta}^*$ désignent respectivement le tenseur quasi-stationnaire de conduction thermique et le tenseur lié aux effets d'histoire. Ils sont définis par :

$$\mathbf{K}_{\beta\beta}^\infty = \alpha_\beta \lambda_\beta \mathbf{I} + \langle \lambda_\beta \mathbf{n}_{\beta\sigma} \cdot \mathbf{b}_\beta^\infty \delta_{\beta\sigma} \rangle - (\rho c_p)_\beta \langle \mathbf{u}'_\beta \mathbf{b}_\beta^\infty \rangle \quad (2.3.66)$$

$$\mathbf{K}_{\beta\beta}^* = \langle \lambda_\beta \mathbf{n}_{\beta\sigma} \cdot \mathbf{b}_\beta^* \delta_{\beta\sigma} \rangle - (\rho c_p)_\beta \langle \mathbf{u}'_\beta \mathbf{b}_\beta^* \rangle \quad (2.3.67)$$

Les décompositions représentées dans Eqs. (2.3.64) et (2.3.65) permettent de réécrire les équations macroscopiques sous la forme :

$$\begin{aligned} \partial_t \left(\alpha_\beta (\rho_\beta c_p)_\beta \bar{T}_\beta \right) + \nabla \cdot \left(\alpha_\beta (\rho_\beta c_p)_\beta \bar{T}_\beta \bar{\mathbf{u}}_\beta \right) &= \nabla \cdot (\mathbf{K}_{\beta\beta}^\infty \cdot \partial_t (\nabla \bar{T}_\beta)) \\ &+ \nabla \cdot (\mathbf{K}_{\beta\beta}^* \cdot * \partial_t (\nabla \bar{T}_\beta)) \\ &+ \sum_{p=1}^{N_\nu} \nabla \cdot (\mathbf{d}_{\beta p} * \partial_t (\bar{T}_\beta|_{\mathbf{x}_p} - T_p)) \\ &- \sum_{p=1}^{N_\nu} g(\mathbf{x} - \mathbf{x}_p) Q_{\beta p} \\ (m c_p)_p \frac{dT_p}{dt} &= Q_{\beta p} + V_p \psi_p \end{aligned} \quad (2.3.68)$$

avec $Q_{\beta p}$ défini par :

$$\begin{aligned} Q_{\beta p} &= - \int_{A_p} \mathbf{n}_{\beta\sigma} \cdot \lambda_\beta \nabla \bar{T}_\beta \, dS + \sum_{j=1}^{N_\nu} h_{pj}^\infty (\bar{T}_\beta|_{\mathbf{x}_j} - T_j) \\ &+ \sum_{j=1}^{N_\nu} h_{pj}^* * \partial_t (\bar{T}_\beta|_{\mathbf{x}_j} - T_j) - \mathbf{v}_{\beta p} \cdot * \nabla \bar{T}_\beta \end{aligned} \quad (2.3.70)$$

Les coefficients non-classiques peuvent être décomposés de la même manière que $\mathbf{K}_{\beta\beta}$ et h_{pj} . Toutefois, nous avons choisi de garder ces coefficients sous la forme instationnaire pour des raisons de simplification. Les termes qui apparaissent dans le membre de droite de l'équation Eq. (2.3.68) correspondent respectivement à la conduction thermique dans la phase continue, aux effets d'histoire associés à la conduction thermique, à la contribution des déséquilibres thermiques macroscopique relatifs à la température des particules et aux échanges thermiques macroscopiques avec les particules.

Dans l'équation Eq. (2.3.70), le premier terme du membre de droite correspond au flux thermique moyen vu par la particule. Le second terme représente le transfert thermique par conduction instationnaire entre la phase continue et la particule. Enfin, le troisième terme correspond à la diffusion thermique instationnaire. Cette contribution tient compte de l'effet d'histoire des variations des températures de la phase- β et des particules dans les variations de la température T_p . Le dernier terme représente le transfert thermique dû au transport convectif additionnel dans la phase continue.

La forme fermée du modèle Euler-Lagrange macroscopique fait intervenir des termes qualifiés de non classiques, ils traduisent une description plus précise du couplage entre la phase continue et la phase dispersée. De ce fait, ce modèle apparaît comme une généralisation des modèles Euler-Lagrange classiques. En contrepartie, il possède un nombre plus élevé de coefficients effectifs pouvant être calculés à partir des problèmes de fermeture. En pratique, ces termes supplémentaires rendent l'implémentation du modèle dans un code de calcul de vitesse de flamme très complexe. Nous nous appuyerons, dans ce qui suit, sur la littérature et les analyses d'ordre de grandeur pour montrer que certains termes du modèle complet peuvent être négligés dans le cas d'un mélange dilué de gaz-particules pour un rapport des conductivités thermiques $\lambda_\beta/\lambda_\sigma$ tendant vers zéro.

2.3. Fermetures des équations filtrées

2.3.2.3 Simplification du modèle macroscopique

En vue de simplifier le modèle macroscopique, nous nous appuyerons sur les travaux de Quintard *et al.* [102, 106] et sur l'analyse d'ordre de grandeur des termes quasi-stationnaires pour montrer qu'il est raisonnable de négliger les termes non-classiques ainsi que les effets de la tortuosité et de la dispersion dans le tenseur de conductivité thermique dans le modèle macroscopique. Les mêmes conclusions peuvent être déduites en ce qui concerne les termes liés aux effets d'histoire.

Transport convectif additionnel Pour des problèmes purement diffusifs, on peut montrer, à partir du problème de fermeture II^∞ , que le vecteur $\mathbf{v}_{\beta\beta}^\infty$ est nul pour des cellules symétriques [14, 38]. Dans ce contexte, Quintard et Whitaker [106] ont résolu numériquement les problèmes de fermeture associés au modèle à deux équations pour des cellules unitaires $2D$ et $3D$, les résultats présentés dans cette étude montrent que le vecteur $\mathbf{v}_{\beta\beta}^\infty$ est quasiment nul pour un nombre de Péclet ($Pe = \frac{(\rho c_p)_\beta \|\bar{\mathbf{u}}_\beta\|}{\lambda_\beta} l_\beta$) inférieur à 10. On peut donc estimer que le terme $\mathbf{v}_{\beta\beta}^\infty \cdot \nabla \bar{T}_\beta$ est négligeable devant le terme d'échange aux interfaces pour des écoulements à faible nombre de Péclet.

D'autre part, dans le cadre d'un système à deux températures, Quintard *et al.* [102] ont comparé le terme $\mathbf{v}_{\beta\beta}^\infty$ au terme convectif classique $\nabla \cdot (\alpha_\beta (\rho c_p)_\beta \bar{T}_\beta \bar{\mathbf{u}}_\beta)$, leurs résultats suggèrent que le rapport entre le terme convectif non classique et le terme convectif classique peut être important pour des valeurs faibles ou intermédiaires du nombre de Péclet et que ce rapport tend vers une valeur nulle lorsque le nombre de Péclet tend vers l'infini.

Ainsi, le terme convectif non classique peut être négligé devant le terme d'échange dans le régime diffusif et devant le terme convectif classique dans le régime fortement convectif.

Déséquilibre thermique macroscopique On rappelle que le terme de déséquilibre thermique s'écrit sous la forme :

$$\sum_{p=1}^{N_\nu} \nabla \cdot (\mathbf{d}_{\beta p}^\infty (\bar{T}_\beta|_{\mathbf{x}_p} - T_p)) \quad \text{avec} \quad \mathbf{d}_{\beta p}^\infty = \rho_\beta C_{p,\beta} \langle s_p^\infty \mathbf{u}'_\beta \rangle - \langle \lambda_\beta s_p^\infty \mathbf{n}_{\beta\sigma} \delta_{\beta\sigma} \rangle \quad (2.3.71)$$

A partir de la représentation de fluctuations Eq. (2.3.35) et approximations Eqs. (2.2.21) à (2.2.23), on obtient les approximations suivantes [104] :

$$\mathbf{b}_\beta^\infty = O(l_\beta) \quad (2.3.72)$$

$$s_p^\infty (\bar{T}_\beta|_{\mathbf{x}_p} - T_p) = O\left(\frac{l_\beta}{L_\beta} \bar{T}_\beta\right) \quad (2.3.73)$$

Suite à ces approximations, on obtient les relations suivantes :

$$\nabla \cdot (\langle \lambda_\beta s_p^\infty \mathbf{n}_{\beta\sigma} \delta_{\beta\sigma} \rangle (\bar{T}_\beta|_{\mathbf{x}_p} - T_p)) = O\left(\lambda_\beta \alpha_\beta \frac{1}{L_\beta^2} \bar{T}_\beta\right) \quad (2.3.74)$$

$$\nabla \cdot (\langle (\rho c_p)_\beta \langle a_{\beta p}^\infty \mathbf{u}'_\beta \rangle \rangle (\bar{T}_\beta|_{\mathbf{x}_p} - T_p)) = O\left(\lambda_\beta \alpha_\beta Pe \frac{1}{L_\beta^2} \bar{T}_\beta\right) \quad (2.3.75)$$

$$g(\mathbf{x} - \mathbf{x}_p) h_{pj}^\infty (\bar{T}_\beta|_{\mathbf{x}_p} - T_p) = O\left(\lambda_\beta \alpha_\beta \frac{1}{l_\beta L_\beta} \bar{T}_\beta\right) \quad (2.3.76)$$

$$\nabla \cdot (\alpha_\beta (\rho c_p)_\beta \bar{T}_\beta \bar{\mathbf{u}}_\beta) = O\left(\lambda_\beta \alpha_\beta Pe \frac{1}{l_\beta L_\beta} \bar{T}_\beta\right) \quad (2.3.77)$$

Sur la base de ces relations et de la contrainte de changement d'échelle ($l_\beta \ll L_\beta$), il est clair qu'on peut faire les estimations suivantes :

- Dans le régime diffusif ($Pe < 1$) : (2.3.75) < (2.3.74) << (2.3.76)

— Dans le régime convectif ($Pe > 1$) : (2.3.74) < (2.3.75) ≪ (2.3.77)

Ainsi, le terme de transport des équilibres thermiques macroscopiques sera négligé devant le terme d'échange aux interfaces Eq. (2.3.76) pour les régimes où la diffusion est dominante, et devant le terme convectif classique Eq. (2.3.77) pour les régimes convectifs.

Tenseur de conductivité thermique On rappelle que le tenseur de conductivité thermique est défini par :

$$\mathbf{K}_{\beta\beta} = \underbrace{\alpha_\beta \lambda_\beta \mathbf{I}}_{\text{diffusion}} + \underbrace{\langle \lambda_\beta \mathbf{n}_{\beta\sigma} \cdot \mathbf{b}_\beta^\infty \delta_{\beta\sigma} \rangle}_{\text{tortuosité}} - \underbrace{(\rho c_p)_\beta \langle \mathbf{u}'_\beta \mathbf{b}_\beta^\infty \rangle}_{\text{dispersion}} \quad (2.3.78)$$

De la même manière, à partir des approximations Eqs. (2.2.21) à (2.2.23), on obtient les ordres de grandeur des termes liés aux effets de la tortuosité et la dispersion hydrodynamique dans le tenseur de conductivité thermique Eq. (2.3.78)

$$\nabla \cdot (\langle \lambda_\beta \mathbf{n}_{\beta\sigma} \cdot \mathbf{b}_\beta^\infty \delta_{\beta\sigma} \rangle \cdot \nabla \bar{T}_\beta) = O\left(\lambda_\beta \alpha_\beta \frac{1}{L_\beta^2} \bar{T}_\beta\right) \quad (2.3.79)$$

$$\nabla \cdot ((\rho c_p)_\beta \langle \mathbf{u}'_\beta \mathbf{b}_\beta^\infty \rangle \cdot \nabla \bar{T}_\beta) = O\left(\alpha_\beta \lambda_\beta Pe \frac{1}{L_\beta^2} \bar{T}_\beta\right) \quad (2.3.80)$$

On peut estimer, d'une part, que le terme Eq. (2.3.79) est négligeable devant le terme d'échange interfacial Eq. (2.3.76) et d'autre part, que le terme Eq. (2.3.80) est négligeable devant le terme d'échange interfacial Eq. (2.3.76) pour $Pe < 1$ et devant le terme convectif Eq. (2.3.77) pour $Pe > 1$.

Ainsi, le tenseur $\mathbf{K}_{\beta\beta}^\infty$ se simplifie sous la forme suivante :

$$\mathbf{K}_{\beta\beta}^\infty = \alpha_\beta \lambda_\beta \mathbf{I} \quad (2.3.81)$$

Cette approximation est soutenue par le fait que la conductivité thermique de la phase continue est considérée négligeable devant la conductivité thermique des particules $\lambda_\beta \ll \lambda_\sigma$.

En effet, les résultats obtenus par Quintard *et al.* [102] pour un modèle à deux températures établi pour des milieux poreux montrent qu'il est raisonnable de négliger les effets de la tortuosité et de la dispersion dans le tenseur de conductivité thermique pour mélange où le rapport des conductivités thermiques tend vers zéro.

Si on adopte la simplification présentée précédemment, les équations Euler-Lagrange peuvent s'écrire sous une forme similaire à celle du modèle classique :

$$\partial_t \left(\alpha_\beta (\rho_\beta c_p)_\beta \bar{T}_\beta \right) + \nabla \cdot \left(\alpha_\beta (\rho_\beta c_p)_\beta \bar{T}_\beta \bar{\mathbf{u}}_\beta \right) = \nabla \cdot \left(\alpha_\beta \lambda_\beta \nabla \bar{T}_\beta \right) - \sum_{p=1}^{N_\nu} g(\mathbf{x} - \mathbf{x}_p) Q_{\beta p} \quad (2.3.82)$$

$$(m c_p)_p \frac{dT_p}{dt} = Q_{\beta p} + V_p \psi_p \quad (2.3.83)$$

avec $Q_{\beta p}$ défini par :

$$Q_{\beta p} = - \int_{A_p} \mathbf{n}_{\beta\sigma} \cdot \lambda_\beta \nabla \bar{T}_\beta dS + \sum_{j=1}^{N_\nu} h_{pj}^\infty (\bar{T}_\beta|_{\mathbf{x}_j} - T_j) + \sum_{j=1}^{N_\nu} h_{pj}^* \partial_t (\bar{T}_\beta|_{\mathbf{x}_j} - T_j) \quad (2.3.84)$$

2.3. Fermetures des équations filtrées

En comparant le modèle classique d'Euler-Lagrange avec le modèle proposé (2.3.82) à (2.3.84), les principales différences demeurent dans l'échange thermique macroscopique $Q_{\beta p}$. En effet, comme mentionné dans l'introduction, la modélisation de l'échange macroscopique entre la phase continue et les particules est généralement basée sur la résolution du problème de couche limite d'une particule isolée dans un milieu infini [27, 81, 89, 150].

Cette démarche consiste à définir en tout point un champ de température de la phase continue localement non-perturbée par la présence de la particule $T_\beta^{(0)}$ et un autre champ perturbé $T_\beta^{(1)}$ par la seule présence de la particule p . Ensuite, dans la description macro-échelle eulérienne-lagrangienne, la taille du filtre spatial est choisie suffisamment grande pour que les perturbations induites par une particule ne modifient pas significativement le champ thermique dans son voisinage. Dans ce cas, le champ de température non-perturbé par la présence de la particule $T_\beta^{(0)}$ est assimilé à un champ de température moyenne \bar{T}_β . Ainsi, dans la description classique, la perturbation générée par la présence d'autres particules n'est pas prise en compte dans l'échange thermique $Q_{\beta p}$.

Dans ce travail, la démarche proposée pour établir les équations d'Euler-Lagrange macroscopiques est basée sur la décomposition de la température de la phase continue, directement en une température moyennée \bar{T}_β et des fluctuations. Ensuite, les fluctuations sont exprimées en fonction de tous les termes source macroscopiques identifiés dans son problème local, et ce, en tenant compte de toutes les particules présentes dans le volume de prise de moyenne sur l'apparition des fluctuations. Par conséquent, des effets liés à la présence des autres particules sont pris en compte dans la modélisation des échanges thermiques entre la phase continue et la particule.

Même s'il est encore prématuré pour réaliser une comparaison complète entre l'approche proposée dans ce travail et l'approche classique, le modèle proposé ici apparaît cependant plus riche dans le sens où il tient compte des effets de la présence des autres particules dans la modélisation de $Q_{\beta p}$. Par ailleurs, dans le cas où les effets des autres particules sont négligeables, l'échange thermique macroscopique $Q_{\beta p}$ peut s'écrire sous une forme similaire à l'approche classique :

$$Q_{\beta p} = - \int_{A_p} \mathbf{n}_{\beta\sigma} \cdot \lambda_\beta \nabla \bar{T}_\beta \, dS + h_p^\infty (\bar{T}_\beta|_{\mathbf{x}_p} - T_p) + h_p^* * \partial_t (\bar{T}_\beta|_{\mathbf{x}_p} - T_p) \quad (2.3.85)$$

De plus, un lien entre les deux approches peut être réalisé en estimant les coefficients d'échange thermique h_p^∞ et h_p^* à partir de la résolution du problème de fermeture pour une cellule unitaire avec une seule particule.

Il est important de rappeler, que le modèle classique a été introduit, dans la littérature, avec les coefficients effectifs comme des coefficients d'échange thermique et les noyaux apparaissant dans le terme échange thermique instationnaire. Il est possible de déterminer ces coefficients expérimentalement, cependant, cette approche peut s'avérer très coûteuse, complexe voire impossible à implémenter dans certains cas de figure. Par conséquent, les coefficients effectifs sont souvent extrapolés des corrélations existantes établies dans le cas d'une sphère isolée dans un fluide infini. Dans le modèle proposé, les coefficients effectifs sont déterminés de manière purement théorique à partir des problèmes de fermeture. Cette théorie généralisée peut être utilisée indépendamment de la nature des particules et de leurs représentation géométrique.

Comme nous l'avons signalé, le modèle proposé ainsi que le modèle classique montrent un comportement transitoire à travers les termes d'échange instationnaire, ainsi ces modèles intègrent des informations liées aux effets d'histoire. Il est évidemment très coûteux d'utiliser de tels modèles et pour éviter un traitement aussi complexe, les effets d'histoire sont généralement négligés dans les modèles classiques devant la diffusion quasi-stationnaire si la taille des particules est beaucoup plus petite que la dimension caractéristique de l'écoulement [81]. On note que, sans faire d'hypothèses supplémentaires, le modèle proposé avec les fermetures instationnaires dégènerait naturellement vers les modèles quasi-stationnaires.

2.4 Comparaison théorique avec l'approche classique

Nous nous intéressons, dans cette étude, à la résolution analytique des problèmes de fermeture pour une particule sphérique. Cela permet de déterminer les coefficients d'échange h_p et h_p^* et de les comparer avec ceux utilisés dans l'approche classique.

Pour cela, nous considérons, ici, une particule sphérique immobile dans une cellule unitaire représentative d'un milieu ayant une structure géométrique sphérique comme illustrée sur la figure (2.2). Cette cellule correspond à la version sphérique de la cellule de Chang [19]. La simplicité géométrique de cette cellule offre la possibilité de résoudre analytiquement les problèmes de fermeture et d'obtenir ainsi les coefficients de transport du modèle de manière analytique.

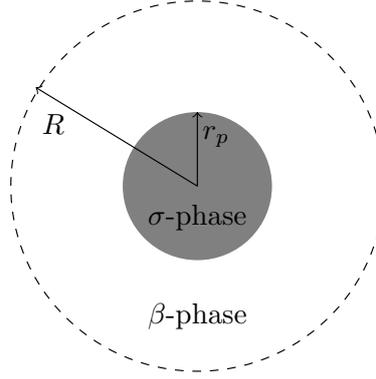


FIGURE 2.2 – Cellule unitaire de Chang

La longueur caractéristique R de la cellule de Chang s'écrit en fonction de la fraction volumique de la phase continue et du rayon de la particule r_p :

$$R = \frac{r_p}{(1 - \alpha_\beta)^{1/3}} \quad (2.4.1)$$

Le problème étant supposé purement diffusif, les vitesses ne jouent aucun rôle dans les problèmes de fermeture, le problème de fermeture quasi-stationnaire associé au variable de fermeture s_p s'écrit, en coordonnées sphériques, sous la forme :

Problème I pour s_p^∞ :

$$\lambda_\beta \frac{1}{r^2} \frac{d}{dr} \left(r^2 \frac{ds_p^\infty}{dr} \right) - \frac{1}{\alpha_\beta \mathcal{V}} h_p^\infty = 0 \quad \text{pour } r_p \leq r \leq R \quad (2.4.2)$$

$$s_p^\infty = 1 \quad \text{en } r = r_p \quad (2.4.3)$$

$$\frac{ds_p^\infty}{dr} = 0 \quad \text{en } r = R \quad (2.4.4)$$

$$\int_{r_p}^R 4\pi r^2 s_p^\infty dr = 0 \quad (2.4.5)$$

où :

$$h_p^\infty = \int_{A_p} \mathbf{n}_{\beta\sigma} \cdot \lambda_\beta \nabla s_p^\infty dS \quad (2.4.6)$$

où, nous avons utilisé la fonction de poids classique définie par Eq. (1.2.58). D'autre part, étant donné la symétrie radiale de la cellule de Chang, la condition de périodicité aux frontières de la cellule a été

2.4. Comparaison théorique avec l'approche classique

remplacée par la condition aux limites de Neumann Eq. (2.4.4). L'équation de transport de l'inconnue de fermeture Eq. (2.4.2), fait intervenir le coefficient d'échange comme terme source volumique. Ce coefficient est défini par une intégrale surfacique de la solution du problème Eq. (2.4.6). Ainsi, le problème de fermeture se présente sous la forme d'un système d'équations intégro-différentiel.

Une démarche a été proposée pour résoudre le système analytiquement [104] : le coefficient d'échange est supposé connu dans un premier temps et le problème donné par les équations Eqs (2.4.2) à (2.4.4) est résolu. On obtient donc l'inconnu de fermeture s_p^∞ en fonction du coefficient d'échange. Dans un second temps, la condition de moyenne nulle Eq. (2.4.5) est utilisée pour déterminer le coefficient d'échange.

En suivant cette méthodologie, le coefficient d'échange h_p^∞ s'écrit :

$$h_p^\infty = \frac{10\pi\alpha_\beta^2\lambda_\beta d_p}{9\left(1 - (1 - \alpha_\beta)^{\frac{1}{3}}\right) - \alpha_\beta(3 + \alpha_\beta)} \quad (2.4.7)$$

Pour un milieu très dilué (*i.e.* $\alpha_\beta \rightarrow 1$), on obtient :

$$\lim_{\alpha_\beta \rightarrow 1} h_p^\infty = 2\pi\lambda_\beta d_p \quad (2.4.8)$$

Cette valeur est classiquement utilisée pour modéliser le coefficient d'échange thermique entre la phase continue au repos et une particule sphérique[89, 26]. Le coefficient d'échange adimensionnalisé par sa valeur limite en milieu très dilué est présenté sur la figure (2.3) en fonction de la fraction volumique de la phase solide.

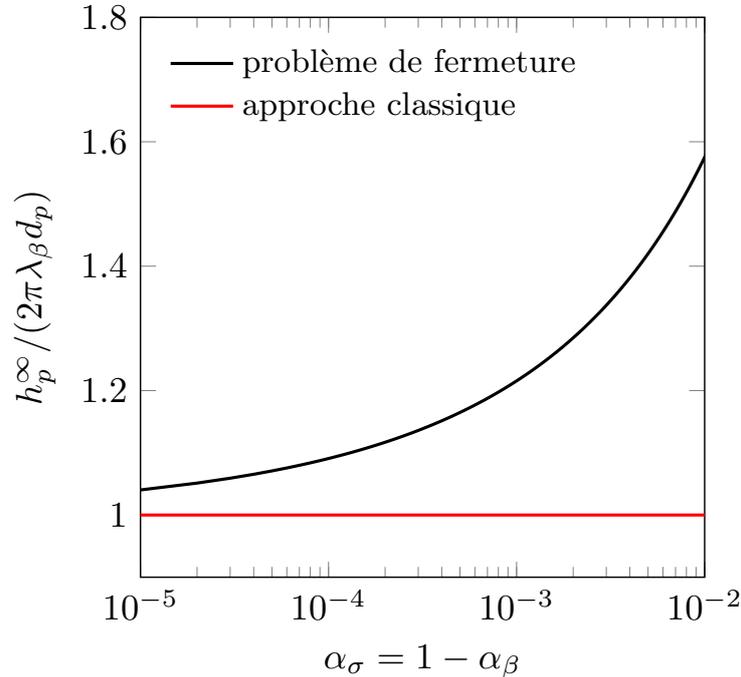


FIGURE 2.3 – Coefficient d'échange adimensionnalisé

On peut remarquer que le coefficient proposé dans le modèle classique ne prend pas en compte l'effet de la dilution, ce qui peut entraîner une sous-estimation de coefficient d'échange.

D'autre part, la démarche suivie pour résoudre analytiquement le problème de fermeture lié aux effets d'histoire peut se résumer en trois étapes :

- (i) - La première étape consiste à écrire le problème de fermeture dans le domaine de Laplace en utilisant la condition initiale $s_p^*(t = 0) = 0$:

$$(\rho_\beta c_p)_\beta (\xi \{s_p^*\} + s_p^\infty) = \lambda_\beta \frac{1}{r^2} \frac{d}{dr} \left(r^2 \frac{d\{s_p^*\}}{dr} \right) - \frac{1}{\mathcal{V}\alpha_\beta} \{h_p^*\} \text{ pour } r_p \leq r \leq R \quad (2.4.9)$$

$$\{s_p^*\} = 0 \quad \text{en } r = r_p \quad (2.4.10)$$

$$\frac{d\{s_p^*\}}{dr} = 0 \quad \text{en } r = R \quad (2.4.11)$$

$$\int_{r_p}^R 4\pi r^2 \{s_p^*\} dr = 0 \quad (2.4.12)$$

où :

$$\{h_p^*\} = \lambda_\beta \int_{s_p} \nabla \{s_p^*\} \cdot \mathbf{n}_{\beta\sigma} dS \quad (2.4.13)$$

où ξ est la variable de Laplace, $\{s_p^*\}$ et $\{h_p^*\}$ représentent respectivement la transformation de Laplace de s_p^* et de h_p^* .

- (ii) - La deuxième étape est consacrée à la résolution du problème de fermeture dans le domaine de Laplace avec une méthodologie similaire à celle utilisée pour la résolution du problème de fermeture quasi-stationnaire. En supposant dans un premier temps que $\{h_p^*\}$ est connu, on obtient alors l'inconnue de fermeture en fonction de $\{h_p^*\}$. Dans un deuxième temps, l'utilisation de la relation entre $\{s_p^*\}$ et $\{h_p^*\}$ donnée par l'équation (2.4.13) permet de déterminer le coefficient d'échange et l'inconnue de fermeture dans l'espace de Laplace. En raison de la complexité de la fonction $\{h_p^*\}$, l'expression analytique ne peut pas être donnée dans le domaine temps, par conséquent nous nous limiterons ici au milieu très dilué et nous appliquerons la contrainte $\alpha_\beta \rightarrow 1$ directement dans l'expression de $\{h_p^*\}$.

- (iii) - La troisième étape consiste à appliquer la transformée de Laplace inverse au coefficient d'échange et à l'inconnue de fermeture.

En suivant cette démarche, le coefficient d'échange lié aux effets d'histoire pour un milieu très dilué s'écrit :

$$h_p^* = \frac{\pi \lambda_\beta d_p^2}{\sqrt{\frac{\lambda_\beta}{(\rho c_p)_\beta} \pi t}} \quad (2.4.14)$$

Les équations Eqs. (2.5.3), (2.4.8) et (2.4.14) conduisent à la forme classique du flux de chaleur $Q_{\beta p}$:

$$Q_{\beta p} = - \int_{A_p} \mathbf{n}_{\beta\sigma} \cdot \lambda_\beta \nabla \bar{T}_\beta dS + 2\pi \lambda_\beta d_p (\bar{T}_\beta - T_p) + \pi \lambda_\beta d_p^2 \int_0^t \frac{d(\bar{T}_\beta|_{\mathbf{x}_p} - T_p)}{d\tau} \frac{1}{\left(\frac{\lambda_\beta}{(\rho_\beta c_p)_\beta} \pi (t - \tau) \right)^{1/2}} d\tau \quad (2.4.15)$$

On peut conclure que l'approche proposée ici converge vers l'approche classique dans le cas limite d'une particule isolée dans un milieu infini. Toutefois, il faut noter que la température moyenne et la température non perturbée n'ont pas la même signification dans le cas générale. En effet, si on considère une particule en oxydation au milieu d'autres particules inertes, la température non perturbée par cette particule est constante alors que la température moyenne à la position de la particule augmente.

2.5 Résultats et discussion

L'objectif de cette section est d'évaluer la validité de la description macroscopique proposée et de la comparer au modèle classique sur des configurations simplifiées du nuage de particules. Ces configurations permettent d'obtenir des solutions de référence en résolvant numériquement le problème du transfert de chaleur à l'échelle micro et en moyennant ensuite les résultats pour obtenir les champs des températures à l'échelle macroscopique. Cette approche nous permet de confronter le modèle au test le plus direct de la théorie puisque les équations microscopiques Eqs. (2.1.1) à (2.1.2) sont résolues directement.

Nous nous intéresserons ici à l'échange de chaleur macroscopique, le système illustré à la figure (2.1) est supposé infini dans toutes les directions, ainsi il n'y a pas de gradient de température macroscopique. De plus, comme nous l'avons mentionné dans l'introduction, nous nous intéressons à un écoulement diphasique dispersé dilué en régime laminaire avec une taille de particule ne dépassant pas 100 μm . Par conséquent, on supposera que la vitesse de la phase continue est uniforme et que les particules ont la même vitesse que la phase continue.

Avec la condition de non-glissement entre les deux phases, les particules peuvent être considérées immobiles dans le repère en mouvement et le terme convectif dans l'équation (2.3.82) peut être éliminé.

Si nous adoptons ces simplifications, le problème macroscopique est 0D et les équations d'Euler-Lagrange peuvent être écrites dans le repère en mouvement.

$$\alpha_\beta (\rho_\beta c_p)_\beta \frac{d\bar{T}_\beta}{dt} = -\frac{1}{V} \sum_{p=1}^{N_V} Q_{\beta p} \quad (2.5.1)$$

$$(m c_p)_p \frac{dT_p}{dt} = Q_{\beta p} + V_p \psi_p \quad (2.5.2)$$

avec

$$Q_{\beta p} = \sum_{j=1}^{N_V} h_{pj}^\infty (\bar{T}_\beta|_{\mathbf{x}_j} - T_j) + \sum_{j=1}^{N_V} h_{pj}^* * \partial_t (\bar{T}_\beta - T_j) \quad (2.5.3)$$

Comme indiqué précédemment, la validité du modèle proposé dans les deux applications sera abordée par des expériences numériques utilisant des calculs directs à la micro-échelle comme solutions de référence. Dans la suite de cette section, ces simulations micro-échelle sont appelées simulations numériques directes (DNS).

Nous considérons deux études qui nous permettent de tester le comportement de la solution proposée pour les équations de couplage micro-macro. Dans la première étude, nous avons considéré un système microscopique qui correspond à un milieu stratifié unidimensionnel pour lequel le problème de fermeture et les équations macroscopiques sont résolus de manière analytique. Cette étude nous permet de tester la validité du modèle et d'évaluer l'approximation quasi-stationnaire. Dans la deuxième étude, une micro-structure bidimensionnelle est considérée pour évaluer des versions simplifiées de l'échange thermique. Dans cette étude, nous nous limitons à l'approximation quasi-stationnaire et nous évaluons la validité d'une approximation diagonale de la matrice des coefficients d'échange.

2.5.1 Evaluation de la fermeture quasi-stationnaire

Afin de tester la validité du modèle proposé et d'évaluer la fermeture quasi-stationnaire, nous considérons un milieu stratifié unidimensionnel constitué d'un arrangement périodique de trois particules de diamètre d_p spatialement séparées d'une distance l_β .

Nous rappelons qu'étant donné que le système illustré sur la figure (2.4) est infini dans toutes les directions, il n'y a pas de gradients de température moyenne, ce qui signifie que la température macroscopique ne dépend que du temps (*i.e.* système macroscopique 0D). La simplicité des systèmes

considérés permet de résoudre analytiquement les problèmes de fermeture ainsi que les équations macroscopiques.



FIGURE 2.4 – Milieu stratifié 1D avec $N_V = 3$

En pratique, le volume de prise de moyenne est considéré périodique [104] et compte tenu de la symétrie du système par rapport au centre de la particule 1, la matrice des coefficients d'échange thermique est symétrique (*i.e.* $h_{pj}^\infty = h_{jp}^\infty$). De plus, la géométrie considérée nous permet de déterminer tous les coefficients de la matrice à partir de h_{11}^∞ et h_{12}^∞ . Ces coefficients sont obtenus en résolvant analytiquement les problèmes de fermeture quasi-stationnaire dans l'annexe E.1.

D'autre part, afin de résoudre analytiquement les équations macroscopiques, nous introduisons les paramètres sans dimension suivants :

$$\begin{aligned} \hat{\nabla} &= l_\beta \nabla ; \hat{t} = \frac{\lambda_\beta}{l_\beta^2 (\rho c_p)_\beta} t ; \hat{\omega}_p = \frac{l_\beta^2}{T_r \lambda_\beta \varphi} \omega_p ; \\ \varphi &= \frac{(\rho c_p)_p}{(\rho c_p)_\beta} ; \hat{h}_{pj}^\infty = \frac{l_\beta^2}{\lambda_\beta \mathcal{V}} h_{pj}^\infty ; \hat{T}_\eta = \frac{T_\eta - T_r}{T_r}, \text{ avec } \eta = \beta, k \end{aligned} \quad (2.5.4)$$

où T_r représente la température de référence. Les équations macroscopiques adimensionnalisées peuvent être exprimées avec une écriture matricielle, sous la forme suivante :

$$\frac{d}{d\hat{t}} [\hat{T}] = \mathcal{H}^\infty \cdot [\hat{T}] + [\hat{\omega}] \quad (2.5.5)$$

où $[\hat{T}]$ et $[\hat{\omega}]$ sont les matrices colonnes définissant respectivement les températures et les termes sources :

$$[\hat{T}] = \begin{pmatrix} \langle \hat{T}_\beta \rangle^\beta \\ \hat{T}_1 \\ \hat{T}_2 \\ \hat{T}_{2b} \end{pmatrix} ; [\hat{\omega}] = \begin{pmatrix} 0 \\ \hat{\omega}_1 \\ \hat{\omega}_2 \\ \hat{\omega}_{2b} \end{pmatrix} \quad (2.5.6)$$

$$\mathcal{H}^\infty = \frac{3}{\alpha_\sigma \varphi} \begin{pmatrix} -\frac{\alpha_\sigma \varphi}{\alpha_\beta} \hat{h}^\infty & \frac{\alpha_\sigma \varphi}{3\alpha_\beta} \hat{h}^\infty & \frac{\alpha_\sigma \varphi}{3\alpha_\beta} \hat{h}^\infty & \frac{\alpha_\sigma \varphi}{3\alpha_\beta} \hat{h}^\infty \\ \hat{h}^\infty & -\hat{h}_{11}^\infty & -\hat{h}_{12}^\infty & -\hat{h}_{12}^\infty \\ \hat{h}^\infty & -\hat{h}_{12}^\infty & -\hat{h}_{11}^\infty & -\hat{h}_{12}^\infty \\ \hat{h}^\infty & -\hat{h}_{12}^\infty & -\hat{h}_{12}^\infty & -\hat{h}_{11}^\infty \end{pmatrix} \quad (2.5.7)$$

Une solution du système d'équations différentielles peut être obtenue explicitement en utilisant l'exponentielle matricielle (*cf.* [84]) :

$$[\hat{T}](\hat{t}) = \left(\int_0^{\hat{t}} \exp(u \mathcal{H}^\infty) du \right) \cdot [\hat{\omega}] + e^{\hat{t} \mathcal{H}^\infty} \cdot [\hat{T}_0] \quad (2.5.8)$$

où le vecteur $[\hat{T}_0]$ représente le vecteur des températures à l'état initial ($t' = 0$). La matrice \mathcal{H}^∞ est diagonalisable avec trois valeurs propres distinctes a_0, a_1 et a_2 définies par :

$$\{a_0, a_1, a_2\} = \left\{ 0, -\frac{3(\hat{h}_{11}^\infty - \hat{h}_{12}^\infty)}{\alpha_\sigma \varphi}, -3\hat{h}^\infty \left(\frac{1}{\alpha_\sigma \varphi} + \frac{1}{\alpha_\beta} \right) \right\} \quad (2.5.9)$$

2.5. Résultats et discussion

Nous appliquons successivement le théorème de Cayley-Hamilton et la formule de Sylvester à $\exp(u\mathcal{H}^\infty)$ (cf. [66, 29]), ainsi l'équation Eq. (2.5.8) peut être réécrite sous la forme suivante :

$$[\hat{T}](\hat{t}) = \mathcal{F}_0 \cdot [\hat{T}_0] - \sum_{i=1}^2 \frac{1}{a_i} \mathcal{F}_i \cdot [\hat{\omega}] + \mathcal{F}_0 \cdot [\hat{\omega}] \hat{t} + \sum_{i=1}^2 e^{a_i \hat{t}} \mathcal{F}_i \cdot \left(\frac{1}{a_i} [\hat{\omega}] + [\hat{T}_0] \right) \quad (2.5.10)$$

avec \mathcal{F}_i le contravariant de Frobenius associé à la matrice \mathcal{H}^∞ , défini par :

$$\mathcal{F}_i = \prod_{j=0, j \neq i}^2 \frac{1}{a_i - a_j} (\mathcal{H}^\infty - a_j \mathcal{I}) \quad (2.5.11)$$

où \mathcal{I} représente la matrice identité. D'autre part, les champs locaux obtenus par la résolution directe du problème à l'échelle microscopique sont moyennés pour produire les valeurs de référence. La comparaison entre les résultats théoriques et numériques a été effectuée pour les paramètres typiques des scénarios d'explosion de poussières dans l'analyse de la sûreté nucléaire (Tab. 2.1), les résultats sont reportés dans la figure (2.5).

Paramétrer	$\frac{\lambda_\sigma}{\lambda_\beta}$	$\frac{(\rho c_p)_\sigma}{(\rho c_p)_\beta}$	α_σ	T_r	$\hat{\omega}_1$	$\hat{\omega}_2$	$\hat{\omega}_{2b}$
Value	10^3	10^3	10^{-3}	300	0	10	5

TABLE 2.1 – Paramètres pour les expériences numériques

Ces résultats montrent que les valeurs théoriques obtenues par le modèle d'Euler-Lagrange avec la fermeture quasi-stationnaire sont en très bon accord avec les expériences numériques, en particulier pour des temps supérieurs à 0,5. Pour les temps courts (*i.e.* $\hat{t} < 0.5$), là encore, on observe un bon accord entre les expériences numériques et les résultats théoriques pour la température moyenne de la phase continue, ainsi que la température de la particule 2 et 2b. Cependant, la température de la particule inerte (particule 1) diminue initialement et ceci est clairement en contradiction avec les résultats des expériences numériques et les principes physiques.

A l'aide du développement de Taylor au deuxième ordre au voisinage de $t = 0$ et la formule de Sylvester, on peut montrer que :

$$[\hat{T}]_{\hat{t} \simeq 0} \simeq [\hat{T}_0] + \left(\mathcal{H}^\infty \cdot [\hat{T}_0] + [\hat{\omega}] \right) t + \frac{1}{2} \mathcal{H}^\infty \cdot \left(\mathcal{H}^\infty \cdot [\hat{T}_0] + [\hat{\omega}] \right) t^2 \quad (2.5.12)$$

Dans le cas où les températures initiales sont nulles, l'équation précédente s'écrit :

$$[\hat{T}]_{\hat{t} \simeq 0} \begin{pmatrix} 0 \\ \hat{\omega}_1 \\ \hat{\omega}_2 \\ \hat{\omega}_{2b} \end{pmatrix} t + \frac{3}{\alpha_\sigma \varphi} \begin{pmatrix} \frac{\alpha_\sigma \varphi}{3\alpha_\beta} \hat{h} (\hat{\omega}_1 + \hat{\omega}_2 + \hat{\omega}_{2b}) \\ - \left(\hat{h}_{11}^\infty \hat{\omega}_1 + \hat{h}_{12}^\infty (\hat{\omega}_2 + \hat{\omega}_{2b}) \right) \\ - \left(\hat{h}_{11}^\infty \hat{\omega}_2 + \hat{h}_{12}^\infty (\hat{\omega}_1 + \hat{\omega}_{2b}) \right) \\ - \left(\hat{h}_{11}^\infty \hat{\omega}_{2b} + \hat{h}_{12}^\infty (\hat{\omega}_1 + \hat{\omega}_2) \right) \end{pmatrix} t^2 \quad (2.5.13)$$

On peut conclure que le modèle quasi-stationnaire peut prédire des températures négatives pour les particules inertes aux temps très courts.

Afin de vérifier que l'erreur dans la valeur de la température de la particule inerte est due aux effets d'histoire qui sont négligés dans l'approximation quasi-stationnaire, nous considérons ici le modèle macroscopique avec la fermeture instationnaire.

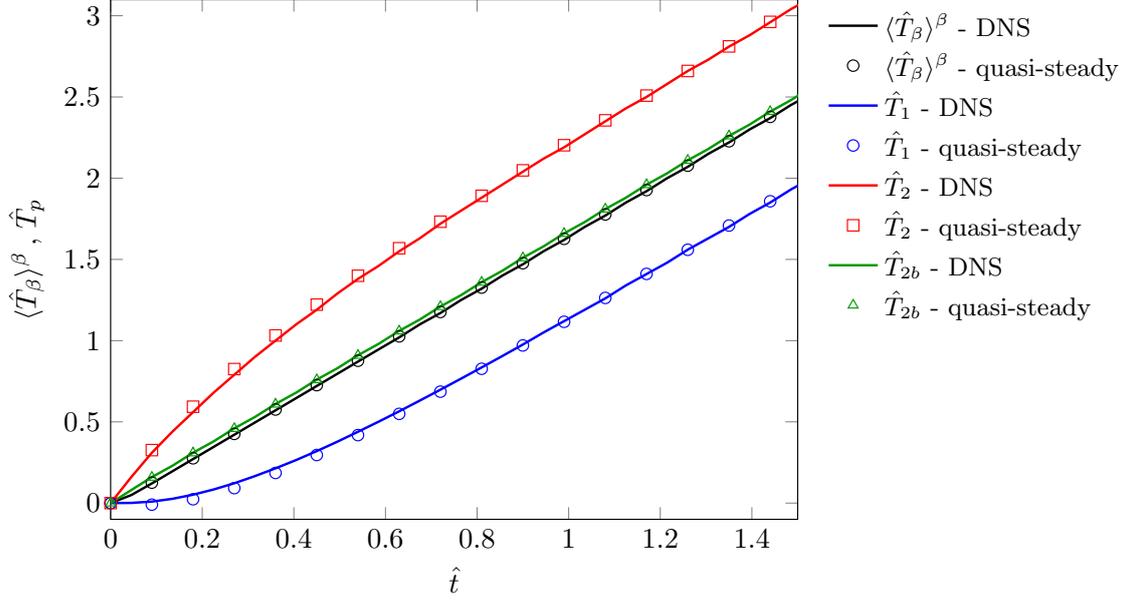


FIGURE 2.5 – Comparaison entre la solution de référence et modèle quasi-stationnaire

Les problèmes de fermeture des variables liés aux effets d’histoire sont résolus analytiquement dans le domaine de Laplace avec une méthode similaire à celle utilisée pour les problèmes de fermeture quasi-stationnaire (*cf.* annexe E.1). D’autre part, le modèle Euler-Lagrange avec la fermeture instationnaire s’écrit dans le domaine de Laplace sous la forme :

$$\xi\{\{\hat{T}\}\} - [\hat{T}_0] = (\{\mathcal{H}^\infty\} + \xi\{\mathcal{H}^*\}) \cdot \{\{\hat{T}\}\} + [\{\hat{\omega}\}] \quad (2.5.14)$$

où $\{\}$ désigne la variable transformée dans le domaine Laplace, et H^* est défini par analogie avec la matrice H^∞ , en utilisant les coefficients d’échange thermique liés aux effets d’histoire. La solution du système d’équations linéaires Eq. (2.5.14) est simple et les températures dans le domaine réel sont obtenues en utilisant l’algorithme numérique de Laplace inverse introduit par Stehfest [129]. Les résultats sont ainsi comparés à ceux des expériences numériques et à ceux du modèle avec la fermeture quasi-stationnaire dans la figure (2.6). Cette figure montre que les résultats du modèle avec la fermeture instationnaire sont superposés à ceux des expériences numériques. En ce qui concerne le modèle à fermeture quasi-stationnaire, les températures moyennes sont très proches des deux résultats précédents si $\hat{t} < 0,5$ et les trois types de résultats convergent vers la même solution si $\hat{t} > 0,5$.

La comparaison entre les solutions théoriques obtenues à partir des équations d’Euler-Lagrange avec la fermeture instationnaire et les valeurs de référence obtenues à partir de la solution microscopique pour le système étudié permet d’illustrer la capacité du modèle à prédire avec certitude les températures moyennes.

De plus, la comparaison entre le modèle avec la fermeture quasi-stationnaire et les valeurs de référence montre que les prédictions de cette version simplificatrice du modèle sont capables de prédire correctement la température moyenne lorsque la contrainte Eq. (2.3.34) est vérifiée, ce qui signifie que les effets de l’historique peuvent être négligés dans ce cas.

Dans l’étude suivante, on supposera que la contrainte de quasi-stationnarité est vérifiée. Le modèle proposé avec une fermeture quasi-stationnaire sera étudié pour une micro-structure bidimensionnelle, et la validité d’une approximation diagonale de la matrice des coefficients d’échange sera testée.

2.5. Résultats et discussion

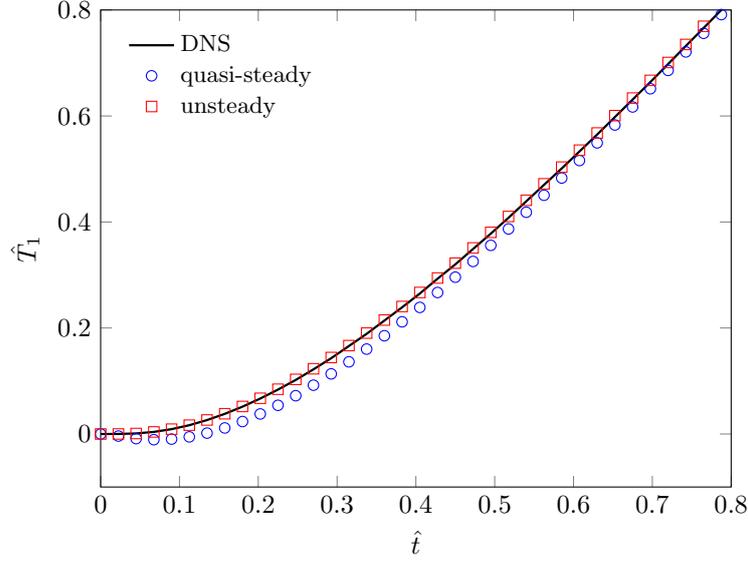


FIGURE 2.6 – Comparaison entre la solution de référence, le modèle quasi-stationnaire et le modèle complet

2.5.2 Evaluation de l'approximation diagonale de la matrice des coefficients d'échange

Nous considérons, dans cette partie, une micro-structure bidimensionnelle Fig.(2.7). La validité du modèle macroscopique proposé ainsi que l'approximation diagonale Eq. (2.3.85) sont évaluées pour la fermeture quasi-stationnaire. Nous notons ici que le gradient de température moyen est nul et cela signifie que :

$$\bar{T}_\beta|_{\mathbf{x}_j} = \bar{T}_\beta|_{\mathbf{x}_p} \quad (2.5.15)$$

Dans ce cas, l'échange quasi-stationnaire peut s'écrire sous la forme :

$$Q_{\beta p} = h_p^\infty (\bar{T}_\beta|_{\mathbf{x}_p} - T_p) + \sum_{j=1}^{N_\nu} h_{pj}^\infty (T_j - T_p), \quad \text{avec} \quad h_p^\infty = \sum_{j=1}^{N_\nu} h_{pj}^\infty \quad (2.5.16)$$

où h_p^∞ correspond au coefficient *lumped* de la matrice h_{pj}^∞ . Dans ce cas, l'approximation diagonale la plus simple consiste à négliger les échanges entre les particules et approximer le coefficient d'échange entre la phase continue et la particule p par le coefficient *lumped*.

Par ailleurs, le coefficient h_p^∞ peut être obtenu à partir de la résolution du problème de fermeture sur une cellule unitaire lorsque la micro-structure est périodique dans toutes les directions (*cf.* annexe E.2).

Les coefficients d'échange apparaissant dans les équations macroscopiques sont déterminés à partir de la résolution des problèmes de fermeture sur des cellules représentatives du milieu. Ces cellules doivent contenir le plus d'information possible relative à la structure du milieu étudié pour représenter le plus parfaitement possible le système réel, il faut donc utiliser des cellules comportant plusieurs particules. Avant d'étudier ces types de cellule, nous nous intéressons, dans un premier temps, à des cellules unitaires, ces cellules permettent d'obtenir des estimations du coefficient *lumped*.

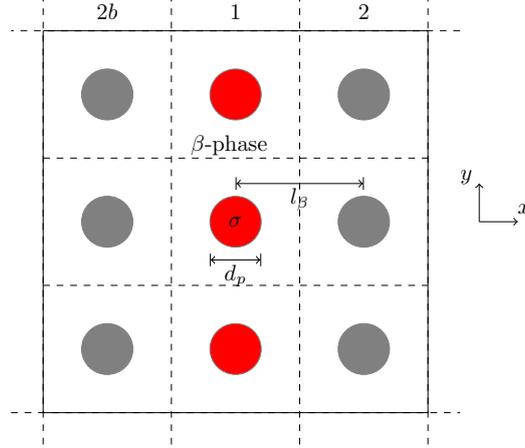


FIGURE 2.7 – Micro-structure bidimensionnel

Cellules unitaires Nous nous intéressons plus particulièrement à la cellule unitaire périodique 2D et à la cellule de Chang (Fig. (2.8)), cette dernière permet d’obtenir une expression analytique coefficient d’échange h_p^∞ . Afin de développer une correspondance entre les cellules [110], les fractions volumiques est identique, ce qui conduit à la relation suivante :

$$\pi R^2 = l_\beta^2 \quad (2.5.17)$$

Etant donné la symétrie radiale, la condition de périodicité est remplacée par une condition de symétrie pour la cellule de Chang (cf. 2.5.1). En suivant les même méthode utilisées pour résoudre le problème de fermeture dans le cas sphérique, le coefficient *lumped* pour une géométrie 2D, s’écrit :

$$\frac{h_p^\infty}{\lambda_\beta d_p} = - \frac{4\pi\alpha_\beta^2}{\alpha_\beta(2 + \alpha_\beta) + 2\log(1 - \alpha_\beta)} \quad (2.5.18)$$

D’autre part, le problème de fermeture doit être résolu numériquement sur la cellule périodique. Une des principales difficultés associées à cette résolution provient de la nature intégral-différentielle. Pour cela, nous avons suivi la méthodologie établie par Quintard *et al.* [102, 104], qui consiste à introduire un changement de variable permettant de s’affranchir du caractère intégral-différentiel du problème de fermeture (cf. annexe E.3).

Dans la figure (2.8), sont comparés l’expression analytique du coefficient *lumped* obtenue à partir de la cellule de Chang et les résultats numériques obtenus à partir de la cellule périodique. Ces résultats montrent un bon accord entre la solution analytique et la solution numérique, en particulier pour les faibles valeurs de α_σ qui constituent le domaine d’intérêt.

Arrangement périodique Dans cette partie, nous nous intéressons à une cellule représentative d’un milieu microscopique qui correspond à un arrangement périodique de cylindres (Fig. (2.7)). Le milieu est supposé infini dans toutes les directions et homogène dans la direction y . Par conséquent, l’étude peut être limitée à une seule ligne de particules. Par ailleurs, la symétrie du système par rapport au centre de la particule 1 permet d’obtenir tous les coefficients d’échange à partir des coefficients $h_{11}^\infty, h_{12}^\infty, \dots, h_{1N}^\infty$ (cf. 2.5.1).

Nous nous intéressons aux mélanges dilués gaz-particules où la fraction volumique de la phase dispersée ne dépasse pas 10^{-3} . Les coefficients d’échange sont calculés pour cette valeur limite et pour un nombre de particules par ligne de 1 à 13. Les valeurs obtenues sont reportées dans le tableau 2.2. Comme vu précédemment, on remarque que le coefficient *lumped* h_p^∞ ne dépend pas de N_γ puisqu’il peut être obtenu à partir d’une cellule unitaire. D’autre part, ces résultats montrent que les coefficients

2.5. Résultats et discussion

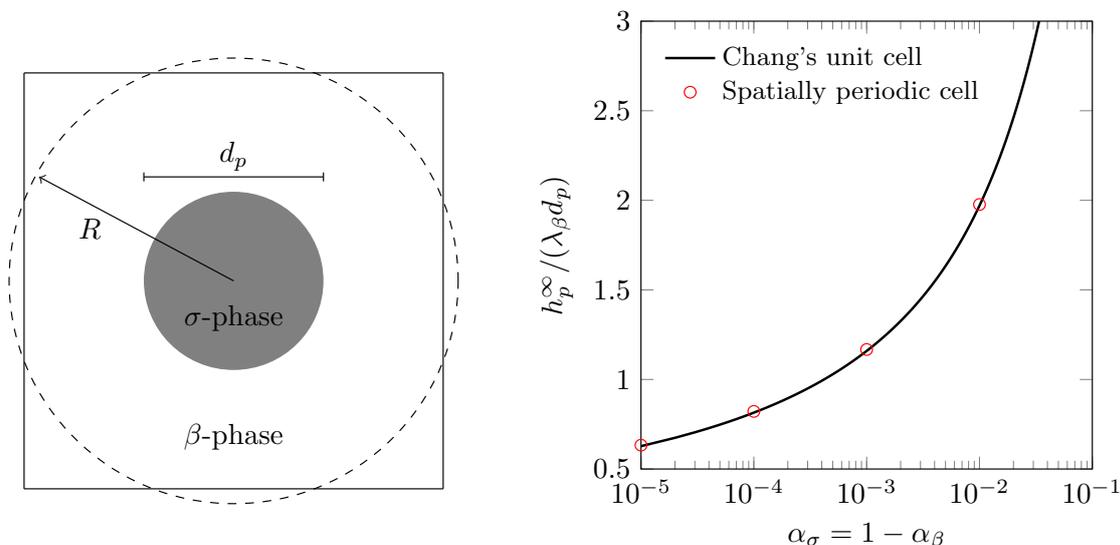


FIGURE 2.8 – Comparaison entre la cellule de Chang et la cellule périodique

N_γ	$\frac{h_{11}^\infty}{\lambda_\beta d_p}$	$\frac{h_{12}^\infty}{\lambda_\beta d_p}$	$\frac{h_{13}^\infty}{\lambda_\beta d_p}$	$\frac{h_{14}^\infty}{\lambda_\beta d_p}$	$\frac{h_{15}^\infty}{\lambda_\beta d_p}$	$\frac{h_{16}^\infty}{\lambda_\beta d_p}$	$\frac{h_{17}^\infty}{\lambda_\beta d_p}$	$\frac{h_p^\infty}{\lambda_\beta d_p}$
1	1.163							1.163
3	0.881	0.141						1.163
5	0.746	0.029	0.180					1.163
7	0.681	-0.035	0.123	0.155				1.163
9	0.644	-0.072	0.086	0.120	0.127			1.163
11	0.620	-0.095	0.062	0.096	0.104	0.105		1.163
13	0.604	-0.112	0.046	0.080	0.088	0.089	0.090	1.163

TABLE 2.2 – Coefficients d'échange thermique pour $\alpha_\sigma = 10^{-3}$ et différentes valeurs de N_γ

non-diagonaux de la matrice sont généralement négligeables devant le coefficient *lumped* et que les coefficients diagonaux h_{pp} sont du même ordre de grandeur que h_p .

De la même manière que l'étude précédente, les résultats théoriques sont obtenus à partir de la résolution analytique des équations macroscopiques à partir de la méthode détaillée dans l'étude précédente et des coefficients d'échange donnés dans le tableau 2.2.

Les résultats de référence sont obtenus à partir de la résolution directe du problème à l'échelle microscopique avec les paramètres physiques utilisés précédemment (tableau 2.1).

On note ici que, dans le cas où il y n'a pas de différence de température entre les particules, le modèle complet est formellement équivalent à l'approximation *lumped* (cf. Eq. (2.5.16)). Afin de tester cette approximation, nous imposons un terme source de $\hat{\omega}_1 = 78$ dans la particule 1, les autres particules restent inertes. Dans un premier temps, nous considérons un arrangement à trois particules, les résultats du modèle quasi-stationnaire ainsi que le modèle quasi-stationnaire *lumped* sont comparés aux résultats de référence dans la figure (2.9). Comme dans l'étude précédente, les valeurs obtenues par le modèle quasi-stationnaire sont en très bon accord avec les valeurs de référence en particulier pour des temps supérieurs à 3. Ceci est en parfaite concordance avec la condition Eq. (2.3.34).

En ce qui concerne l'approximation *lumped*, la figure montre un bon accord entre la température

moyennée \bar{T}_β obtenue à partir de la solution de référence et celle prédite par l'approximation. Cependant, l'approximation *lumped* semble sous-estimer la différence de température entre les particules et la phase continue.

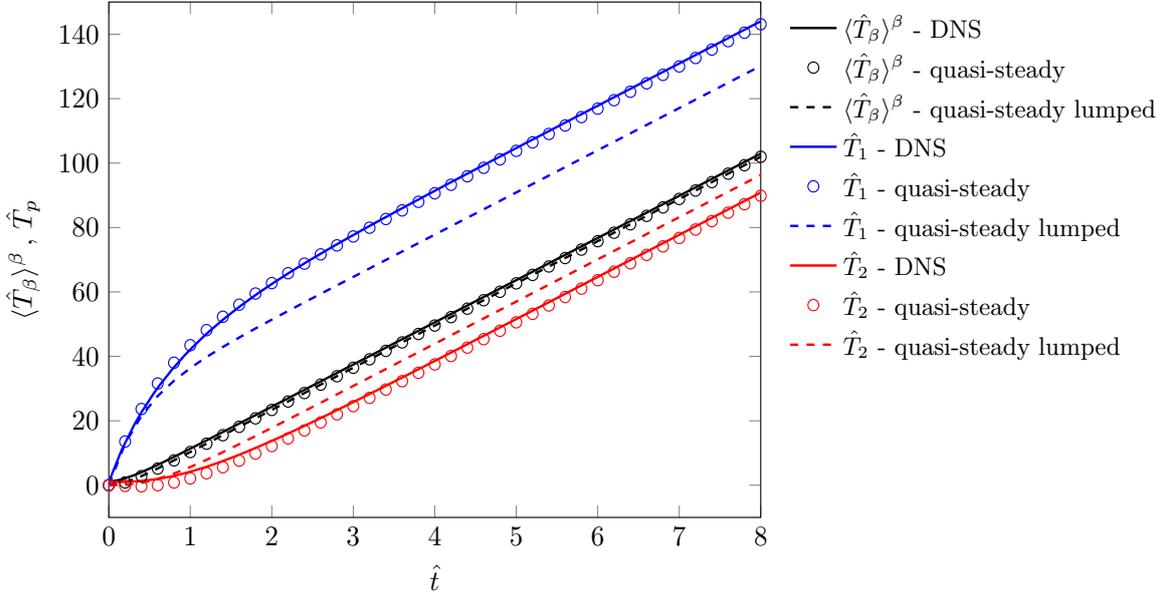


FIGURE 2.9 – Comparaison des résultats de la solution de référence avec celles du modèle macroscopique quasi-stationnaire et de l'approximation *lumped* quasi-stationnaire - $N_\gamma = 3$

Afin d'obtenir plus d'informations sur la validité de l'approximation pour un écart de température plus grand entre les particules, nous étendons le cas précédent à 7 particules dans le volume de prise de moyenne où seule la particule 1 est active. Là encore, les résultats rapportés dans la figure (2.10) montrent qu'un bon accord entre le modèle macroscopique quasi-stationnaire et les résultats de référence est obtenu, à condition que le temps adimensionnel soit suffisamment grand, typiquement $\hat{t} > 8$. En ce qui concerne l'approximation *lumped*, un bon accord avec la solution de référence est également observé pour la température moyenne \bar{T}_β . Par contre, l'approximation *lumped* prédit la même température pour les particules 2, 3 et 4. Ces températures sont très proches de la température moyenne de la phase continue \bar{T}_β et ceci est clairement en contradiction avec les résultats des expériences numériques. De plus, cette approximation sous-estime l'écart de température entre la phase continue et la particule active. On peut conclure que l'approximation *lumped* a conduit à surestimer les transferts entre la phase continue et les particules.

On note ici que d'autres approximations diagonales peuvent être définies. Par exemple, le coefficient de *lumped* peut être remplacé par le coefficient diagonal h_{pp}^∞ . Dans ce cas, les résultats sont rapportés dans la figure (2.11). Ces résultats montrent une amélioration de la capacité de l'approximation diagonale à prédire les températures de référence. Cependant, il faut noter que contrairement au coefficient *lumped*, le coefficient diagonal dépend du nombre de particules dans le volume de prise de moyenne. De ce fait, il ne peut pas être estimé à partir d'une cellule unitaire.

2.5. Résultats et discussion

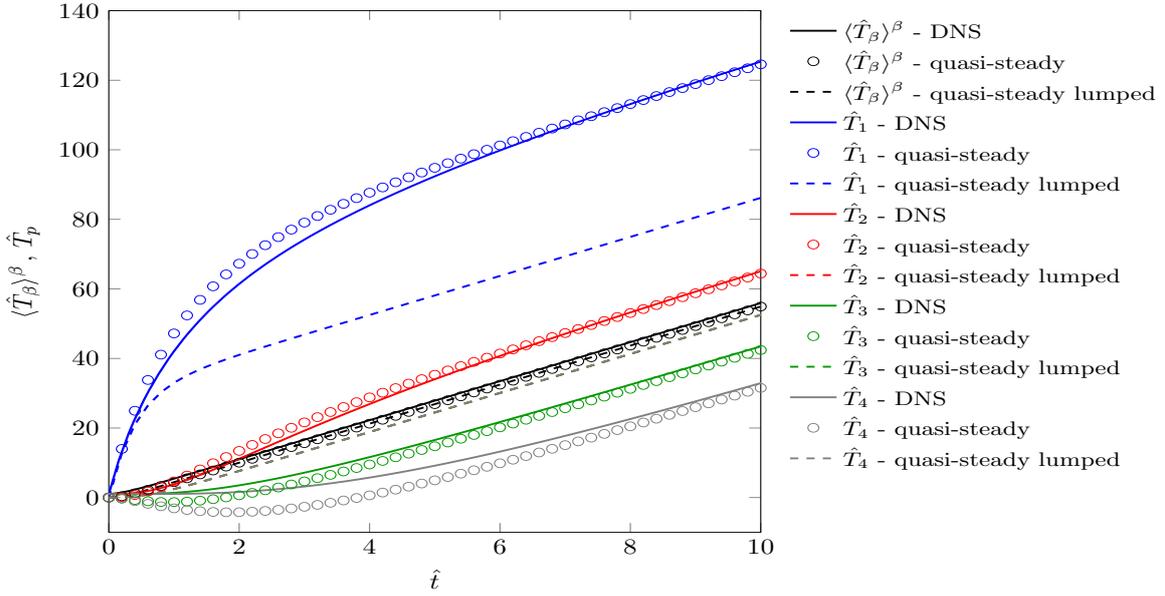


FIGURE 2.10 – Comparaison des résultats de la solution de référence avec celles du modèle macroscopique quasi-stationnaire et de l’approximation *lumped* quasi-stationnaire - $N_\gamma = 7$

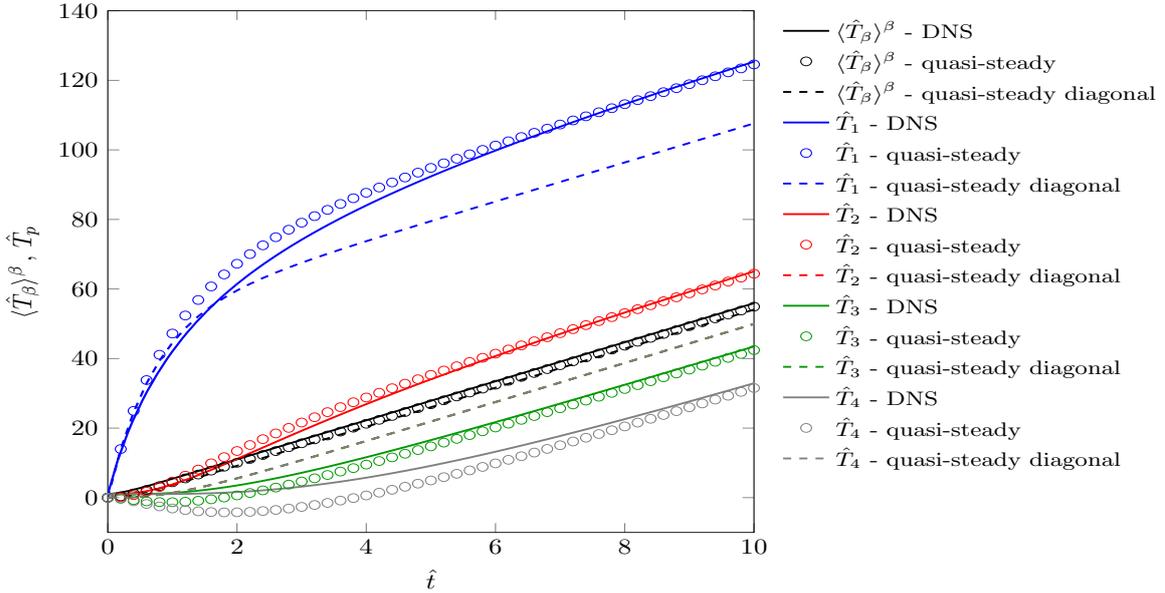


FIGURE 2.11 – Comparaison des résultats de la solution de référence avec celles du modèle macroscopique quasi-stationnaire et de l’approximation diagonale quasi-stationnaire - $N_\gamma = 7$

2.5.3 Discussion

Les applications présentées dans cette partie ont contribué à la compréhension des caractéristiques importantes du modèle proposé. Dans un premier temps, le modèle complet a prédit les températures macroscopiques exactes obtenues à partir des expériences numériques pour une micro-structure

unidimensionnelle avec trois particules dans le volume de prise de moyenne ce qui illustre le bon comportement du modèle proposé. D'un point de vue pratique, l'utilisation d'une fermeture instationnaire implique des termes d'histoire qui nécessitent des ressources informatiques considérables, ainsi l'approximation quasi-stationnaire a été testée. Les études réalisées dans les parties 2.5.1 et 2.5.2 ont montré que les températures moyennes prédites par cette version simplifiée du modèle convergeaient vers la solution exacte. Ce résultat illustre le bon comportement du modèle proposé avec la fermeture quasi-stationnaire lorsque la contrainte Eq. (2.3.34) est vérifiée.

Dans un deuxième temps, étant donné que la prise en compte des échanges entre les particules dans le modèle augmente non seulement le nombre de coefficients effectifs à déterminer mais également la complexité du modèle. Dans ce contexte, la validité de l'approximation diagonale de la matrice d'échange a été étudiée. L'utilisation de cette approximation simplifie considérablement le modèle puisque le coefficient *lumped* peut être obtenu à partir d'une cellule unitaire avec une particule isolée, ce qui est équivalent à la méthode utilisée dans les approches classiques. De plus, cette approximation est formellement équivalente au modèle macroscopique complet lorsque les différences de température entre les particules peuvent être négligées. La version simplifiée du modèle a été testée dans le cas d'un système bidimensionnel à l'échelle microscopique, et cette étude a montré que cette version du modèle est capable de prédire la température moyenne de la phase continue. Cependant, elle est moins satisfaisante pour prédire les températures des particules, ce qui est dû au fait que l'échange entre les particules est négligé dans ces approximations.

2.6 Conclusion

Dans ce chapitre, une méthode alternative a été proposée pour dériver un modèle macroscopique d'Euler-Lagrange décrivant le transfert de chaleur dans un mélange dilué gaz-particules. Le changement d'échelle a été effectué à partir de la technique de prise de moyenne volumique. Une relation de fermeture instationnaire des équations macroscopiques a été proposée à partir de l'analyse des caractéristiques microscopiques. Cette analyse a été réalisée à partir du problème local pour les fluctuations et sous l'hypothèse classique de séparation des échelles. La forme fermée des équations macroscopiques a été obtenue avec des propriétés effectives qui dépendent du temps, et suite à la décomposition des coefficients effectifs, en une contribution quasi-stationnaire et une contribution liée aux effets de mémoire, les termes d'histoire ont été exhibés explicitement.

Le modèle macroscopique complet obtenu possède une forme similaire au modèle classique dans le sens où la phase continue est décrite de façon eulérienne, la phase dispersée de façon lagrangienne et les échanges entre les deux phases sont modélisés. En revanche, le modèle comprend des termes de transport non-classiques, ces termes ont été analysés et une version simplifiée du modèle a été proposée. À la suite de ces simplifications, la principale différence entre le modèle proposé et le modèle classique réside dans la présence des termes supplémentaires impliquant des échanges entre les particules dans l'échange thermique macroscopique entre la phase continue et la particule. D'autre part, dans le modèle proposé, les coefficients d'échange sont fonction du taux de dilution et sont déterminés de manière purement théorique à partir des problèmes de fermeture. Sous l'hypothèse de séparation d'échelle, ces derniers peuvent être résolus sur une cellule unitaire représentative du milieu. D'autre part, deux versions simplifiées du modèle ont été proposées. La version quasi-stationnaire vers laquelle le modèle instationnaire dégénère naturellement aux temps longs et la version diagonale qui permet d'établir un lien direct avec le modèle classique.

Les études analytiques et numériques réalisées dans la dernière partie ont permis de valider le modèle proposé et de discuter de la validation de la version quasi-stationnaire et diagonale du modèle. À l'issue de ces études, nous avons montré une équivalence formelle entre l'approche proposée et l'approche classique dans le cas limite d'une particule isolée dans un milieu infini. Nous avons ensuite mené des expériences numériques en comparant la solution prédite par le modèle à celle obtenue par la résolution

2.6. Conclusion

directe du problème à l'échelle microscopique. Ces expériences ont montré que le modèle complet prédit exactement les mêmes températures macroscopiques que la solution de référence. De plus, ces résultats ont illustré le bon comportement de la version quasi-stationnaire du modèle.

Enfin, l'approximation diagonale a été testée et les résultats obtenus montrent que la version simplifiée du modèle est capable de prédire correctement la température moyenne de la phase continue. En revanche, cette approximation surestime les échanges entre la phase continue et les particules en présence d'un grand écart de température entre les particules. Cette situation concerne particulièrement les particules présentes dans le front de flamme où le gradient de la température dans cette zone entraîne un grand écart de température entre les particules. Pour les raisons pratiques détaillées précédemment, les échanges entre les particules seront supposés négligeables dans la suite de ce travail et l'approximation *lumped* sera adoptée. L'intérêt de cette approximation par rapport à l'approche classique est que les coefficients d'échange sont une fonction du taux de dilution.

Chapitre 3

Modélisation macroscopique des échanges massiques gaz-particules : application au carbone

Sommaire

3.1	Problème à l'échelle locale	73
3.1.1	Modèle réactif des particules de carbone	73
3.1.2	Equations de transport à l'échelle locale	74
3.2	Changement d'échelle	75
3.2.1	Equations de transport à échelle macroscopique	75
3.2.2	Problème locale pour les fluctuations	78
3.3	Fermeture des équations filtrées	80
3.3.1	Proposition de fermeture pour les fluctuations	80
3.3.2	Forme fermée des équations macroscopiques	82
3.4	Résultats et discussion	84
3.4.1	Résultats pour une particule isolée	84
3.4.2	Evaluation de la fermeture quasi-stationnaire	87
3.5	Conclusion	90

Ce chapitre présente le développement du modèle macroscopique pour la description des transferts de masse associés à la combustion des particules de carbone en utilisant la méthode de prise de moyenne volumique. A l'instar du chapitre précédent, nous supposons ici que le transfert massique peut être découplé du transfert thermique ainsi que de l'écoulement diphasique. Ainsi, les températures et les vitesses sont supposées être des champs connus. Nous supposons également que les propriétés physiques comme la masse volumique et les coefficients de diffusion de la phase continue ne varient pas significativement dans le volume de prise de moyenne.

Nous commençons par présenter le problème à l'échelle locale en décrivant le modèle réactif associé à l'oxydation de la particule de carbone dans la gamme des diamètres qui nous intéressent. Nous détaillons ensuite le changement d'échelle permettant d'établir les équations macroscopiques. La fermeture du modèle macroscopique est basée sur une représentation quasi-stationnaire des fluctuations. La version définitive du modèle macroscopique obtenu dans ce travail est similaire au modèle macroscopique Euler-Lagrange classique. En revanche, le modèle prend en compte les effets du taux de dilution sur les échanges entre les deux phases. D'un point de vue pratique, cette approche a pour avantage d'estimer les coefficients effectifs de transport macroscopique à partir des problèmes de fermeture. Ces derniers feront l'objet d'une résolution analytique pour une particule de carbone se déplaçant à

3.1. Problème à l'échelle locale

la même vitesse que la phase continue. Les résultats macroscopiques obtenus permettront de valider l'approche proposée.

3.1 Problème à l'échelle locale

3.1.1 Modèle réactif des particules de carbone

Nous considérons les particules de carbone comme étant sphériques, rigides avec une surface non poreuse. Par conséquent, le processus de combustion se déroule sur la surface externe de la particule [5, 72]. La combustion du carbone a été le centre d'un grand nombre d'études [4, 17, 92]. Dans le cas où la particule de carbone est exposée à un mélange de gaz oxygène-azote contenant une petite quantité d'humidité, les réactions hétérogènes suivantes sont souvent considérées dans la littérature [17, 79, 80, 134] :



Les réactions précédentes sont généralement couplées avec une réaction homogène en phase gazeuse produisant le dioxyde de carbone :



En fonction de la vitesse d'oxydation de $CO_{(g)}$, on peut identifier deux modèles limites. D'une part, le modèle à film unique Fig. (3.1), valable dans le cas où la réaction homogène est infiniment lente devant la diffusion des espèces dans la couche limite, c'est-à-dire que le nombre de Damköhler $\mathcal{D}_{a\mathcal{H}}$ qui compare la vitesse de réaction homogène à la vitesse de diffusion est négligable devant 1. D'autre part, le modèle à double film Fig. (3.2) dans le cas où la réaction homogène est infiniment rapide [54] (*i.e.* $\mathcal{D}_{a\mathcal{H}} \gg 1$).

- Le modèle à film unique proposé initialement par Nusselt [17] suppose que la réaction homogène ($2CO_{(g)} + O_{2(g)} \rightarrow 2CO_{2(g)}$) est infiniment lente. La réaction dans la phase continue peut alors être considérée comme gelée au voisinage de la particule. L'oxydation du carbone est contrôlée par la diffusion d'oxygène à travers un film stationnaire à la surface de la particule de carbone où il réagit pour former le $CO_{(g)}$ et/ou $CO_{2(g)}$ [17, 61]. Pour des températures au-dessus de 1273 K, le produit principal de la réaction est le $CO_{(g)}$ [3, 76].

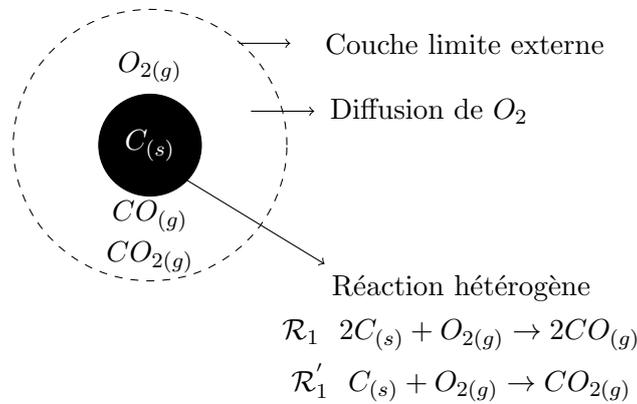


FIGURE 3.1 – Modèle à film unique

- Le modèle à double film proposé par Burke et Schuman [17] suppose que le carbone réagit à la surface avec $CO_{2(g)}$ selon la réaction hétérogène ($C_{(s)} + CO_{2(g)} \rightarrow 2CO_{(g)}$). Le $CO_{(g)}$ produit est brûlé dans un front de flamme mince dans la couche limite avec une réaction hétérogène infiniment rapide ($2CO_{(g)} + O_{2(g)} \rightarrow 2CO_{2(g)}$) [54]. L'oxygène n'atteint pas la surface du carbone et aucun $CO_{(g)}$ n'atteint le bord externe de la couche limite [17, 61].

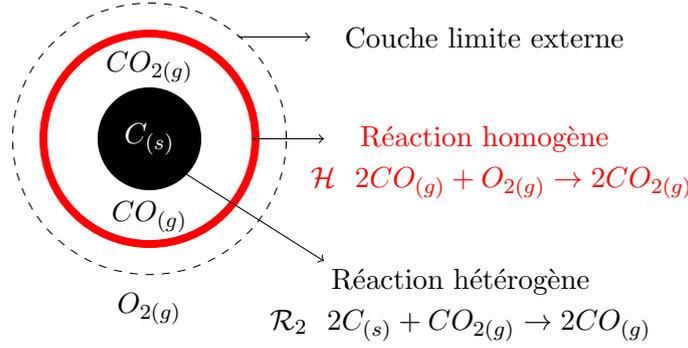


FIGURE 3.2 – Modèle à double film

La différence entre ces deux modèles réside dans l'endroit où se produit l'oxydation de $CO_{(g)}$ et dans la nature de la flamme. Pour le modèle à film unique, le $CO_{(g)}$ brûle dans une flamme de pré-mélange en dehors de la couche limite. Dans le cas du modèle à double film, il brûle dans la couche limite dans une flamme de diffusion. On observe généralement que les grandes particules ($r_p > 2 \text{ mm}$) brûleront selon le modèle du double film, alors que de petites particules ($r_p < 100 \mu\text{m}$) satisferont le modèle à film unique [2, 17]. Comme il est question des risques d'explosion des poussières dans les installations nucléaires où la taille des particules ne dépasse pas $100 \mu\text{m}$, nous nous intéresserons dans la suite de ce chapitre aux modèles à film unique. De plus, nous considérons que la température au voisinage des particules est assez élevée pour que leur oxydation produise essentiellement du monoxyde de carbone suivant la réaction \mathcal{R}_1 .

3.1.2 Equations de transport à l'échelle locale

Pour un mélange gazeux constitué de N_e espèces chimiques dans la phase continue β et une seule espèce (s) dans la phase dispersée σ , les transferts de masse en chaque point sont gouvernés par l'équation de transport d'espèce k dans la phase continue et les équations de conservation de la masse pour chaque phase :

$$\partial_t (\rho_\beta Y_{\beta,k}) + \nabla \cdot (\rho_\beta Y_{\beta,k} \mathbf{u}_\beta) = \nabla \cdot (\rho_\beta D_{\beta,k} \nabla Y_{\beta,k}) + \dot{\omega}_{\beta,k} \quad \text{dans } \Omega_\beta \quad (3.1.5)$$

$$\partial_t \rho_\beta + \nabla \cdot (\rho_\beta \mathbf{u}_\beta) = 0 \quad \text{dans } \Omega_\beta \quad (3.1.6)$$

$$\partial_t \rho_\sigma + \nabla \cdot (\rho_\sigma \mathbf{u}_\sigma) = 0 \quad \text{dans } \Omega_\sigma \quad (3.1.7)$$

où $Y_{\beta,k}$, $D_{\beta,k}$ et $\dot{\omega}_{\beta,k}$ représentent respectivement la fraction massique, le coefficient de diffusion massique et le taux de la réaction homogène \mathcal{H} de l'espèce k dans la phase β . \mathbf{u}_η et ρ_η sont respectivement la vitesse et la masse volumique de la phase η ($= \beta, \sigma$). Les équations de transport locales précédentes sont complétées par les conditions de saut aux interfaces :

$$-\mathbf{n}_{\beta\sigma} \cdot ((\rho_\beta Y_{\beta,k} (\mathbf{u}_\beta - \mathbf{w}) - \rho_\beta D_{\beta,k} \nabla Y_{\beta,k})) = \varpi_k \quad \text{sur } A_{\beta\sigma} \quad (3.1.8)$$

$$\mathbf{n}_{\beta\sigma} \cdot (\rho_\sigma (\mathbf{u}_\sigma - \mathbf{w})) = \varpi_s \quad \text{sur } A_{\beta\sigma} \quad (3.1.9)$$

$$\mathbf{n}_{\beta\sigma} \cdot (\rho_\beta (\mathbf{u}_\beta - \mathbf{w})) = \mathbf{n}_{\beta\sigma} \cdot (\rho_\sigma (\mathbf{u}_\sigma - \mathbf{w})) \quad \text{sur } A_{\beta\sigma} \quad (3.1.10)$$

où $\mathbf{n}_{\beta\sigma}$ est la normale sortante de la phase β vers la phase σ , \mathbf{w} la vitesse de déplacement de l'interface $A_{\beta\sigma}$ et ϖ_k le taux surfacique de réaction hétérogène \mathcal{R}_1 . Afin de compléter le problème local, les

3.2. Changement d'échelle

équations de transport ainsi que les conditions aux interfaces doivent être complétées par des conditions initiales et des conditions aux limites en entrée et en sortie du milieu considéré. Cependant, ces conditions ne sont généralement connues qu'en grandeurs macroscopiques, il n'est pas donc nécessaire de les détailler à ce stade (*cf.* section 2.1).

Fermeture du taux de réaction homogène On rappelle que la combustion dans la phase continue peut être modélisée par une réaction globale irréversible. La réaction homogène $\dot{\omega}_{\beta,k}$ de l'espèce k , s'écrit :

$$\dot{\omega}_{\beta,k} = W_k \nu_{\beta,k} K^f \prod_{i=1}^{N_e} \left(\frac{\rho_{\beta} Y_{\beta,i}}{W_k} \right)^{\nu_{\beta,k}} \quad (3.1.11)$$

où W_k est la masse molaire, $\nu_{\beta,k}$ le coefficient stœchiométrique de l'espèce k associé à la réaction homogène et K^f le taux de réaction directe, modélisé par la loi empirique d'Arrhenius :

$$K^f = C^f T_{\beta}^{n_{\beta}} \exp\left(-\frac{T_a}{T_{\beta}}\right) \quad (3.1.12)$$

où C^f est la constante pré-exponentielle, n_{β} l'exposant de température T_{β} et T_a la température d'activation.

Fermeture du taux surfacique de la réaction hétérogène Pour la fermeture du taux surfacique de la réaction hétérogène \mathcal{R}_1 , nous adopterons une fermeture du premier ordre par rapport à l'oxygène [49, 79]. Ainsi, le taux surfacique de la réaction ϖ_k associé à la réaction hétérogène \mathcal{R}_1 est défini pour chaque espèce k par :

$$\varpi_k = \nu_{\sigma,k} W_k \psi(T_{\sigma}) Y_{\beta,O_2} \quad (3.1.13)$$

où $\nu_{\sigma,k}$ est le coefficient stœchiométrique de l'espèce k associé à la réaction hétérogène, Y_{β,O_2} la fraction massique de l'oxygène et ψ le taux net d'avancement de la réaction hétérogène qui ne dépend que de la température de la phase σ à l'interface $A_{\beta\sigma}$:

$$\psi(T_{\sigma}) = B \exp\left(-\frac{T_a}{T_{\sigma}}\right) \quad (3.1.14)$$

où B est la constante pré-exponentielle associée à la réaction hétérogène, T_a la température d'activation et T_{σ} la température de la phase dispersée.

3.2 Changement d'échelle

3.2.1 Equations de transport à échelle macroscopique

L'objectif de ce paragraphe est d'obtenir une description macroscopique Euler-Lagrange des transferts massiques à partir de la méthode de la prise de moyenne volumique. Pour obtenir l'équation d'évolution de la masse m_p d'une particule p , nous intégrons l'équation Eq. (3.1.7) sur le volume V_p de la particule p et nous utilisons le théorème de transport de Reynolds et de la divergence :

$$\frac{d}{dt} \int_{V_p} \rho_{\sigma} dV = \int_{A_p} \mathbf{n}_{\beta\sigma} \cdot (\rho_{\beta} (\mathbf{u}_{\sigma} - \mathbf{w})) dS \quad (3.2.1)$$

En utilisant la condition de saut Eq. (3.1.9), l'équation de conservation de la masse pour chaque particule p peut s'écrire sous la forme :

$$\dot{m}_p = \frac{dm_p}{dt} = \int_{A_p} \varpi_s dS \quad (3.2.2)$$

En introduisant l'expression du taux net d'avancement de la réaction hétérogène, donnée par l'équation Eq. (3.1.13), on obtient :

$$\dot{m}_p = \nu_{\sigma,s} W_s \int_{A_p} \psi(T_\sigma) Y_{\beta,O_2} dS \quad (3.2.3)$$

Rappelons que la conductivité thermique de la phase dispersée est beaucoup plus grande que la conductivité thermique de la phase continue et que le gradient de température à l'intérieur de la particule peut être négligé. Dans ces conditions, la température à la surface de la particule p peut être assimilée à la température moyenne T_p de la particule p définie par la relation Eq. (2.2.3), ainsi l'équation précédente peut s'écrire :

$$\dot{m}_p = \nu_{\sigma,s} W_s \psi(T_p) \int_{A_p} Y_{\beta,O_2} dS \quad (3.2.4)$$

En introduisant la décomposition en valeur moyenne et fluctuations pour la fraction massique, l'équation de conservation de la masse pour chaque particule p s'écrit finalement :

$$\dot{m}_p = \nu_{\sigma,s} W_s \psi(T_p) \int_{A_p} (\bar{Y}_{\beta,O_2} + Y'_{\beta,O_2}) dS \quad (3.2.5)$$

Afin de déterminer les équations macro eulériennes, nous suivons la même méthodologie utilisée dans la chapitre précédente, laquelle consiste à étendre les équations Eqs. (3.1.5) et (3.1.6) valable dans le domaine Ω_β à l'ensemble du domaine $\Omega = \Omega_\beta \cup \Omega_\sigma$. Ces équations sont multipliées par la fonction caractéristique γ_β et les propriétés Eqs. (1.2.49) à (1.2.52) sont utilisées. Ensuite, elles sont moyennées spatialement sur le volume de prise de moyenne et en utilisant la commutativité de l'opérateur de moyenne avec les opérateurs différentiels, les équations macroscopiques de transport d'espèce k et de conservation de la masse dans la phase β s'écrivent :

$$\partial_t (\alpha_\beta \rho_\beta \bar{Y}_{\beta,k}) + \nabla \cdot (\langle \gamma_\beta \rho_\beta Y_{\beta,k} \mathbf{u}_\beta \rangle) = \langle \nabla \cdot (\gamma_\beta \rho_\beta D_{\beta,k} \nabla Y_{\beta,k}) \rangle + \alpha_\beta \bar{\dot{\omega}}_{\beta,k} \quad (3.2.6)$$

$$\partial_t \alpha_\beta \rho_\beta + \nabla \cdot (\alpha_\beta \rho_\beta \bar{\mathbf{u}}_\beta) = -\langle \mathbf{n}_{\beta\sigma} \cdot (\rho_\beta (\mathbf{u}_\beta - \mathbf{w})) \delta_{\beta\sigma} \rangle \quad (3.2.7)$$

Dans les équations précédentes, nous avons fait l'hypothèse que la masse volumique dans la phase continue ne varie pas significativement à l'intérieur du volume de prise de moyenne. Il faut noter que si la masse volumique est supposée constante dans le volume de prise de moyenne, cela ne signifie pas qu'elle le reste à l'échelle macroscopique [142].

En utilisant la décomposition en valeur moyenne et fluctuations pour la vitesse et la fraction massique de l'espèce k dans la phase continue, le terme convectif dans l'équation Eq. (3.2.6) devient :

$$\nabla \cdot (\langle \gamma_\beta \rho_\beta Y_{\beta,k} \mathbf{u}_\beta \rangle) = \nabla \cdot (\alpha_\beta \rho_\beta \bar{Y}_{\beta,k} \bar{\mathbf{u}}_\beta) + \nabla \cdot (\alpha_\beta \rho_\beta \overline{Y'_{\beta,k} \mathbf{u}'_\beta}) \quad (3.2.8)$$

En suivant le même développement que pour l'équation (2.2.15), le premier terme du second membre de l'équation Eq. (3.2.6) peut s'écrire sous la forme :

$$\langle \nabla \cdot (\gamma_\beta \rho_\beta D_{\beta,k} \nabla Y_{\beta,k}) \rangle = \nabla \cdot (\alpha_\beta \rho_\beta D_{\beta,k} \nabla \bar{Y}_{\beta,k} + \rho_\beta D_{\beta,k} \langle \mathbf{n}_{\beta\sigma} Y'_{\beta,k} \delta_{\beta\sigma} \rangle)$$

3.2. Changement d'échelle

En regroupant les relations Eqs. (3.2.6) à (3.2.9), les équations de transport des espèces et les équations de conservation de la masse dans la phase continue s'écrivent :

$$\underbrace{\partial_t (\alpha_\beta \rho_\beta \bar{Y}_{\beta,k})}_{\text{accumulation}} + \underbrace{\nabla \cdot (\alpha_\beta \rho_\beta \bar{Y}_{\beta,k} \bar{\mathbf{u}}_\beta)}_{\text{convection}} = \underbrace{\nabla \cdot (\alpha_\beta \rho_\beta D_{\beta,k} \nabla \bar{Y}_{\beta,k} + \rho_\beta D_{\beta,k} \langle \mathbf{n}_{\beta\sigma} Y'_{\beta,k} \delta_{\beta\sigma} \rangle)}_{\text{diffusion}} - \underbrace{\langle \mathbf{n}_{\beta\sigma} \cdot (\rho_\beta Y_{\beta,k} (\mathbf{u}_\beta - \mathbf{w}) - \rho_\beta D_{\beta,k} \nabla Y_{\beta,k}) \delta_{\beta\sigma} \rangle}_{\text{échange interfacial}} + \underbrace{\alpha_\beta \bar{\omega}_{\beta,k}}_{\text{réaction homogène}} - \underbrace{\nabla \cdot (\alpha_\beta \rho_\beta \bar{Y}'_{\beta,k} \mathbf{u}'_\beta)}_{\text{dispersion}} \quad (3.2.9)$$

$$\underbrace{\partial_t (\alpha_\beta \rho_\beta)}_{\text{accumulation}} + \underbrace{\nabla \cdot (\alpha_\beta \rho_\beta \bar{\mathbf{u}}_\beta)}_{\text{convection}} = \underbrace{-\langle \mathbf{n}_{\beta\sigma} \cdot (\rho_\beta (\mathbf{u}_\beta - \mathbf{w})) \delta_{\beta\sigma} \rangle}_{\text{échange interfacial}} \quad (3.2.10)$$

La prise de moyenne volumique aux équations locales entraîne l'apparition d'un terme des échanges aux interfaces et d'un taux de réaction filtré $\bar{\omega}_{\beta,k}$. Les termes d'échanges aux interfaces dans les équations précédentes peuvent être exprimés en fonction du taux de consommation de la particule. En utilisant les développements détaillés dans le paragraphe 1.3, les échanges aux interfaces de l'espèce k entre la phase continue et la phase dispersée dans l'équation Eq. (3.2.9), peuvent s'écrire :

$$\begin{aligned} & -\langle \mathbf{n}_{\beta\sigma} \cdot (\rho_\beta Y_{\beta,k} (\mathbf{u}_\beta - \mathbf{w}) - \rho_\beta D_{\beta,k} \nabla Y_{\beta,k}) \delta_{\beta\sigma} \rangle \\ &= -\sum_{p=1}^{N_V} g(\mathbf{x} - \mathbf{x}_p) \int_{A_p} \mathbf{n}_{\beta\sigma} \cdot (\rho_\beta Y_{\beta,k} (\mathbf{u}_\beta - \mathbf{w}) - \rho_\beta D_{\beta,k} \nabla Y_{\beta,k}) dS \end{aligned} \quad (3.2.11)$$

D'autre part, en intégrant la condition de saut (3.1.8) sur la surface de la particule p , on obtient :

$$-\int_{A_p} \mathbf{n}_{\beta\sigma} \cdot (\rho_\beta Y_{\beta,k} (\mathbf{u}_\beta - \mathbf{w}) - \rho_\beta D_{\beta,k} \nabla Y_{\beta,k}) dS = \nu_{\sigma,k} W_k \int_{A_p} \psi(T_\sigma) Y_{\beta,O_2} dS \quad (3.2.12)$$

A partir de l'équation précédente et de l'équation Eq. (3.2.3), le terme d'échange interfacial de l'espèce k , peut s'écrire :

$$-\langle \mathbf{n}_{\beta\sigma} \cdot (\rho_\beta Y_{\beta,k} (\mathbf{u}_\beta - \mathbf{w}) - \rho_\beta D_{\beta,k} \nabla Y_{\beta,k}) \delta_{\beta\sigma} \rangle = \frac{\nu_{\sigma,k} W_k}{\nu_{\sigma,s} W_s} \sum_{p=1}^{N_V} g(\mathbf{x} - \mathbf{x}_p) \frac{dm_p}{dt} \quad (3.2.13)$$

De la même manière, en intégrant la relation de saut Eq.(3.1.9) sur la surface de la particule p et en utilisant l'équation Eq.(3.2.3), le terme des échanges de masse entre la phase continue et la phase dispersée, s'écrit :

$$-\langle \mathbf{n}_{\beta\sigma} \cdot (\rho_\beta (\mathbf{u}_\beta - \mathbf{w})) \delta_{\beta\sigma} \rangle = -\sum_{p=1}^{N_V} g(\mathbf{x} - \mathbf{x}_p) \frac{dm_p}{dt} \quad (3.2.14)$$

D'autre part, la réaction homogène infiniment lente, *i.e.* les réactifs se mélangent rapidement et réagissent lentement. Par conséquent, les effets d'homogénéisation de la température et des fractions massiques sur le taux de réaction homogène sont négligeables. Ceci implique que le taux de réaction filtré correspond au taux de réaction obtenu en utilisant des valeurs moyennes. Dans ce cas, la moyenne du taux de réaction homogène peut s'écrire :

$$\bar{\omega}_{\beta,k}(T_\beta, Y_{\beta,1}, \dots, Y_{\beta,N}) \simeq \bar{\omega}_{\beta,k}(\bar{T}_\beta, \bar{Y}_{\beta,1}, \dots, \bar{Y}_{\beta,N_e}) \quad (3.2.15)$$

Dans la suite, nous noterons :

$$\bar{\omega}_{\beta,k}(\bar{T}_\beta, \bar{Y}_{\beta,1}, \dots, \bar{Y}_{\beta,N}) = \bar{\omega}_{\beta,k}$$

A partir des équations Eqs. (3.2.13) à (3.2.15), les équations macroscopiques des transferts massiques s'écrivent :

$$\begin{aligned} \partial_t (\alpha_\beta \rho_\beta \bar{Y}_{\beta,k}) + \nabla \cdot (\alpha_\beta \rho_\beta \bar{Y}_{\beta,k} \bar{\mathbf{u}}_\beta) &= \nabla \cdot (\alpha_\beta \rho_\beta D_{\beta,k} \nabla \bar{Y}_{\beta,k} + \rho_\beta D_{\beta,k} \langle \mathbf{n}_{\beta\sigma} Y'_{\beta,k} \delta_{\beta\sigma} \rangle) \\ &+ \frac{\nu_{\sigma,k} W_k}{\nu_{\sigma,s} W_s} \sum_{p=1}^{N_V} g(\mathbf{x} - \mathbf{x}_p) \dot{m}_p + \alpha_\beta \bar{\omega}_{\beta,k} \\ &- \nabla \cdot (\alpha_{\beta,k} \rho_\beta \overline{Y'_{\beta,k} \mathbf{u}'_\beta}) \end{aligned} \quad (3.2.16)$$

$$\partial_t (\alpha_\beta \rho_\beta) + \nabla \cdot (\alpha_\beta \rho_\beta \bar{\mathbf{u}}_\beta) = - \sum_{p=1}^{N_V} g(\mathbf{x} - \mathbf{x}_p) \dot{m}_p \quad (3.2.17)$$

$$\dot{m}_p = \nu_{\sigma,s} W_s \psi(T_p) \int_{A_p} (\bar{Y}_{\beta,O_2} + Y'_{\beta,O_2}) dS \quad (3.2.18)$$

Ces équations font intervenir les fluctuations des fractions massiques dont la longueur caractéristique des variations à l'échelle locale est notée l_β . A ce stade de l'analyse, le problème macroscopique nécessite une résolution mixte pour les problèmes en $Y_{\beta,k}$ et $Y'_{\beta,k}$, cela serait évidemment très complexe et coûteux. L'objectif maintenant est d'établir des relations entre les fluctuations et les fractions moyennes sur la base du problème local pour les fluctuations. Ces relations constituent les relations de fermeture. Ainsi, les équations du modèle macroscopique peuvent être exprimées en fonction des grandeurs moyennes et des coefficients effectifs de transport déterminés à partir des problèmes aux limites locaux [108].

3.2.2 Problème locale pour les fluctuations

Dans le but de relier les termes de fluctuations aux termes macroscopiques, nous cherchons tout d'abord à déterminer le problème local auquel obéissent les fluctuations $Y'_{\beta,k}$. Pour cela, l'équation locale de transport d'espèce Eq. (3.1.5) sous sa forme non conservative est multipliée par la fraction volumique et la décomposition en valeur moyenne et fluctuation pour la vitesse et pour la fraction massique est introduite. On obtient :

$$\alpha_\beta \rho_\beta (\partial_t \bar{Y}_{\beta,k} + \partial_t Y'_{\beta,k} + (\bar{\mathbf{u}}_\beta + \mathbf{u}'_\beta) \cdot \nabla (\bar{Y}_{\beta,k} + Y'_{\beta,k})) = \alpha_\beta \rho_\beta D_{\beta,k} \nabla^2 (\bar{Y}_{\beta,k} + Y'_{\beta,k}) + \alpha_\beta \dot{\omega}_{\beta,k} \quad (3.2.19)$$

L'équation de transport de l'espèce k en grandeurs moyennes Eq. (3.2.9) peut s'écrire sous la forme non conservative telle que :

$$\begin{aligned} \alpha_\beta \rho_\beta (\partial_t \bar{Y}_{\beta,k} + \bar{\mathbf{u}}_\beta \cdot \nabla \bar{Y}_{\beta,k}) &= \alpha_\beta \rho_\beta D_{\beta,k} \nabla^2 \bar{Y}_{\beta,k} + \rho_\beta D_{\beta,k} \nabla \cdot \langle \mathbf{n}_{\beta\sigma} Y'_{\beta,k} \delta_{\beta\sigma} \rangle \\ &- \langle \mathbf{n}_{\beta\sigma} \cdot (\rho_\beta Y_{\beta,k} (\mathbf{u}_\beta - \mathbf{w}) - \rho_\beta D_{\beta,k} \nabla Y_{\beta,k}) \delta_{\beta\sigma} \rangle \\ &+ \langle \mathbf{n}_{\beta\sigma} \cdot (\rho_\beta (\mathbf{u}_\beta - \mathbf{w})) \delta_{\beta\sigma} \rangle \bar{Y}_{\beta,k} \\ &+ \alpha_\beta \bar{\omega}_{\beta,k} - \nabla \cdot (\alpha_{\beta,k} \rho_\beta \overline{Y'_{\beta,k} \mathbf{u}'_\beta}) \end{aligned} \quad (3.2.20)$$

En soustrayant l'équation Eq. (3.2.19) de l'équation Eq. (3.2.20) on obtient l'équation locale pour les fluctuations :

$$\begin{aligned} \rho_\beta (\partial_t Y'_{\beta,k} + \mathbf{u}_\beta \cdot \nabla Y'_{\beta,k} + \mathbf{u}'_\beta \cdot \nabla \bar{Y}_{\beta,k}) &= \rho_\beta D_{\beta,k} \nabla^2 Y'_{\beta,k} + \alpha_\beta^{-1} \rho_\beta D_{\beta,k} \nabla \cdot \langle \mathbf{n}_{\beta\sigma} Y'_{\beta,k} \delta_{\beta\sigma} \rangle \\ &- \alpha_\beta^{-1} \langle \mathbf{n}_{\beta\sigma} \cdot (\rho_\beta Y_{\beta,k} (\mathbf{u}_\beta - \mathbf{w}) - \rho_\beta D_{\beta,k} \nabla Y_{\beta,k}) \delta_{\beta\sigma} \rangle \\ &+ \alpha_\beta^{-1} \langle \mathbf{n}_{\beta\sigma} \cdot (\rho_\beta (\mathbf{u}_\beta - \mathbf{w})) \delta_{\beta\sigma} \rangle \bar{Y}_{\beta,k} \\ &+ \alpha_\beta^{-1} \nabla \cdot (\alpha_{\beta,k} \rho_\beta \overline{Y'_{\beta,k} \mathbf{u}'_\beta}) \end{aligned} \quad (3.2.21)$$

3.2. Changement d'échelle

Ensuite, en utilisant la décomposition en valeur moyenne et fluctuations pour la fraction massique $Y_{\beta,k}$, la linéarité de l'opérateur de moyenne et les propriétés de la fonction caractéristique, l'équation précédente peut s'écrire sous la forme :

$$\begin{aligned} \rho_\beta (\partial_t Y'_{\beta,k} + \mathbf{u}_\beta \cdot \nabla Y'_{\beta,k} + \mathbf{u}'_\beta \cdot \nabla \bar{Y}_{\beta,k}) &= \rho_\beta D_{\beta,k} \nabla^2 Y'_{\beta,k} + \alpha_\beta^{-1} \rho_\beta D_{\beta,k} \nabla \cdot \langle \mathbf{n}_{\beta\sigma} Y'_{\beta,k} \delta_{\beta\sigma} \rangle \\ &\quad - \alpha_\beta^{-1} \rho_\beta D_{\beta,k} \nabla \alpha_\beta \cdot \nabla \bar{Y}_{\beta,k} \\ &\quad + \alpha_\beta^{-1} \langle \mathbf{n}_{\beta\sigma} \cdot (\rho_\beta Y'_{\beta,k} (\mathbf{u}_\beta - \mathbf{w}) - \rho_\beta D_{\beta,k} \nabla Y'_{\beta,k}) \delta_{\beta\sigma} \rangle \\ &\quad + \alpha_\beta^{-1} \nabla \cdot (\alpha_{\beta,k} \rho_\beta \overline{Y'_{\beta,k} \mathbf{u}'_\beta}) \end{aligned} \quad (3.2.22)$$

L'équation locale de transport pour les fluctuations peut être simplifiée à partir d'une analyse d'ordre de grandeur de ses différents termes. Ce type d'analyse est très fréquemment utilisé dans la littérature (cf. [33]). Pour cela, il est nécessaire, dans un premier temps, d'estimer les fluctuations de la fraction massique $Y'_{\beta,k}$ par :

$$Y'_{\beta,k} = O\left(\frac{l_\beta}{L_\beta} \bar{Y}_{\beta,k}\right) \quad (3.2.23)$$

On rappelle ici les approximations classiques (cf. paragraphe 2.2.2) :

$$\mathbf{u}'_\beta = O(\bar{\mathbf{u}}_\beta) \quad (3.2.24)$$

$$\langle \mathbf{n}_{\beta\sigma} \gamma_\beta \delta_{\beta\sigma} \rangle = \frac{A_{\beta\sigma}}{\mathcal{V}} = O\left(\frac{\alpha_\beta}{l_\beta}\right) \quad (3.2.25)$$

À partir des approximations Eqs. (3.2.24) à (3.2.25), on obtient les ordres de grandeur suivants :

$$\rho_\beta D_{\beta,k} \nabla^2 Y'_{\beta,k} = O\left(\frac{\rho_\beta D_{\beta,k}}{l_\beta L_\beta} \bar{Y}_{\beta,k}\right) \quad (3.2.26)$$

$$\rho_\beta C_{p,\beta} \mathbf{u}_\beta \cdot \nabla Y'_{\beta,k} = O\left(\rho_\beta C_{p,\beta} \frac{1}{L_\beta} \bar{Y}_{\beta,k} \bar{\mathbf{u}}_\beta\right) \quad (3.2.27)$$

$$\alpha_\beta^{-1} \rho_\beta D_{\beta,k} \nabla \cdot \langle Y'_{\beta,k} \mathbf{n}_{\beta\sigma} \delta_{\beta\sigma} \rangle = O\left(\frac{\rho_\beta D_{\beta,k}}{L_\beta^2} \bar{Y}_{\beta,k}\right) \quad (3.2.28)$$

$$\alpha_\beta^{-1} \nabla \cdot (\alpha_{\beta,k} \rho_\beta C_{p,\beta} \overline{Y'_{\beta,k} \mathbf{u}'_\beta}) = O\left(\rho_\beta C_{p,\beta} \frac{l_\beta}{L_\beta^2} \bar{Y}_{\beta,k} \bar{\mathbf{u}}_\beta\right) \quad (3.2.29)$$

A partir des estimations précédentes et de la contrainte du changement d'échelle $l_\beta \ll L_\beta$, on déduit :

$$\alpha_\beta^{-1} \rho_\beta D_{\beta,k} \nabla \cdot \langle Y'_{\beta,k} \mathbf{n}_{\beta\sigma} \delta_{\beta\sigma} \rangle \ll \rho_\beta D_{\beta,k} \nabla^2 Y'_{\beta,k} \quad (3.2.30)$$

$$\alpha_\beta^{-1} \nabla \cdot (\alpha_{\beta,k} \rho_\beta C_{p,\beta} \overline{Y'_{\beta,k} \mathbf{u}'_\beta}) \ll \rho_\beta C_{p,\beta} \mathbf{u}_\beta \cdot \nabla Y'_{\beta,k} \quad (3.2.31)$$

Ainsi, à partir de Eqs (3.2.30) et (3.2.31), l'équation locale de transport des fluctuations, $Y'_{\beta,k}$ se simplifie en :

$$\begin{aligned} \rho_\beta (\partial_t Y'_{\beta,k} + \mathbf{u}_\beta \cdot \nabla Y'_{\beta,k} + \mathbf{u}'_\beta \cdot \nabla \bar{Y}_{\beta,k}) &= \rho_\beta D_{\beta,k} \nabla^2 Y'_{\beta,k} \\ &\quad + \alpha_\beta^{-1} \langle \mathbf{n}_{\beta\sigma} \cdot (\rho_\beta Y'_{\beta,k} (\mathbf{u}_\beta - \mathbf{w}) - \rho_\beta D_{\beta,k} \nabla Y'_{\beta,k}) \delta_{\beta\sigma} \rangle \end{aligned} \quad (3.2.32)$$

D'autre part, en introduisant la décomposition en valeur moyenne et fluctuations dans la relation de saut Eq. (3.1.8), la relation de saut aux interfaces $A_{\beta\sigma}$ relative aux fluctuations de la fraction massique s'écrit :

$$\begin{aligned} \mathbf{n}_{\beta\sigma} \cdot (-\rho_\beta Y'_{\beta,k} (\mathbf{u}_\beta - \mathbf{w}) + \rho_\beta D_{\beta,k} \nabla Y'_{\beta,k}) &= \\ -\mathbf{n}_{\beta\sigma} \cdot (-\rho_\beta \bar{Y}_{\beta,k} (\mathbf{u}_\beta - \mathbf{w}) + \rho_\beta D_{\beta,k} \nabla \bar{Y}_{\beta,k}) + \nu_{\sigma,k} W_k \psi (\bar{Y}_{\beta,O_2} + Y'_{\beta,O_2}) \end{aligned} \quad (3.2.33)$$

On rappelle que les équations de transport Eq. (3.2.32) ainsi que la condition limite associée Eqs. (3.2.33) doivent être complétées par les conditions initiales et des conditions limites à l'entrée et à la sortie du milieu considéré pour que le problème local associé aux fluctuations $Y'_{\beta,k}$ soit bien posé. Sur la base de la discussion présentée dans le chapitre précédent, le volume élémentaire représentatif sera assimilé à une cellule unitaire périodique.

3.3 Fermeture des équations filtrées

3.3.1 Proposition de fermeture pour les fluctuations

Le problème lié aux équations gouvernant l'évolution des fluctuations n'est pas homogène en $Y'_{\beta,k}$ puisqu'il dépend des termes $\nabla \bar{Y}_{\beta,k}$, $\bar{Y}_{\beta,k}|_{\mathbf{x}_p}$ et $\bar{Y}_{\beta,O_2}|_{\mathbf{x}_p}$ avec $1 \leq p \leq N_V$. Sous l'hypothèse de séparation des échelles, ces termes peuvent être considérés constants au sein du volume de la prise de moyenne. Ainsi, ils peuvent être vus comme des termes source macroscopiques responsables des fluctuations [75, 90, 104].

Dans ce chapitre, nous nous limitons aux fermetures quasi-stationnaires (cf. 2.3.1), et ce, en supposant que même si le transfert à l'échelle macroscopique est instationnaire, le problème local pour les fluctuations peut être traité de manière quasi-stationnaire. Pour cela, le terme d'instationnaire dans l'équation de transport des fluctuations $Y'_{\beta,k}$ Eq. (3.2.32) sera négligé par rapport au terme de diffusion, ce qui revient à imposer la contrainte suivante [21, 105] :

$$\frac{D_{\beta,k} t_c}{l_\beta^2} \gg 1 \quad (3.3.1)$$

où t_c représente le temps caractéristique associé au processus étudié. Sous l'hypothèse de quasi-stationnarité, les fluctuations peuvent être représentées sous la forme [104] :

$$Y'_{\beta,k}|_{\mathbf{x}} = \sum_{p=1}^{N_V} a_{k,p}|_{\mathbf{x}} \bar{Y}_{\beta,k}|_{(\mathbf{x}_p,t)} + \sum_{p=1}^{N_V} a_{k_o,p}|_{\mathbf{x}} \bar{Y}_{\beta,O_2}|_{(\mathbf{x}_p,t)} + \mathbf{b}_k|_{\mathbf{x}} \cdot \nabla \bar{Y}_{\beta,k}|_{(\mathbf{x},t)} \quad (3.3.2)$$

Les termes $a_{k,p}$, $a_{k_o,p}$ et \mathbf{b}_k représentent les variables de fermeture et permettent de relier les fluctuations des fractions massiques aux variables macroscopiques. Ces inconnues sont solutions des problèmes aux limites locaux, appelés problèmes de fermeture. Ils sont résolus à l'échelle locale sur une région représentative du milieu considéré. La représentation précédente des fluctuations peut s'écrire sous la forme :

$$\begin{aligned} Y'_{\beta,k}|_{\mathbf{x}} &= a_k|_{\mathbf{x}} \bar{Y}_{\beta,k}|_{(\mathbf{x},t)} + a_{k_o}|_{\mathbf{x}} \bar{Y}_{\beta,O_2}|_{(\mathbf{x},t)} + \mathbf{b}_k|_{\mathbf{x}} \cdot \nabla \bar{Y}_{\beta,k}|_{(\mathbf{x},t)} \\ &+ \sum_{p=1}^{N_V} a_{k,p}|_{\mathbf{x}} (\bar{Y}_{\beta,k}|_{(\mathbf{x}_p,t)} - \bar{Y}_{\beta,k}|_{(\mathbf{x},t)}) + \sum_{p=1}^{N_V} a_{k_o,p}|_{\mathbf{x}} (\bar{Y}_{\beta,O_2}|_{(\mathbf{x}_p,t)} - \bar{Y}_{\beta,O_2}|_{(\mathbf{x},t)}) \end{aligned} \quad (3.3.3)$$

où a_k et a_{k_o} représentent les variables de fermeture *lumped*. Sur la base des discussions menées dans le chapitre 2, nous nous limitons ici à une représentation *lumped* des fluctuations, ainsi les deux derniers termes dans l'équation Eq. (3.3.3) seront négligés dans la suite de ce travail. Cette hypothèse revient à négliger les échanges indirects entre les particules (cf. chapitre 2). D'autre part, nous rappelons que le terme proportionnel au gradient de $\bar{Y}_{\beta,k}$ dans l'équation précédente se traduit par des effets de la tortuosité dans les équations macroscopique (cf. [60]). Or, il s'agit dans ce travail d'un mélange dilué de gaz-particules dont la taille des particules ne dépasse pas $100\mu m$ tel que les effets de la tortuosité peuvent être négligés. Par conséquent, nous négligerons, dans la suite, le terme proportionnel au gradient de $\bar{Y}_{\beta,k}$ dans l'approximation du problème micro-macro. Sous ces hypothèses la représentation des fluctuations devient :

$$Y'_{\beta,k} = a_k \bar{Y}_{\beta,k} + a_{k_o} \bar{Y}_{\beta,O_2} \quad (3.3.4)$$

3.3. Fermeture des équations filtrées

Notons que, dans la suite des développements, les fluctuations de la fraction massique d'oxydant seront exprimées sous la forme :

$$Y'_{\beta, O_2} = s_o \bar{Y}_{\beta, k} \quad (3.3.5)$$

où $s_o (= a_o + a_{o_o})$ représente le variable de fermeture qui relie les fluctuations Y'_{β, O_2} à $\bar{Y}_{\beta, k}$. Afin d'obtenir les problèmes de fermeture pour chaque variable, nous remplaçons, dans un premier temps, les fluctuations par l'expression précédente dans le problème local pour les fluctuations. Par la suite, ces termes sont considérés indépendants et de variation négligeable sur le volume de prise de moyenne, sous l'hypothèse de séparation des échelles. On peut ainsi isoler les termes proportionnels à chacun des termes sources macroscopiques pour formuler les problèmes de fermeture associés aux variables de fermeture a_k et a_{k_o} . Notons que lors de l'introduction des représentations Eq. (3.3.4) dans le problème local pour les fluctuations, nous adopterons l'approximation classique [104, 105] :

$$\nabla Y'_{\beta, k} \simeq \nabla a_k \bar{Y}_{\beta, k} + \nabla a_{k_o} \bar{Y}_{\beta, O_2} \quad (3.3.6)$$

Cette approximation consiste à négliger les termes de couplage entre les problèmes de fermeture. En suivant la démarche détaillée dans le paragraphe précédent, on obtient les deux problèmes de fermeture suivants :

Problème I :

$$\rho_\beta (\mathbf{u}_\beta \cdot \nabla a_k) = \rho_\beta D_{\beta, k} \nabla^2 a_k \quad (3.3.7)$$

$$+ \alpha_\beta^{-1} \langle \mathbf{n}_{\beta\sigma} \cdot (\rho_\beta a_k (\mathbf{u}_\beta - \mathbf{w}) - \rho_\beta D_{\beta, k} \nabla a_k) \delta_{\beta\sigma} \rangle$$

$$\mathbf{n}_{\beta\sigma} \cdot (-\rho_\beta a_k (\mathbf{u}_\beta - \mathbf{w}) + \rho_\beta D_{\beta, k} \nabla a_k) = \mathbf{n}_{\beta\sigma} \cdot \rho_\beta (\mathbf{u}_\beta - \mathbf{w}) \quad \text{sur } A_{\beta\sigma} \quad (3.3.8)$$

$$\langle \gamma_\beta a_k \rangle = 0 \quad (3.3.9)$$

$$a_k(\mathbf{x} + \mathbf{r}_i) = a_k(\mathbf{x}) \quad \text{sur } A_{\beta e} \quad (3.3.10)$$

Problème II :

$$\rho_\beta (\mathbf{u}_\beta \cdot \nabla a_{k_o}) = \rho_\beta D_{\beta, k} \nabla^2 a_{k_o} \quad (3.3.11)$$

$$+ \alpha_\beta^{-1} \langle \mathbf{n}_{\beta\sigma} \cdot (\rho_\beta a_{k_o} (\mathbf{u}_\beta - \mathbf{w}) - \rho_\beta D_{\beta, k} \nabla a_{k_o}) \delta_{\beta\sigma} \rangle$$

$$\mathbf{n}_{\beta\sigma} \cdot (-\rho_\beta a_{k_o} (\mathbf{u}_\beta - \mathbf{w}) + \rho_\beta D_{\beta, k} \nabla a_{k_o}) = \nu_{\sigma, k} W_k \psi (1 + a_{k_o}) \quad \text{sur } A_{\beta\sigma} \quad (3.3.12)$$

$$\langle \gamma_\beta a_{k_o} \rangle = 0 \quad (3.3.13)$$

$$a_{k_o}(\mathbf{x} + \mathbf{r}_i) = a_{k_o}(\mathbf{x}) \quad \text{sur } A_{\beta e} \quad (3.3.14)$$

Le problème associé à la variable de fermeture s_o qui relie les fluctuations de Y'_{β, O_2} à \bar{Y}_{β, O_2} , s'obtient directement en sommant les problèmes de fermeture I et II.

Problème I_o :

$$\rho_\beta (\mathbf{u}_\beta \cdot \nabla s_o) = \rho_\beta D_{\beta, O_2} \nabla^2 s_o \quad (3.3.15)$$

$$+ \alpha_\beta^{-1} \langle \mathbf{n}_{\beta\sigma} \cdot (\rho_\beta s_o (\mathbf{u}_\beta - \mathbf{w}) - \rho_\beta D_{\beta, O_2} \nabla s_o) \delta_{\beta\sigma} \rangle$$

$$\mathbf{n}_{\beta\sigma} \cdot (-\rho_\beta s_o (\mathbf{u}_\beta - \mathbf{w}) + \rho_\beta D_{\beta, O_2} \nabla s_o) = \mathbf{n}_{\beta\sigma} \cdot \rho_\beta (\mathbf{u}_\beta - \mathbf{w}) \quad (3.3.16)$$

$$+ \nu_{\sigma, O_2} W_{O_2} \psi (1 + s_o) \quad \text{sur } A_{\beta\sigma}$$

$$\langle \gamma_\beta s_o \rangle = 0 \quad (3.3.17)$$

$$s_o(\mathbf{x} + \mathbf{r}_i) = s_o(\mathbf{x}) \quad \text{sur } A_{\beta e} \quad (3.3.18)$$

Ici, la condition de périodicité portant sur les fluctuations à été imposée à l'entrée et à la sortie du milieu et nous avons eu recours à la condition de moyenne nulle. Cette condition est nécessaire pour résoudre les problèmes de fermeture. Étant donné l'hypothèse de quasi-stationnarité des problèmes de fermeture, les conditions initiales ne jouent aucun rôle. Par conséquent, elles ne figurent pas dans les problèmes de fermeture.

3.3.2 Forme fermée des équations macroscopiques

La forme fermée des équations macroscopiques s'obtient en remplaçant les fluctuations dans les équations Eq. (3.2.16), (3.2.17) et (3.2.18) par leurs expressions en fonction des variables de fermeture et des termes sources macroscopiques Eq. (3.3.4).

Forme fermée de l'équation de conservation de la masse à l'échelle macro On rappelle que l'équation de conservation de la masse de la particule p Eq. (3.2.18), s'écrit :

$$\dot{m}_p = \nu_{\sigma,s} W_s \psi \int_{A_p} (\bar{Y}_{\beta,O_2} + Y'_{\beta,O_2}) dS \quad (3.3.19)$$

En introduisant la représentation Eq. (3.3.5) pour Y'_{β,O_2} dans l'équation précédente et en négligeant les variations de la fraction massique macroscopique sur la surface de la particule A_p , on obtient :

$$\dot{m}_p = \nu_{\sigma,s} W_s \psi \bar{Y}_{\beta,O_2} \int_{A_p} (1 + s_o) dS \quad (3.3.20)$$

La forme fermée de l'équation de la conservation de masse de la particule p peut s'écrire sous la forme :

$$\dot{m}_p = \nu_{\sigma,s} W_s \psi_{eff} \bar{Y}_{\beta,O_2} A_p \quad (3.3.21)$$

où ψ_{eff} représente le taux effectif de la réaction hétérogène, défini par :

$$\psi_{eff} = \frac{\psi}{A_p} \int_{A_p} (1 + s_o) dS \quad (3.3.22)$$

D'autre part, on note que la fermeture du taux de consommation des particules permet d'obtenir directement la forme fermée de l'équation macroscopique de conservation de la masse dans la phase continue qui s'écrit sous la forme :

$$\partial_t (\alpha_\beta \rho_\beta) + \nabla \cdot (\alpha_\beta \rho_\beta \bar{\mathbf{u}}_\beta) = - \sum_{p=1}^{N_V} g(\mathbf{x} - \mathbf{x}_p) \dot{m}_p \quad (3.3.23)$$

Forme fermée de l'équation de transport des espèces à l'échelle macro On rappelle que l'équation de transport macroscopique non fermée pour l'espèce k s'écrit :

$$\begin{aligned} \underbrace{\partial_t (\alpha_\beta \rho_\beta \bar{Y}_{\beta,k})}_{\text{accumulation}} + \underbrace{\nabla \cdot (\alpha_\beta \rho_\beta \bar{Y}_{\beta,k} \bar{\mathbf{u}}_\beta)}_{\text{convection}} &= \underbrace{\nabla \cdot (\alpha_\beta \rho_\beta D_{\beta,k} \nabla \bar{Y}_{\beta,k} + \rho_\beta D_{\beta,k} \langle \mathbf{n}_{\beta\sigma} Y'_{\beta,k} \delta_{\beta\sigma} \rangle)}_{\text{diffusion}} \\ &+ \underbrace{\frac{\nu_{\sigma,k} W_k}{\nu_{\sigma,s} W_s} \sum_{p=1}^{N_V} g(\mathbf{x} - \mathbf{x}_p) \dot{m}_p}_{\text{échange interfacial}} + \underbrace{\alpha_\beta \bar{\dot{\omega}}_{\beta,k}}_{\text{réaction homogène}} \\ &- \underbrace{\nabla \cdot (\alpha_{\beta,k} \rho_\beta \bar{Y}'_{\beta,k} \mathbf{u}'_\beta)}_{\text{dispersion}} \end{aligned} \quad (3.3.24)$$

L'introduction de la représentation Eq. (3.3.4) pour les fluctuations $Y'_{\beta,k}$ dans les termes de diffusion de l'équation précédente conduit à l'expression :

$$\begin{aligned} \alpha_\beta \rho_\beta D_{\beta,k} \nabla \bar{Y}_{\beta,k} + \rho_\beta D_{\beta,k} \langle \mathbf{n}_{\beta\sigma} Y'_{\beta,k} \delta_{\beta\sigma} \rangle &= \rho_\beta D_{\beta,k} (\alpha_\beta \nabla \bar{Y}_{\beta,k}) \\ &+ \rho_\beta D_{\beta,k} (\langle a_k \mathbf{n}_{\beta\sigma} \delta_{\beta\sigma} \rangle \bar{Y}_{\beta,k} + \langle a_{k_o} \mathbf{n}_{\beta\sigma} \delta_{\beta\sigma} \rangle \bar{Y}_{\beta,O_2}) \end{aligned} \quad (3.3.25)$$

3.3. Fermeture des équations filtrées

De même, en introduisant la représentation pour $Y'_{\beta,k}$ dans le terme de dispersion de Eq. (3.3.24), on obtient :

$$\nabla \cdot \left(\alpha_{\beta,k} \rho_{\beta} \overline{Y'_{\beta,k} \mathbf{u}'_{\beta}} \right) = \nabla \cdot \left(\alpha_{\beta,k} \rho_{\beta} \overline{\mathbf{u}'_{\beta} a_k Y_{\beta,k}} \right) + \nabla \cdot \left(\alpha_{\beta,k} \rho_{\beta} \overline{\mathbf{u}'_{\beta} a_{kO} Y_{\beta,O_2}} \right) \quad (3.3.26)$$

La forme fermée de l'équation de transport de l'espèce k dans la phase β , s'écrit :

$$\begin{aligned} & \partial_t (\alpha_{\beta} \rho_{\beta} \overline{Y_{\beta,k}}) + \nabla \cdot (\alpha_{\beta} \rho_{\beta} (\overline{Y_{\beta,k}} (\overline{\mathbf{u}}_{\beta} - \mathbf{U}_{\beta,k}) - \overline{Y_{\beta,O_2}} \mathbf{V}_{\beta,kO})) \\ & = \nabla \cdot (\alpha_{\beta} \rho_{\beta} D_{\beta,k} \nabla \overline{Y_{\beta,k}}) + \frac{1}{\mathcal{V}} \frac{\nu_{\sigma,k} W_k}{\nu_{\sigma,s} W_s} \sum_{p=1}^{N_{\nu}} g(\mathbf{x}_p - \mathbf{x}) \dot{m}_p + \alpha_{\beta} \overline{\dot{\omega}_{\beta,k}} \end{aligned} \quad (3.3.27)$$

où on a introduit les coefficients de transport effectifs suivants :

$$\mathbf{U}_{\beta,k} = \alpha_{\beta}^{-1} D_{\beta,k} \langle a_k \mathbf{n}_{\beta\sigma} \delta_{\beta\sigma} \rangle - \overline{a_k \mathbf{u}'_{\beta}} \quad (3.3.28)$$

$$\mathbf{V}_{\beta,kO} = \alpha_{\beta}^{-1} D_{\beta,k} \langle a_{kO} \mathbf{n}_{\beta\sigma} \delta_{\beta\sigma} \rangle - \overline{a_{kO} \mathbf{u}'_{\beta}} \quad (3.3.29)$$

Les coefficients de transport effectifs $\mathbf{U}_{\beta,k}$ et $\mathbf{V}_{\beta,kO}$ sont assimilés à des vitesses supplémentaires de transport pour les fractions massiques macroscopiques de l'espèce k et de l'oxydant. Leur contribution s'écrit sous une forme similaire au terme convectif classique dans l'équation de transport macroscopique de l'espèce k . Ces deux coefficients seront appelés respectivement pseudo-vitesse et pseudo-vitesse couplée. Nous noterons que pour l'équation de transport de l'oxydant les pseudo-vitesse et pseudo-vitesse couplée peuvent être regroupées, et dans ce cas, la pseudo-vitesse est définie par :

$$\mathbf{U}_{\beta,O_2} = \alpha_{\beta}^{-1} D_{\beta,O_2} \langle s_o \mathbf{n}_{\beta\sigma} \delta_{\beta\sigma} \rangle - \overline{s_o \mathbf{u}'_{\beta}} \quad (3.3.30)$$

Simplification du modèle macroscopique A ce stade des développements, l'ensemble de la méthode permettant d'obtenir les équations macroscopiques régissant les transferts massiques à été présentée. Cependant, les modèles macroscopique Eqs. (3.3.21), (3.3.23) et (3.3.27) proposé comprennent des termes de transport non-classiques qui traduisent une description plus précise du transport macroscopique et des couplages entre les deux phases. En revanche, la forme complète du modèle est complexe et le nombre des coefficients effectifs à déterminer est plus élevé que celui des modèles classiques. D'un point de vue pratique, les termes de transport non-classiques rendent le traitement des équations de transport macroscopique relativement complexe pour des problèmes relatifs à la sûreté. Pour cela, nous nous appuyons sur l'analyse réalisée dans le chapitre précédent et nous négligeons les termes de couplage supplémentaires. Sous ces hypothèses, le modèle macroscopique des transferts massiques présente alors une forme similaire à celle proposée par les modèles classiques :

$$\begin{aligned} \partial_t (\alpha_{\beta} \rho_{\beta} \overline{Y_{\beta,k}}) + \nabla \cdot (\alpha_{\beta} \rho_{\beta} \overline{Y_{\beta,k}} \overline{\mathbf{u}}_{\beta}) & = \nabla \cdot (\alpha_{\beta} \rho_{\beta} D_{\beta,k} \nabla \overline{Y_{\beta,k}}) + \frac{\nu_{\sigma,k} W_k}{\nu_{\sigma,s} W_s} \sum_{p=1}^{N_{\nu}} g(\mathbf{x} - \mathbf{x}_p) \dot{m}_p \\ & \quad + \alpha_{\beta} \overline{\dot{\omega}_{\beta,k}} \end{aligned} \quad (3.3.31)$$

$$\partial_t (\alpha_{\beta} \rho_{\beta}) + \nabla \cdot (\alpha_{\beta} \rho_{\beta} \overline{\mathbf{u}}_{\beta}) = - \sum_{p=1}^{N_{\nu}} g(\mathbf{x} - \mathbf{x}_p) \dot{m}_p \quad (3.3.32)$$

$$\dot{m}_p = \nu_{\sigma,s} W_s \psi_{eff} \overline{Y_{\beta,O_2}} A_p \quad (3.3.33)$$

avec

$$\psi_{eff} = \frac{\psi}{A_p} \int_{A_p} (1 + s_o) dS, \quad (3.3.34)$$

Les termes qui apparaissent dans le membre de droite de l'équation de transport des espèces Eq. (3.3.31) correspondent respectivement à la diffusion massique d'espèce k dans la phase continue, aux transferts

des espèces avec les particules et au taux de réaction homogène. Dans les équations de conservation de masse dans la phase continue Eq. (3.3.32), le terme du membre de droite représente les échanges de masse avec la phase dispersée par oxydation des particules. Enfin, Le taux de transfert de masse de la particule vers la phase continue Eq. (3.3.33) est exprimé en fonction du taux effectif de la réaction hétérogène. Nous notons que nous avons négligé dans ce travail les effets de la tortuosité et de la dispersion hydrodynamique dans le tenseur de diffusion effectif, ainsi que les effets des pseudo-vitesses dans l'équation de transport des espèces. Par conséquent, la forme finale du modèle macroscopique proposée dans ce travail est similaire au modèle macroscopique classique utilisé pour les simulations détaillées des transferts de masse dans un écoulement diphasique dilué en régime laminaire. En revanche, le modèle proposé prend en compte les effets de dilution dans le calcul du coefficient effectif de la réaction hétérogène, et cela à partir de la résolution du problème de fermeture associé à la variable s_o sur le volume représentatif du milieu étudié.

3.4 Résultats et discussion

3.4.1 Résultats pour une particule isolée

Afin de déterminer une expression analytique du taux effectif d'avancement de la réaction hétérogène, nous nous intéressons à la résolution du problème de fermeture pour une particule dans une cellule représentative d'un milieu ayant une structure géométrique sphérique (*i.e.* cellule de Chang 3D). Nous supposons que la vitesse de la phase continue est uniforme et que la particule se déplace à la même vitesse que la phase continue. De plus, nous négligeons la vitesse de déplacement de l'interface dans le repère en mouvement par rapport à la vitesse de diffusion. Cette hypothèse est soutenue par le fait que la masse volumique de la phase continue est négligeable devant celle de la particule.

Sous ces hypothèses, le problème de fermeture s'écrit, dans le repère en mouvement et en coordonnées sphériques, sous la forme :

$$\frac{1}{r^2} \frac{d}{dr} (r^2 s_o) - \frac{1}{\alpha_\beta \mathcal{V}} \int_{s_p} \nabla s_o \cdot \mathbf{n}_{\beta\sigma} dS = 0 \quad \text{pour } r_p \leq r \leq R \quad (3.4.1)$$

$$\frac{ds_o}{dr} = \frac{\mathcal{D}_a}{r_p} (1 + s_o) \quad \text{en } r = r_p \quad (3.4.2)$$

$$\frac{ds_o}{dr} = 0 \quad \text{en } r = R \quad (3.4.3)$$

$$\int_{r_p}^R 4\pi r^2 s_o dr = 0 \quad (3.4.4)$$

où on a utilisé la fonction de poids classique (*cf.* Eq. (1.2.58)) et où on a remplacé la condition de périodicité aux frontières de la cellule par une condition de Neumann (*cf.* 2.5.1).

Dans l'équation Eq. (3.4.2), le nombre sans dimension \mathcal{D}_a désigne le nombre de Damköhler qui compare la vitesse de réaction hétérogène à la vitesse de diffusion, défini par :

$$\mathcal{D}_a = \frac{|\nu_{\sigma, O_2}| W_{O_2} \psi}{\rho_\beta D_{\beta, O_2}} r_p \quad (3.4.5)$$

En suivant la même méthodologie détaillée dans la partie 2.5.1, la solution analytique du problème de fermeture conduit au taux effectif d'avancement suivant :

$$\psi_{eff} = \frac{\psi}{1 + (1 - f(\alpha_\beta)) \mathcal{D}_a} \quad (3.4.6)$$

où $f(\alpha_\beta)$ est défini par :

$$f(\alpha_\beta) = \frac{9(1 - \alpha_\beta)^{1/3} + 3\alpha_\beta + 6\alpha_\beta^2 - 9}{5\alpha_\beta^2} \quad (3.4.7)$$

3.4. Résultats et discussion

Les variations de la fonction f en fonction de α_β sont illustrées dans la figure (3.3). La fonction f tend vers 0 lorsque $\alpha_\beta \rightarrow 1$, ainsi le taux effectif pour une particule isolée dans un milieu infini s'écrit :

$$\lim_{\alpha \rightarrow 1} \psi_{eff} = \frac{\psi}{1 + \mathcal{D}_a} \quad (3.4.8)$$

Cette valeur limite peut également être obtenue à partir de l'approche classique qui consiste à résoudre le problème de la couche limite massique pour une particule isolée dans un milieu infini (*cf.* annexe D).

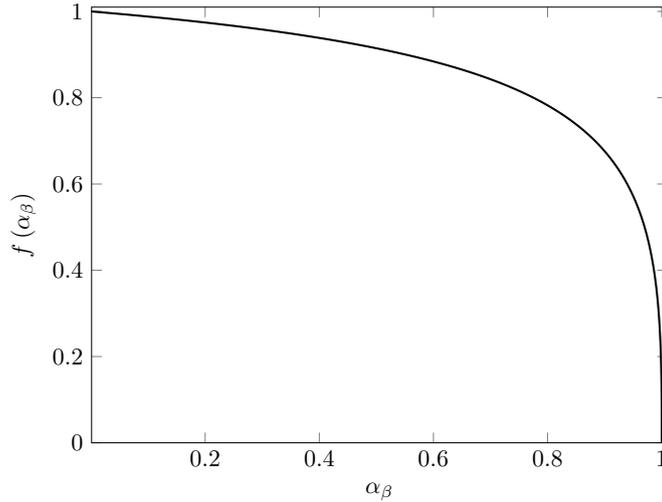


FIGURE 3.3 – Évolution de f en fonction de la fraction volumique de la phase continue

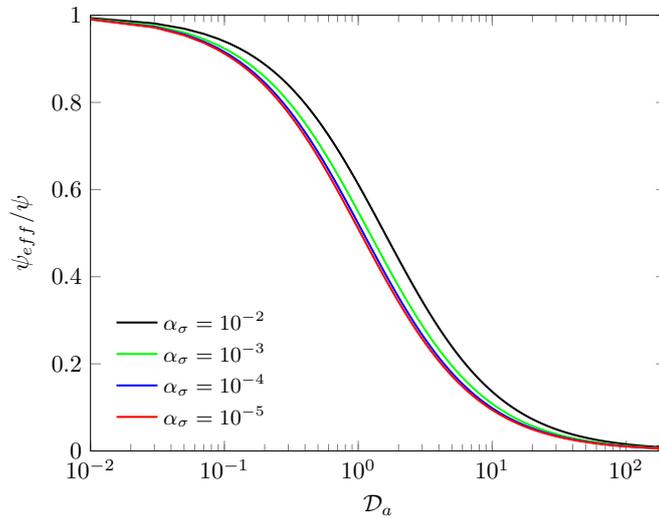


FIGURE 3.4 – Evolution du taux effectif d'avancement de la réaction en fonction du nombre de Damköhler

Les résultats liés à l'évolution du coefficient effectif d'avancement sont présentés sur la figure (3.4) sous la forme adimensionnelle $\psi_{eff}f/\psi$ en fonction de \mathcal{D}_a , pour des valeurs de fraction volumique de la phase dispersée α_σ de 10^{-2} , 10^{-3} , 10^{-4} et 10^{-5} .

On peut constater que ψ_{eff}/ψ est une fonction décroissante du nombre de Damköhler. Elle tend vers 1 à petit nombre de Damköhler et vers zéro lorsque $\mathcal{D}_a \rightarrow \infty$. D'autre part, on observe aussi que pour un nombre de Damköhler donné, le coefficient ψ_{eff}/ψ diminue de manière limitée avec la fraction volumique α_σ pour la gamme considérée.

L'étude de l'évolution de ψ_{eff}/ψ par rapport au nombre de Damköhler suffit pour retrouver le comportement classique du taux effectif de consommation de la particule au régime réactif $\mathcal{D}_a \ll 1$. En effet, on retrouve bien la valeur classique $\psi_{eff} = \psi$ qui traduit que lorsque la vitesse de diffusion est très rapide par rapport à la vitesse de réaction, la consommation de la particule est entièrement contrôlée par la réaction. En revanche, cette étude ne fournit pas de renseignement sur le comportement du taux effectif de consommation de la particule en régime diffusif ($\mathcal{D}_a \gg 1$). En effet, le coefficient de Damköhler \mathcal{D}_a , défini par la relation Eq. (3.4.5), est proportionnel à ψ ce qui ne permet pas de déduire des conclusions sur le coefficient effectif ψ_{eff} à grand nombre de Damköhler.

Pour cela, nous nous sommes inspirés de Guo *et al.* [60] pour introduire le nombre de Damköhler effectif \mathcal{D}_a^* défini par :

$$\mathcal{D}_a^* = \frac{\psi_{eff}}{\psi} \mathcal{D}_a \quad (3.4.9)$$

Ce nombre sans dimension est analogue au nombre de Sherwood puisqu'il compare le transfert total de masse à la surface de la particule et les transferts par diffusion. La figure (3.5) montre que \mathcal{D}_a^* est une fonction croissante de \mathcal{D}_a et qu'en régime diffusif, le coefficient \mathcal{D}_a^* admet une asymptote horizontale dont la valeur de la constante augmente avec la fraction volumique α_σ .

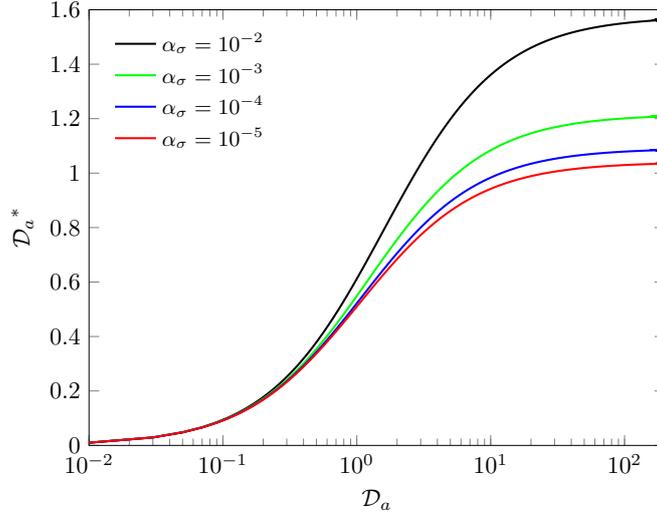


FIGURE 3.5 – Evolution du taux effectif d'avancement de la réaction en fonction du nombre de Damköhler effectif

A partir de la définition de \mathcal{D}_a^* et de l'équation Eq. (3.4.6), on peut montrer que :

$$\lim_{\mathcal{D}_a \rightarrow \infty} \mathcal{D}_a^* = \frac{1}{1 - f(\alpha_\beta)} \quad (3.4.10)$$

Ainsi, dans le régime diffusif le taux effectif d'avancement de la réaction s'écrit :

$$\psi_{eff} = \frac{1}{1 - f(\alpha_\beta)} \frac{\psi}{\mathcal{D}_a} = \frac{1}{1 - f(\alpha_\beta)} \frac{\rho_\beta D_{\beta, O_2}}{|\nu_{\sigma, O_2}| W_{O_2} r_p} \quad (3.4.11)$$

La relation précédente traduit le comportement classique du taux effectif d'avancement de la réaction en régime diffusif $\mathcal{D}_a \gg 1$, où la vitesse de la réaction est très grande par rapport à la vitesse de la

3.4. Résultats et discussion

diffusion. Par conséquent, la consommation de la particule ne dépend plus de la vitesse d'avancement de la réaction vu qu'elle est entièrement contrôlée par la diffusion de l'oxydant jusqu'à la surface de la particule.

3.4.2 Evaluation de la fermeture quasi-stationnaire

Les différents travaux sur la combustion des particules de carbone [17, 49, 62, 79, 80] ont permis de comprendre les caractéristiques de combustion d'une particule sphérique. Les premières études ont été effectuées analytiquement par [79] pour une particule isolée dans un mélange gazeux au repos. Afin de tester la validité du modèle proposé, nous présentons dans ce paragraphe une comparaison entre les résultats obtenus à partir du modèle macroscopique proposé et les résultats analytiques obtenus par Libby et Blake [79] ainsi que ceux obtenus numériquement par Man et Byeong [62]. Ces derniers ont résolu de manière directe le problème du transfert massique et thermique à l'échelle microscopique. Dans ces études, le mélange gazeux est constitué de O_2 , CO , CO_2 et N_2 avec le même coefficient de diffusion D_β . Par ailleurs, le nombre de Schmidt est supposé égal à 1, ce qui signifie que $\rho_\beta D_\beta = \eta_\beta$, où η_β correspond à la viscosité dynamique du fluide environnant supposée constante. D'autre part, le système Fig. (3.6) est considéré infini dans toutes les directions, ainsi, les gradients des fractions massiques moyennes $\bar{Y}_{\beta,k}$ sont considérés nuls.

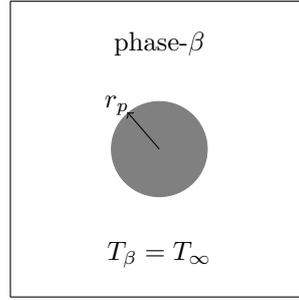


FIGURE 3.6 – Particule de carbone isolée

Au regard des hypothèses précédentes, les équations macroscopiques s'écrivent :

$$\frac{d(\rho_\beta \bar{Y}_{\beta,k})}{dt} = \frac{1}{\mathcal{V}} \frac{\nu_{\sigma,k} W_k}{\nu_{\sigma,s} W_s} \dot{m}_p \quad (3.4.12)$$

$$\frac{d\rho_\beta}{dt} = -\frac{1}{\mathcal{V}} \dot{m}_p \quad (3.4.13)$$

$$\dot{m}_p = \nu_{\sigma,s} W_s \psi_{eff} \bar{Y}_{\beta,O_2} A_p \quad (3.4.14)$$

Le taux effectif d'avancement de la réaction ψ_{eff} correspond ici au taux effectif pour une particule isolée dans un milieu infini. A partir des relations Eqs. (3.4.5), (3.4.6) et (3.4.8), il s'écrit sous la forme :

$$\psi_{eff} = \frac{\psi}{1 + \frac{|\nu_{\sigma,O_2}| W_{O_2} B \exp\left(-\frac{T_a}{T_p}\right)}{\rho_\beta D_\beta} r_p} \quad (3.4.15)$$

où B et T_a représentent respectivement la constante pré-exponentielle et la température d'activation de la réaction hétérogène. Les transferts massique décrits par les équations Eqs. (3.4.12) à (3.4.14) sont complétés par l'équation d'évolution de la température du particule. Au regard des hypothèses précédentes, ces équations s'écrivent :

$$(mc_p)_p \frac{dT_p}{dt} = Q_{\beta p} = 4\pi\lambda_\beta r_p (\bar{T}_\beta - T_p) + \dot{m}_p \Delta H_v \quad (3.4.16)$$

où ΔH_v est l'enthalpie de la réaction. Afin de comparer les résultats obtenus à partir du modèle macroscopique et ceux proposés dans la littérature [79], nous introduisons le paramètre sans dimension suivant :

$$K = \frac{r_p}{\eta_\beta} \frac{1}{S} \dot{m}_p \quad (3.4.17)$$

Ce nombre sans dimension est fondamental dans l'étude analytique réalisée par Libby et Blake. Sous l'hypothèse du nombre de Schmidt égal à 1 (*i.e.* $\eta_\beta = \rho_\beta D_\beta$), le paramètre K apparaît ici comme un nombre analogue au Damköhler effectif \mathcal{D}_a^* défini par la relation (3.4.9), puisque les deux nombres comparent le transfert total de masse lié à la réaction hétérogène et à la diffusion. On peut montrer, à partir des définitions de K et \mathcal{D}_a^* , la relation :

$$K = \frac{\nu_{\sigma,s} W_s}{|\nu_{\sigma,O_2}| W_{O_2}} \bar{Y}_{\beta,O_2} \mathcal{D}_a^* \quad (3.4.18)$$

La figure (3.7) décrit l'évolution du paramètre K en fonction de la température de la particule, les conditions aux limites et initiales ainsi que les paramètres utilisés pour la validation du modèle macroscopique sont reportés dans le tableau (3.1) .

Paramètres	d_0	T_0	Y_{β,O_2}	Y_{β,N_2}	ν_β	ρ_σ	T_a	B
Valeurs	2.10^{-4}	1500	0,2	0,8	$5.65.10^{-5}$	1500	18000	3.610^6

TABLE 3.1 – Paramètres physiques de l'étude

Dans la figure (3.7) sont comparés les résultats obtenus à partir du modèle macroscopique et les résultats de Libby et Blake. On peut identifier trois régimes : le régime réactif, un régime intermédiaire et le régime diffusif. On peut également constater que le modèle proposé concorde bien avec le modèle de Libby et Blake pour les deux premiers régimes, le régime diffusif présente, quant à lui, une erreur relative de 10% pour ces deux modèles.

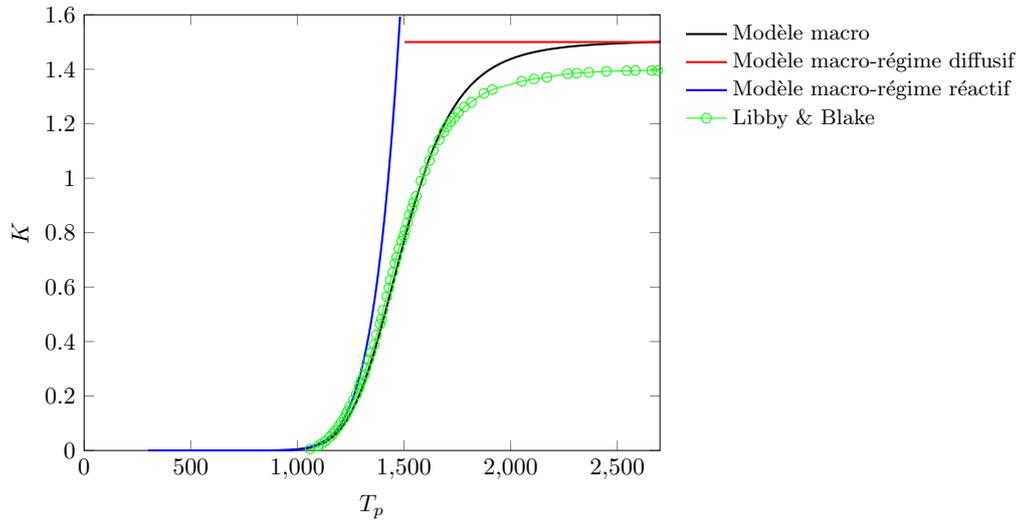


FIGURE 3.7 – Evolution du coefficient de transfert de masse K en fonction de T_p

Les figures (3.8) et (3.9) représentent respectivement l'évolution du diamètre et de la température de la particule en fonction du temps adimensionné $\tau^* = \frac{\rho_\beta D_\beta}{\rho_p \tau_{p,0}^2} t$. Ces résultats montrent que les

3.4. Résultats et discussion

valeurs du modèle macroscopique proposé dans ce chapitre sont en très bon accord avec les valeurs de référence. Ces figures montrent également un comportement typique des particules en combustion : La première phase ($\tau^* < 1.25$) correspond au réchauffement de la particule par conduction où il n'y a pas d'activité chimique significative et donc pas de changement de diamètre. La deuxième phase ($1.25 < \tau^* < 3.75$), la plus longue, implique une montée en température rapide à un niveau supérieur à celui de la phase continue, niveau qui persiste pendant une période prolongée jusqu'à la troisième phase correspondant à l'équilibre thermique. Cette dernière, correspond au régime diffusif et à partir des équations Eqs. (3.4.14) et (3.4.11), on peut montrer que l'évolution du diamètre de la particule suit la loi d_p^2 :

$$\frac{d}{dt} \left(\frac{d_p^2}{4} \right) = 2 \frac{\nu_{\sigma,s} W_s}{|\nu_{\sigma,O_2}| W_{O_2}} \frac{\rho_\beta D_{\beta,O_2} \bar{Y}_{\beta,O_2}}{\rho_\beta} = Cst \quad (3.4.19)$$

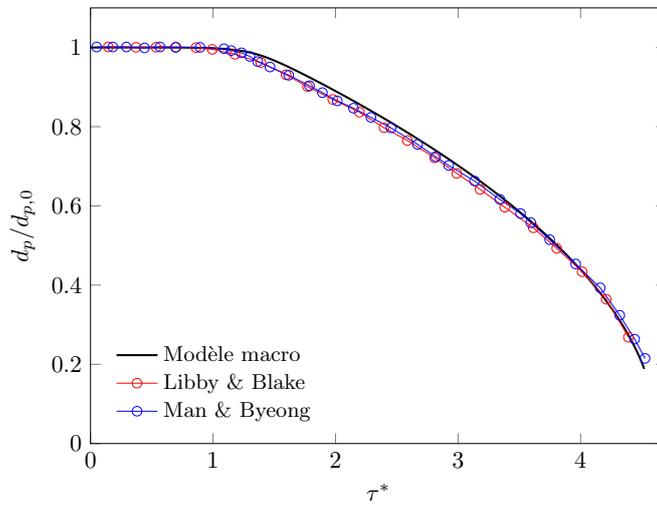


FIGURE 3.8 – Evolution du diamètre de la particule en fonction du temps adimensionnalisé

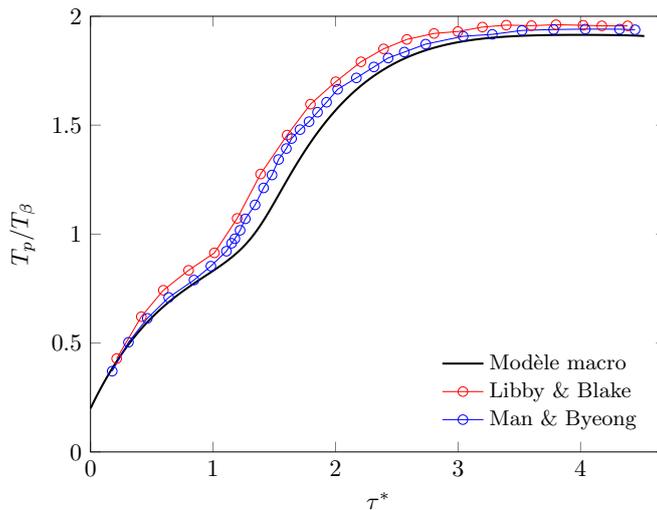


FIGURE 3.9 – Evolution de la température de la particule en fonction du temps adimensionnalisé

Afin de confirmer l'hypothèse de quasi-stationnarité, nous indiquons ici que la figure (3.8) montre que la durée de vie de la particule est de l'ordre de τ^* . Ainsi on obtient le temps caractéristique associé au processus de combustion d'une particule de graphite :

$$t_c \approx \frac{\rho_p r_{p,0}^2}{\rho_\beta D_{\beta,O_2}} \quad (3.4.20)$$

Par ailleurs, les échelles des variations microscopiques dans la phase continue sont du même ordre de grandeur que la taille caractéristique des particules, ce qui permet d'écrire :

$$\frac{D_{\beta,k} t_c}{l_\beta^2} \approx \frac{\rho_p r_{p,0}^2}{\rho_\beta l_\beta^2} \approx \frac{\rho_p}{\rho_\beta} \gg 1 \quad (3.4.21)$$

De même, la validité de l'hypothèse de quasi-stationnarité des fluctuations de la température T'_β peut être confirmée dans le cas où le nombre de Lewis ($Le = (\lambda_\beta / \rho_\beta C_{p,\beta}) / D_{\beta,k}$) est de l'ordre de l'unité, de sorte que :

$$\frac{\lambda_\beta t_c}{(\rho_\beta c_p)_\beta l_\beta^2} \approx \frac{\lambda_\beta}{D_{\beta,O_2}} \frac{r_{p,0}^2}{l_\beta^2} \frac{\rho_p}{\rho_\beta} \approx \frac{\rho_p}{\rho_\beta} \gg 1 \quad (3.4.22)$$

3.5 Conclusion

Dans ce chapitre, nous avons proposé un modèle macroscopique pour décrire les transferts massiques des particules de carbone qui s'oxydent selon la théorie du film unique. Le changement d'échelle est réalisé à partir de la méthode de prise de moyenne volumique où une approximation quasi-stationnaire *lumped* du problème mixte macro-micro a été adoptée. Cela a conduit à une forme fermée des équations macroscopiques dans laquelle les coefficients effectifs de transport sont calculés à partir de la résolution du problème de fermeture.

L'utilisation de la cellule de Chang a permis de déterminer analytiquement le taux d'avancement de la réaction en fonction du taux de dilution. La validation de l'approche utilisée a été réalisée à partir d'une comparaison entre les résultats théoriques et ceux de la littérature pour une particule dans un milieu infini. Cette étude de validation montre que le modèle macroscopique produit de bons résultats malgré l'hypothèse de quasi stationnarité.

Le taux de transfert de masse de la particule vers la phase continue par oxydation, obtenu dans ce chapitre, sera utilisé dans la modélisation de la propagation de flamme dans un nuage de particules de carbone.

Chapitre 4

Simulations de flammes laminaires diphasiques

Sommaire

4.1	Flammes gazeuses	92
4.1.1	Rappels sur la structure des flammes laminaires planes	92
4.1.2	Solution analytique	95
4.1.3	Simulations mono-dimensionnelles	98
4.2	Flammes diphasiques	102
4.2.1	Configuration et allumage	102
4.2.2	Choix du filtre	103
4.2.3	Détermination de la vitesse du front de flamme	106
4.2.4	Caractéristiques des flammes	108
4.3	Conclusions	112

L'étude des flammes laminaires planes de prémélange permet de caractériser les propriétés de combustion intrinsèques du mélange gazeux comme la température adiabatique de flamme, l'épaisseur du front de flamme ou la vitesse de propagation du front. Ce type d'étude permet par exemple de développer et valider des schémas cinétiques détaillés ou simplifiés [98]. La simulation des flammes laminaires planes peut également être motivée par le développement de modèles pour la combustion turbulente en régime de flammelette qui assimilent une flamme de prémélange turbulente à un ensemble de flammes prémélangées mono-dimensionnelles. Il s'agit, par exemple, des modèles s'appuyant sur une tabulation de la cinétique chimique ou, comme dans le cadre de ce travail, des modèles de type G-équation à vitesse de flamme. Dans ce dernier cas, la vitesse de flamme laminaire apparaît comme l'une des données d'entrée du modèle de vitesse de flamme turbulente. En pratique, celle-ci est généralement tabulée en fonction de différents paramètres, notamment la richesse du mélange gazeux, la température des gaz frais et la pression, sur la base de simulations utilisant un schéma réactionnel détaillé ou simplifié.

Comme nous l'avons signalé dans l'introduction, la démarche suivie dans ce travail pour les flammes diphasiques s'inspire directement de la démarche adoptée pour les flammes gazeuses dans le cadre des modèles à vitesse de flamme. Il s'agit donc ici, au travers de simulations Euler-Lagrange, de déterminer la vitesse d'une flamme laminaire diphasique plane en fonction des caractéristiques du mélange gazeux (richesse, ...) et des poussières de graphite (chargement, diamètre, ...). Parmi les hypothèses adoptées, les simulations s'appuient sur un schéma cinétique à une étape pour la combustion du monoxyde de carbone et sur une modélisation de type Fick pour les flux de masse des différentes espèces. Ces hypothèses simplificatrices sont testées dans une première partie dédiée aux flammes gazeuses afin de comparer les résultats obtenus pour la vitesse de flamme avec les données de la littérature. On s'intéresse dans une deuxième partie aux flammes diphasiques avec une première étude dédiée aux

effets des caractéristiques du filtre sur les profils de température et de concentration dans le front de flamme et sur la vitesse de combustion. Une étude de sensibilité est ensuite menée afin d'estimer l'influence du chargement et du diamètre de particule sur la vitesse de combustion. Cette étude est réalisée en adoptant les fermetures classiques pour les termes d'échange. Sur la base des fermetures proposées dans les chapitres précédents, une première étude tenant compte de la fraction volumique dans les termes d'échange est également présentée. L'ensemble des calculs présentés dans cette partie sont réalisés à partir du logiciel P²REMICS développé à l'IRSN.

4.1 Flammes gazeuses

On rappelle dans cette partie, avant d'aborder les flammes diphasiques, quelques caractéristiques des flammes laminaire de prémélange planes 1D non étirées. L'intérêt principal de cette partie réside dans la définition de la vitesse de flamme laminaire et dans la présentation de la configuration adoptée pour nos simulations. Une première étude visant à estimer les prédictions des simulations où on s'intéresse à l'influence de la richesse du mélange sur la vitesse de combustion est également présentée à la fin de cette partie.

4.1.1 Rappels sur la structure des flammes laminaires planes

Dans la configuration des flammes de prémélange, le combustible et l'oxydant sont initialement mélangés avant de réagir. Une flamme de prémélange, représentée schématiquement sur la figure (4.1) est caractérisée par l'existence d'un front de flamme mince d'épaisseur δ_L séparant les gaz frais des gaz brûlés et se propageant à une vitesse s_L ¹.

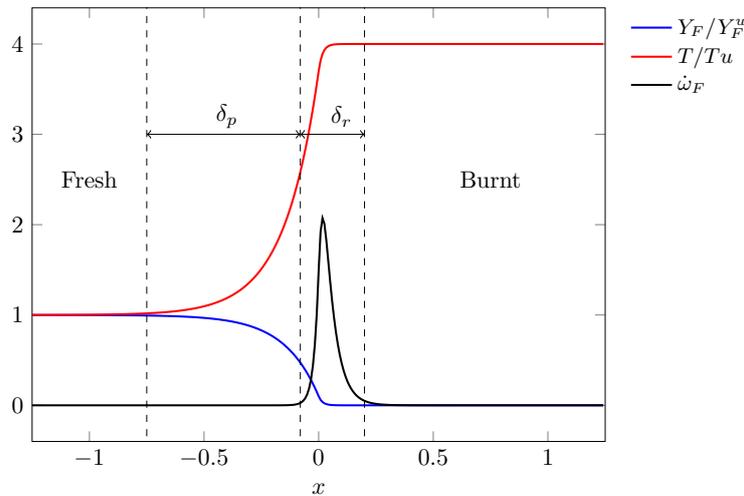


FIGURE 4.1 – Représentation schématique de la structure d'une flamme de prémélange laminaire 1D

Deux zones distinctes sont classiquement identifiées dans le front de flamme, il s'agit de la zone de préchauffage et de la zone de réaction illustrées schématiquement sur la figure (4.1). La zone de préchauffage, d'épaisseur δ_p , est caractérisée par des forts gradients de température et de concentration. Dans cette zone, les termes réactifs sont négligeables devant les termes de diffusion et la température s'élève progressivement jusqu'à atteindre la température d'inflammation du mélange. La zone de réaction, d'épaisseur plus faible δ_r , est caractérisée par une élévation brutale de la température. Dans

1. Nous avons conservé les notations classiques, l'indice L fait référence à une flamme laminaire

4.1. Flammes gazeuses

cette zone, les termes réactifs sont prépondérants devant les termes de diffusion et les produits de combustion sont formés.

Une caractérisation plus quantitative de la flamme dépend de la nature et des caractéristiques du mélange gazeux. En particulier, la richesse du mélange est un paramètre important dans la caractérisation des flammes de prémélange. La richesse ϕ du mélange est définie comme le rapport des fractions massiques de combustible (noté F) et d'oxydant (noté O) dans le mélange sur le rapport des fractions massiques stoechiométrique :

$$\phi = \left(\frac{Y_F}{Y_O}\right) \left(\frac{Y_F}{Y_O}\right)_{st}^{-1} = \nu_{st} \left(\frac{Y_F}{Y_O}\right) \quad (4.1.1)$$

Le ratio ν_{st} correspond au coefficient stoechiométrique massique, il est défini sur la base du schéma réactionnel global :



Le coefficient stoechiométrique massique est alors défini par

$$\nu_{st} = \left(\frac{Y_O}{Y_F}\right)_{st} = \frac{\nu'_O W_O}{\nu'_F W_F} \quad (4.1.3)$$

Lorsque $\phi < 1$ le mélange contient plus d'oxydant que de combustible, il est dit pauvre. Dans le cas inverse, lorsque $\phi > 1$, le mélange contient plus de combustible que d'oxydant et il est dit riche. Dans le cas d'une combustion pauvre, le combustible est entièrement consommé et une certaine proportion d'oxydant reste présente dans les gaz chauds. Dans le cas d'une combustion riche, tout le combustible n'a pas réagi et une certaine proportion de combustible imbrûlé est présente dans les gaz chauds.

Les équations décrivant l'évolution d'une flamme de prémélange laminaire plane correspondent aux équations du modèle multi-constituants réactif à faible nombre de Mach présenté précédemment et sont rappelées ici dans le cas mono-dimensionnel :

$$\partial_t \rho + \partial_x (\rho u) = 0 \quad (4.1.4)$$

$$\partial_t (\rho Y_k) + \partial_x (\rho u Y_k) = -\partial_x (\rho Y_k V_k) + \dot{\omega}_k \quad (4.1.5)$$

$$\partial_t (\rho h) + \partial_x (\rho u h) = \partial_x (\lambda \partial_x T) - \partial_x \sum_{k=1}^{N_e} (\rho Y_k V_k h_k) + \dot{\omega}_T \quad (4.1.6)$$

$$\partial_t (\rho u) + \partial_x (\rho u^2) = -\partial_x p + \partial_x (\mu \partial_x u) \quad (4.1.7)$$

où h correspond à l'enthalpie sensible du mélange, V_k est la vitesse de diffusion de l'espèce k dans le mélange et où $\dot{\omega}_T$ représente la quantité de chaleur dégagée par les réactions :

$$\dot{\omega}_T = -\sum_{k=1}^{N_e} \Delta h_{f,k}^0 \dot{\omega}_k \quad (4.1.8)$$

On rappelle que l'on a adopté pour simplifier une loi de Fick pour les vitesses de diffusion et une hypothèse d'équi-diffusivité des espèces, c'est-à-dire :

$$Y_k V_k = -D_k \partial_x Y_k = -D \partial_x Y_k \quad (4.1.9)$$

Si on suppose de plus que le nombre de Lewis Le , construit à partir de la chaleur spécifique du mélange, est égal à l'unité, c'est-à-dire $\lambda = \rho c_p D$, les équations Eqs. (4.1.4)-(4.1.6) s'écrivent :

$$\partial_t \rho + \partial_x (\rho u) = 0 \quad (4.1.10)$$

$$\partial_t (\rho Y_k) + \partial_x (\rho u Y_k) = \partial_x (\rho D \partial_x Y_k) + \dot{\omega}_k \quad (4.1.11)$$

$$\partial_t (\rho h) + \partial_x (\rho u h) = \partial_x \left(\frac{\lambda}{c_p} \partial_x h \right) + \dot{\omega}_T \quad (4.1.12)$$

$$\partial_t (\rho u) + \partial_x (\rho u^2) = -\partial_x p + \partial_x (\mu \partial_x u) \quad (4.1.13)$$

Dans le cas stationnaire, la vitesse u est déterminée par l'équation de conservation de la masse Eq. (4.1.10) et l'équation Eq. (4.1.13) est nécessaire uniquement pour déterminer le champ de pression. En introduisant le changement de variable $\xi = x - s_a t$, où s_a est la vitesse de translation² du front par rapport à un repère fixe, le système précédent s'écrit dans le repère lié au front d'une flamme en régime stationnaire sous la forme :

$$-s_a \partial_\xi \rho + \partial_\xi (\rho u) = 0 \quad (4.1.14)$$

$$-s_a \partial_\xi (\rho Y_k) + \partial_\xi (\rho u Y_k) = \partial_\xi (\rho D \partial_\xi Y_k) + \dot{\omega}_k \quad (4.1.15)$$

$$-s_a \partial_\xi (\rho h) + \partial_\xi (\rho u h) = \partial_\xi \left(\frac{\lambda}{c_p} \partial_\xi h \right) + \dot{\omega}_T \quad (4.1.16)$$

L'intégration de l'équation de conservation de la masse entre les gaz frais ξ_u et les gaz brûlés ξ_b conduit à la relation suivante pour la vitesse du front s_a :

$$s_a (\rho_u - \rho_b) = \rho_u u_u - \rho_b u_b \quad (4.1.17)$$

La vitesse de déplacement du front s_d est définie comme la vitesse du front relativement à la vitesse des gaz et est donc donnée par³ :

$$s_d = -(s_a - u) \quad (4.1.18)$$

Pour une flamme plane non étirée, la vitesse de flamme s_L est définie comme la vitesse du front relativement à la vitesse des gaz frais et correspond donc à la relation précédente en posant $u = u_u$:

$$s_L = -(s_a - u_u) = \frac{\rho_b u_u - \rho_b u_b}{\rho_b - \rho_u} \quad (4.1.19)$$

De la même manière, en intégrant l'équation de conservation de la masse de l'espèce k , on retrouve l'expression de la vitesse de consommation :

$$s_L = \frac{1}{\rho_u (Y_k^b - Y_k^u)} \int_{\xi_u}^{\xi_b} \dot{\omega}_k d\xi \quad (4.1.20)$$

Lorsque $k \equiv F$, cette relation se simplifie encore pour un mélange pauvre ou stoechiométrique puisque dans ce cas $Y_F^b = 0$. Finalement, on peut écrire la relation suivante entre s_d et s_L en intégrant l'équation de conservation de la masse Eq. (4.1.14) entre ξ et ξ_u :

$$\rho s_d = \rho_u s_L \quad (4.1.21)$$

On rappelle que le taux de réaction de l'espèce k est défini par :

$$\dot{\omega}_k = \sum_{j=1}^M \dot{\omega}_{kj} = W_k \sum_{j=1}^M \nu_{kj} \mathcal{Q}_j \quad (4.1.22)$$

où $\dot{\omega}_{kj}$ est le taux de réaction de l'espèce k relatif à la réaction j , $\nu_{kj} = \nu''_{kj} - \nu'_{kj}$, où ν''_{kj} et ν'_{kj} sont les coefficients stoechiométriques molaires de l'espèce k relatifs à la réaction j et où \mathcal{Q}_j est le taux d'avancement de la réaction j . Dans le cas d'une chimie à une étape de type Eq. (4.1.2), on a donc :

$$\dot{\omega}_k = W_k \nu_k \mathcal{Q} \quad (4.1.23)$$

2. Pour une flamme plane non étirée, les iso-surfaces du front se déplacent à la même vitesse et s_a ne dépend pas de l'iso-surface considérée

3. le repère utilisé ici correspond au repère fixe, dirigé vers les gaz brûlés

4.1. Flammes gazeuses

On peut donc écrire :

$$\dot{\omega}_T = - \sum_{k=1}^{N_e} \Delta h_{f,k}^0 \dot{\omega}_k = - \sum_{k=1}^{N_e} \Delta h_{f,k}^0 W_k \nu_k Q = -Q \dot{\omega}_F \quad (4.1.24)$$

où Q est la chaleur dégagée par la réaction Eq. (4.1.2) par unité de masse du combustible :

$$Q = \sum_{k=1}^{N_e} \Delta h_{f,k}^0 \frac{W_k \nu_k}{W_F \nu_F} \quad (4.1.25)$$

L'intégration de l'équation de conservation de l'énergie Eq. (4.1.16) entre les gaz frais ξ_u et les gaz brûlés ξ_b conduit ainsi à la relation :

$$\rho_u s_L (h_b - h_u) = -Q \int_{\xi_u}^{\xi_b} \dot{\omega}_F d\xi \quad (4.1.26)$$

On obtient ainsi à partir de la relation Eq. (4.1.20) l'expression suivante pour la température des gaz brûlés qui correspond ici à la température adiabatique de flamme :

$$T_b = \frac{c_p^u}{c_p^b} T_u + \frac{Q}{c_p^b} (Y_F^u - Y_F^b) \quad (4.1.27)$$

4.1.2 Solution analytique

On rappelle dans cette partie une solution analytique du problème dans le cas où la réaction se limite à un seul réactif et pour une fermeture linéaire du taux de réaction [48, 98]. Il s'agit ici de présenter une solution analytique qui représentera un cas de référence pour une première validation des simulations numériques. Le lecteur intéressé pourra se reporter à [98] pour une revue bibliographique des développements analytiques pour différents types de fermeture du taux de réaction et à [40] pour une extension au cas de deux réactifs. Le schéma réactionnel considéré ici s'écrit :



Ce type de réaction constitue un cas limite du schéma réactionnel Eq. (4.1.2) pour un mélange très pauvre, c'est-à-dire un mélange pour lequel le combustible est entièrement consommé et la fraction massique d'oxydant demeure quasi-inchangée dans les gaz brûlés [98]. Le cas limite s'obtient en posant $\nu'_O = 0$ et on doit avoir $\nu'_P W_P = \nu'_F W_F$ pour assurer la conservation de la masse, de sorte que $W_P = W_F$ pour la réaction unimolaire Eq. (4.1.28). Dans ces conditions, les équations décrivant l'évolution de la flamme s'écrivent :

$$\partial_t \rho + \partial_x (\rho u) = 0 \quad (4.1.29)$$

$$\partial_t (\rho Y_F) + \partial_x (\rho u Y_F) = \partial_x (\rho D \partial_x Y_F) + \dot{\omega}_F \quad (4.1.30)$$

$$\partial_t (\rho h) + \partial_x (\rho u h) = \partial_x \left(\frac{\lambda}{c_p} \partial_x h \right) - Q \dot{\omega}_F \quad (4.1.31)$$

Les équations Eqs. (4.1.30) et (4.1.31) peuvent s'écrire sous une autre forme en introduisant les variables réduites Y et Θ définies par :

$$Y = \frac{Y_F - Y_F^b}{Y_F^u - Y_F^b}, \quad \Theta = \frac{h - h_u}{h_b - h_u} \quad (4.1.32)$$

En pratique, la variable réduite Y peut aussi s'écrire ici Y/Y_F^u puisque pour une flamme pauvre $Y_F^b = 0$. A partir de l'expression Eq. (4.1.27) pour la température adiabatique de flamme, la variable réduite Θ s'écrit sous la forme équivalente :

$$\Theta = \frac{h - h_u}{Q(Y_F^u - Y_F^b)} \quad (4.1.33)$$

En introduisant les variables réduites, les équations Eqs. (4.1.30) et (4.1.31) s'écrivent ainsi sous la forme :

$$\partial_t(\rho Y) + \partial_x(\rho u Y) = \partial_x(\rho D \partial_x Y) + \dot{\omega}_F (Y_F^u - Y_F^b)^{-1} \quad (4.1.34)$$

$$\partial_t(\rho \Theta) + \partial_x(\rho u \Theta) = \partial_x\left(\frac{\lambda}{c_p} \partial_x \Theta\right) - \dot{\omega}_F (Y_F^u - Y_F^b)^{-1} \quad (4.1.35)$$

On rappelle que la forme Eq. (4.1.35) pour l'équation d'énergie, en particulier l'expression des termes de diffusion, correspond à un nombre de Lewis égal à l'unité, on obtient donc en sommant les équations précédentes l'équation de transport suivante pour $Y + \Theta$:

$$\partial_t(\rho(Y + \Theta)) + \partial_x(\rho u(Y + \Theta)) = \partial_x(\rho D \partial_x(Y + \Theta)) \quad (4.1.36)$$

Puisque par définition $Y + \Theta = 1$ aussi bien dans les gaz frais que dans les gaz brûlés, la solution stationnaire de Eq. (4.1.36) est donnée par :

$$Y + \Theta = 1 \quad (4.1.37)$$

Dans le cas instationnaire, Eq. (4.1.37) est aussi solution si la condition initiale vérifie $Y + \Theta = 1$. Ainsi, il suffit de résoudre uniquement l'équation pour la température réduite Θ , la variable Y est déduite de Eq. (4.1.37). L'expression du taux de réaction proposée dans [48] s'appuie sur une forme simplifiée du modèle d'Arrhenius qui peut s'écrire ici pour une réaction du premier ordre et dans le cas d'une flamme pauvre sous la forme :

$$\dot{\omega}_F = B \rho Y_F \exp\left(-\frac{T_a}{T}\right) \quad (4.1.38)$$

où B est le facteur pré-exponentiel et T_a la température d'activation. En introduisant les variables réduites Y et Θ , le taux de réaction s'écrit :

$$\dot{\omega}_F = B \rho (1 - \Theta) \exp\left(-\frac{\beta/\alpha}{1 - \alpha(1 - \Theta)}\right) \quad (4.1.39)$$

où α et β sont donnés par :

$$\alpha = \frac{h_b - h_u}{h_b}, \quad \beta = \alpha \frac{c_p T_a}{h_b} \quad (4.1.40)$$

La pression thermodynamique restant constante en espace pour le modèle bas Mach, on a ici dans le cas d'une réaction unimolaire $\rho_b T_b = \rho_u T_u$. Si on suppose que la chaleur spécifique du mélange reste constante, c'est-à-dire $c_p = c_p^u = c_p^b$, la masse volumique s'écrit alors en fonction de Θ sous la forme :

$$\rho = \rho_u \frac{1 - \alpha}{1 + \alpha(\Theta - 1)} \quad (4.1.41)$$

La forme simplifiée du taux de réaction s'appuie sur l'identification dans la flamme d'une zone de préchauffage où le terme réactif est négligeable et une zone de réaction où le terme réactif est prépondérant. Ces deux zones sont séparées par une température critique Θ_c mesurant l'importance relative de ces zones. A partir des relations Eqs. (4.1.39) et (4.1.41), le taux de réaction s'écrit comme une

4.1. Flammes gazeuses

fonction de Θ seulement et on peut estimer la température critique à partir du maximum de la fonction $\dot{\omega}_F(\Theta)$. En pratique $\beta \gg \alpha$ et on retrouve l'estimateur obtenu par une analyse asymptotique :

$$\Theta_c = 1 - \frac{1}{\alpha + \beta} \simeq 1 - \frac{1}{\beta} \quad (4.1.42)$$

La fermeture simplifiée du taux de réaction s'écrit alors :

$$\dot{\omega}_F = \rho R (1 - \Theta) H(\Theta - \Theta_c) \quad (4.1.43)$$

où H est la fonction de Heaviside et R une constante de calibration du modèle obtenue en pratique à partir de la définition Eq. (4.1.20) pour la vitesse de consommation. La solution du problème est donnée par la résolution de l'équation pour Θ rappelée ci-dessous sous forme non conservative dans le repère lié au front et en utilisant la relation Eq. (4.1.21) :

$$\rho_u s_L \partial_\xi \Theta = \partial_\xi \left(\frac{\lambda}{c_p} \partial_\xi \Theta \right) - \frac{\dot{\omega}_F}{Y_F^u} \quad (4.1.44)$$

L'équation Eq. (4.1.44) peut encore s'écrire sous une forme plus simple en utilisant la transformation s'appuyant sur l'estimateur de Zeldovich pour l'épaisseur de la zone de préchauffage δ_p :

$$\zeta = \int_0^\xi \frac{\lambda_u}{\lambda} \frac{1}{\delta_p} d\xi, \quad \delta_p = \frac{D_u}{s_L} = \frac{\lambda}{\rho_u c_p s_L} \quad (4.1.45)$$

On a alors $\partial_\xi = \delta_p^{-1} \partial_\zeta$ et l'équation pour la température réduite s'écrit :

$$\partial_\zeta \Theta = \partial_\zeta^2 \Theta - \Lambda \dot{\omega} \quad (4.1.46)$$

où Λ est le paramètre de flamme et $\dot{\omega}$ un taux de réaction réduit :

$$\Lambda = \frac{\lambda}{(\rho_u s_L)^2 c_p} \frac{\rho R}{Y_F^u}, \quad \dot{\omega} = (1 - \Theta) H(\Theta - \Theta_c) \quad (4.1.47)$$

La résolution analytique de Eq. (4.1.46) s'appuie sur l'hypothèse d'un paramètre de flamme Λ constant. L'hypothèse adoptée dans [48] consiste alors à poser $\lambda = \lambda_u T/T_u$ de manière à supprimer la dépendance en température introduite par ρ . Une solution alternative proposée dans [98] consiste à adopter une conductivité thermique constante $\lambda = \lambda_u$ et à remplacer ρ par ρ_u dans la définition Eq. (4.1.43) du taux de réaction :

$$\dot{\omega}_F = \rho_u R (1 - \Theta) H(\Theta - \Theta_c) \quad (4.1.48)$$

Dans les deux cas, la solution analytique est donnée par :

$$\Theta(\xi) = (1 - \beta^{-1}) \exp\left(\frac{\xi}{\delta_p}\right) \text{ pour } \xi \leq 0, \quad \Theta(\xi) = 1 - \beta^{-1} \exp\left(\frac{\Gamma \xi}{\delta_p}\right) \text{ pour } \xi > 0 \quad (4.1.49)$$

avec :

$$\Gamma = \frac{1}{2\delta_p} \left(1 - \sqrt{1 + 4 \frac{R\delta_p}{s_L}} \right) \quad (4.1.50)$$

La constante de calibration est déterminée à partir de la vitesse de consommation :

$$R = \beta(\beta - 1) \frac{s_L^2}{D_u} \quad (4.1.51)$$

4.1.3 Simulations mono-dimensionnelles

4.1.3.1 Configuration et allumage

Les simulations mono-dimensionnelles de flamme de prémélange sont menées sur un maillage uniforme de type mono-dimensionnel, c'est-à-dire comportant une seule maille dans les directions transverses au sens de propagation. La configuration des simulations correspond à un allumage au centre du domaine et un front de flamme se propageant librement vers les gaz frais dans le sens $x < 0$ et $x > 0$ sous l'effet de la dilatation des gaz brûlés derrière le front de flamme. En tenant compte de la symétrie du problème, le domaine de calcul correspond à celui illustré sur la figure (4.2) avec un allumage réalisé en fin de domaine pour $x \geq x_a$ et une flamme se propageant vers les gaz frais dans le sens $x < 0$.

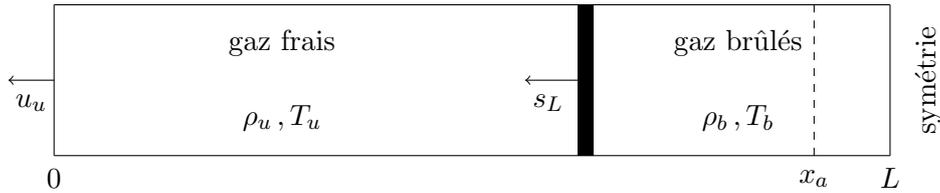


FIGURE 4.2 – Configuration des simulations mono-dimensionnelles de flamme de prémélange

Les conditions aux limites du côté des gaz brûlés correspondent à une condition de symétrie tandis que du côté des gaz frais les conditions aux limites correspondent à une condition libre de sortie. Cette dernière condition assure une pression thermodynamique constante au cours du temps. Les conditions initiales correspondent au type d'allumage utilisé :

- Le premier type d'allumage considéré, noté A1, est classique et consiste en un mélange initial constitué des gaz frais à la température T_u pour $x \leq x_a$ et une température $T_a \geq T_b$ dans la zone d'allumage pour $x > x_a$,
- Le deuxième type d'allumage, noté A2, est similaire mais consiste à calculer la température dans la zone d'allumage en fixant la température T_a uniquement dans le terme source d'Arrhenius.

4.1.3.2 Comparaison avec la solution analytique

On présente dans cette partie une première validation en comparant les résultats des simulations avec la solution analytique présentée précédemment. La vitesse de flamme étant connue, on s'intéresse ici à la qualité prédictive des simulations en fonction de différents paramètres (configuration de l'allumage, nombre de mailles dans l'épaisseur du front de flamme, ...).

Les équations résolues correspondent aux équations Eqs. (4.1.10)-(4.1.13) pour lesquelles on adopte les hypothèses suivantes correspondant à la solution analytique :

- Le mélange est constitué d'une seule espèce réactive, Y_F
- Les produits et les réactifs ont la même masse molaire, $W_F = W_P = W$
- La chaleur spécifique du mélange reste constante
- Les diffusivités massiques des réactifs et des produits sont égales
- Le taux de réaction est donné par la relation Eq. (4.1.48)

Les propriétés physiques utilisées sont regroupées dans le tableau (4.1), elles correspondent en ordre de grandeur aux propriétés physiques de la combustion stoechiométrique du monoxyde de carbone. Le taux de réaction étant donné par la relation Eq. (4.1.48), la conductivité thermique ne dépend pas de la température et est donc supposée constante. La constante de calibration de la relation Eq. (4.1.51) est déterminée pour $s_L = 0.1 \text{ m.s}^{-1}$. La longueur du domaine est fixée à $L = 0.01 \text{ m}$ et le pas d'espace est donné par $\delta_x = \delta_p/20$ où δ_p est la zone de préchauffage donnée par la relation Eq. (4.1.45). Pour les deux types d'allumage, la zone d'allumage est limitée à $2\delta_x$.

4.1. Flammes gazeuses

ρ_u (kg.m ⁻³)	c_p (J.kg ⁻¹ .K ⁻¹)	λ (W.m ⁻¹ .K ⁻¹)	W (kg.mol ⁻¹)	α	β
1.137	10 ³	0.026	28 10 ⁻³	0.86	10

TABLE 4.1 – Propriétés physiques utilisées pour les comparaisons avec la solution analytique de la propagation d’une flamme de prémélange

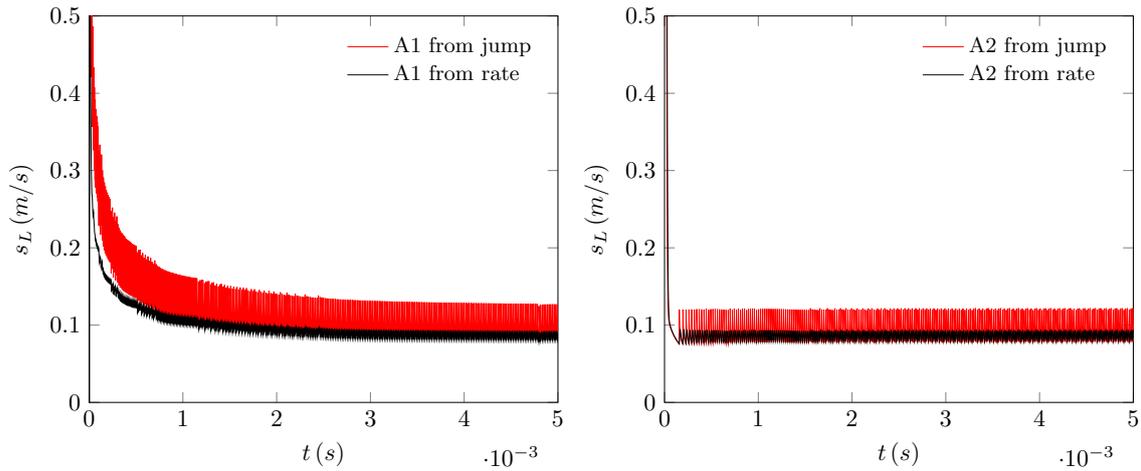


FIGURE 4.3 – Evolution de la vitesse de flamme s_L en fonction du temps déterminée à partir de la condition de saut Eq. (4.1.19) et par intégration du terme source Eq. (4.1.20) pour les deux types d’allumage

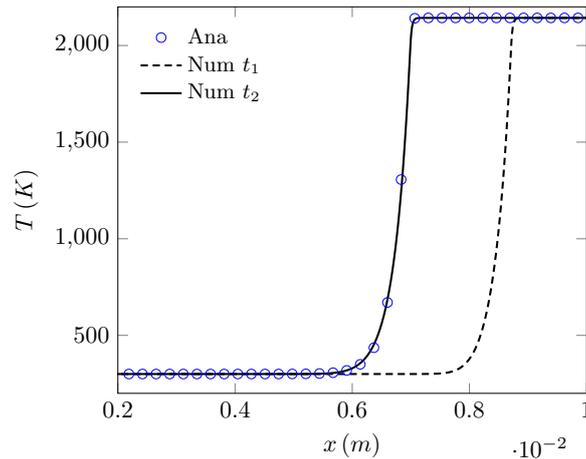


FIGURE 4.4 – Profil de température dans le front de flamme

Les vitesses de flamme estimées à partir de la condition de saut Eq. (4.1.19) et par intégration du terme source Eq. (4.1.20) sont reportées sur la figure (4.3) pour les deux types d’allumage. Dans les deux cas, des oscillations sont observées dues à la fonction de Heaviside utilisé pour l’expression simplifiée du taux de réaction. En pratique, l’amplitude des oscillations est proportionnelle au pas d’espace du

maillage mais la valeur moyenne reste proche de la valeur attendue $s_L = 0.1 \text{ m.s}^{-1}$. En revanche, le deuxième type d'allumage permet d'obtenir beaucoup plus rapidement un régime stationnaire. On vérifie également dans ce régime que la solution correspond bien à une onde progressive, par exemple pour le profil de température dans le front de flamme illustré sur la figure (4.4) on vérifie bien $T(x, t_2) = T(x - s_a(t_2 - t_1), t_1)$ où $s_a = s_L + u_f$ est la vitesse de l'onde progressive.

4.1.3.3 Prédications du schéma cinétique à une étape

Avant d'aborder la combustion de particules de graphite, on s'intéresse dans cette partie aux qualités prédictives du schéma cinétique utilisé pour la combustion du monoxyde de carbone. On s'intéresse en particulier à l'évolution de la vitesse laminaire de flamme en fonction de la richesse du mélange. L'ensemble des propriétés physiques utilisées sont regroupées dans le tableau (4.2).

c_p (J.kg ⁻¹ .K ⁻¹)	Pr	Sc	μ_0 (Pa.s)	T_0 (K)	T_1 (K)
10 ³	0.7	0.7	1.7 10 ⁻⁵	273	110.5

TABLE 4.2 – Propriétés physiques utilisées pour les prédictions du schéma cinétique à une étape

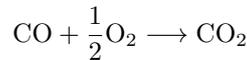
La chaleur spécifique du mélange est supposée constante en revanche, contrairement au cas précédent, les coefficients de diffusion thermique et massique sont fonction de la température. La conductivité thermique et le coefficient de diffusion massique sont évalués respectivement à partir d'un nombre de Prandtl constant Pr et d'un nombre de Schmidt constant Sc, avec $Sc = Pr$ sous l'hypothèse $Le = 1$:

$$\lambda = \frac{\mu c_p}{Pr}, \quad D = \frac{\mu}{\rho Sc} \quad (4.1.52)$$

où la viscosité du mélange gazeux est donnée par la loi de Sutherland :

$$\mu(T) = \mu_0 \frac{T_0 + T_1}{T + T_1} \left(\frac{T}{T_0} \right)^{1.5} \quad (4.1.53)$$

où μ_0 , T_0 et T_1 sont les coefficients de la loi. On rappelle que le schéma cinétique considéré s'identifie à l'équation de chimie globale :



Le schéma cinétique adopté correspond à celui proposé par Howard *et al.* [67] pour lequel la vapeur d'eau présente dans le mélange en faible quantité est considérée comme une espèce inerte jouant le rôle de catalyseur :

$$\dot{\omega} = B \left(\frac{\rho Y_{\text{CO}}}{W_{\text{CO}}} \right) \left(\frac{\rho Y_{\text{O}_2}}{W_{\text{O}_2}} \right)^{\frac{1}{2}} \left(\frac{\rho Y_{\text{H}_2\text{O}}}{W_{\text{H}_2\text{O}}} \right)^{\frac{1}{2}} \exp \left(\frac{-T_a}{T} \right) \quad (4.1.54)$$

Les valeurs adoptées pour le facteur pré-exponentiel et la température d'activation sont regroupées dans le tableau (4.3). Les enthalpies de formation molaires sont données par $\Delta h_{f,\text{CO}}^0 = -110.5 \text{ kJ.mol}^{-1}$ et $\Delta h_{f,\text{CO}_2}^0 = -393.5 \text{ kJ.mol}^{-1}$ [74] de sorte que la chaleur dégagée par la réaction correspond à $Q = 10^7 \text{ J.kg}^{-1}$.

Le mélange considéré pour la combustion du monoxyde de carbone dans l'air est donc constitué de cinq espèces, le combustible CO, l'oxydant O₂, le produit CO₂ ainsi que les deux inerts N₂ et H₂O.

4.1. Flammes gazeuses

B (kg.m ⁻³ .s ⁻¹)	T_a (K)	Q (J.kg ⁻¹)
1.3 10 ⁸	15098	10 ⁷

TABLE 4.3 – Paramètres associés au taux de réaction Eq. (4.1.54) de la réaction homogène

Afin de se comparer aux données de la littérature pour lesquelles une faible quantité de dihydrogène est également présente, on reprend ici la simplification adoptée dans la réduction des schémas cinétiques pour la combustion du monoxyde de carbone [116] consistant à définir une fraction molaire effective de vapeur d'eau comme la somme des fractions molaires de vapeur d'eau et de dihydrogène. Les simulations sont alors réalisées avec $f = 0.21$ et $g = 0.0285$ où f représente le facteur de dilution de l'oxygène dans l'air et g la proportion de vapeur d'eau et de dihydrogène dans le mélange combustible :

$$f = \frac{X_{O_2}}{X_{N_2} + X_{O_2}}, \quad g = \frac{X_{H_2O}}{X_{CO} + X_{H_2O}}$$

Sur la base de l'étude réalisée dans la section précédente, le type d'allumage A2 est retenu ici. Contrairement au cas de validation précédent pour lequel le taux de réaction était modélisé sur la base d'une fonction de Heaviside, la figure (4.5) montre qu'une expression classique suivant une loi d'Arrhenius conduit à un régime stationnaire pour la vitesse de flamme sans oscillations.

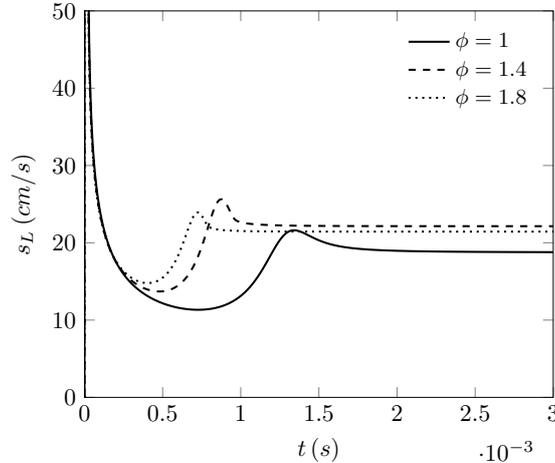


FIGURE 4.5 – Evolution de la vitesse de flamme s_L en fonction du temps après allumage pour le schéma cinétique à une étape

Les résultats des simulations sont comparés sur la figure (4.6) aux données expérimentales reportées dans [78, 116] pour quatre valeurs de fraction molaire de monoxyde de carbone $X_{CO} = 0.3, 0.4, 0.5$ et 0.6 pour $P = 1$ atm et $T = 300$ K. On présente également sur la figure (4.6) l'évolution de la vitesse laminaire de flamme en fonction de la richesse ϕ pour le même facteur de dilution $f = 0.21$ mais pour une fraction molaire de vapeur d'eau fixée $X_{H_2O} = 0.001$. Les résultats des simulations sont comparés aux données reportées dans [117] obtenues à partir d'un schéma réactionnel détaillé. Dans ce cas, à partir de la définition de la richesse, des facteurs de dilution f et g et de la conservation de la masse (*i.e.* la somme des fractions molaires doit être égale à 1), la fraction molaire de monoxyde de carbone

est donnée par :

$$X_{\text{CO}} = \frac{2\phi(1 - X_{\text{H}_2\text{O}})}{2\phi + 1 + (1 - \phi)f^{-1}}$$

Les résultats obtenus montrent que malgré les nombreuses simplifications adoptées (chimie à une étape, equi-diffusion, ...), la vitesse de flamme laminaire est correctement prédite malgré des écarts observés pour $X_{\text{CO}} > 0.5$. De meilleures prédictions pourraient être obtenues en adoptant par exemple l'approche proposée dans [15] pour un schéma cinétique à une étape. Ce travail constituant une première étape dans la prédiction de la vitesse de combustion laminaire d'un mélange gaz-poussières, ces améliorations ne seront pas retenues.

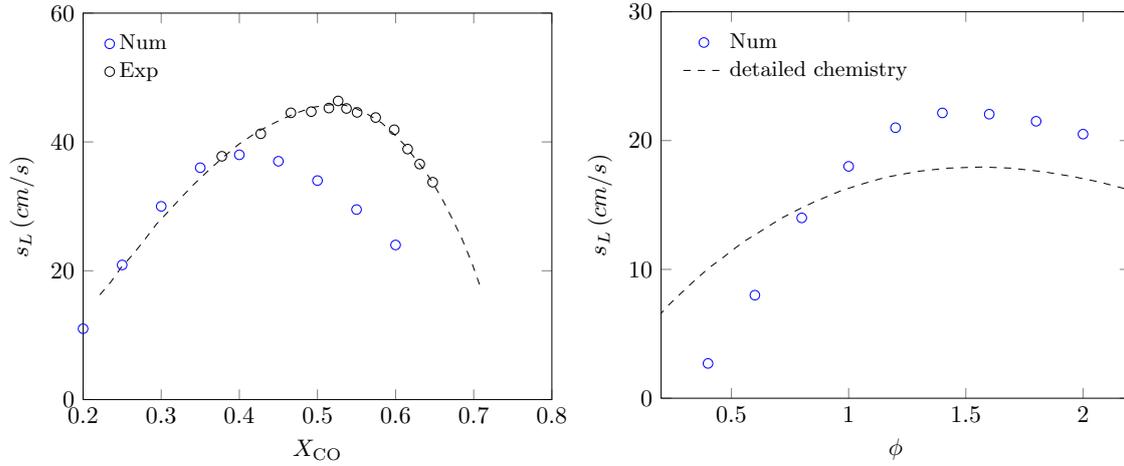


FIGURE 4.6 – Prédications du schéma cinétique à une étape en fonction de la composition du mélange

4.2 Flammes diphasiques

On s'intéresse dans cette partie aux flammes laminares diphasiques et on présente une première étude sur la combustion d'un nuage monodisperse de particules de graphite. La configuration adoptée pour les simulations est similaire à celle adoptée précédemment pour les flammes gazeuses et est détaillée dans la première section. Dans une première approche, la plupart des simulations présentées ici s'appuient sur les fermetures classiques des termes d'échange présentées dans le premier chapitre. Afin d'alléger la présentation, les notations spécifiques aux grandeurs filtrées sont omises.

4.2.1 Configuration et allumage

Les simulations mono-dimensionnelles de flamme diphasique sont menées comme pour les flammes de prémélange sur un maillage uniforme de type mono-dimensionnel. La configuration des simulations correspond à celle illustrée sur la figure (4.7) où les particules de graphite sont initialement distribuées de manière homogène dans tout le domaine. La longueur du domaine dans les directions transverses au sens de propagation de la flamme est donnée par la distance initiale inter-particules :

$$L_p = d_p \left(\frac{\pi}{6\alpha_p} \right)^{1/3} \quad (4.2.1)$$

L'allumage est réalisé en fin de domaine pour $x \geq x_a$ de manière similaire au mode d'allumage A2 décrit dans la section précédente, c'est-à-dire en fixant la température uniquement dans les termes

4.2. Flammes diphasiques

sources d'Arrhenius correspondants aux réactions homogène et hétérogène. La flamme se propage vers le mélange constitué par les gaz frais et les particules de graphite non oxydées dans le sens $x < 0$ alors que les gaz brûlés et les particules partiellement oxydées sortent du domaine en $x = L$ sous l'effet de la dilatation des gaz derrière le front de flamme.

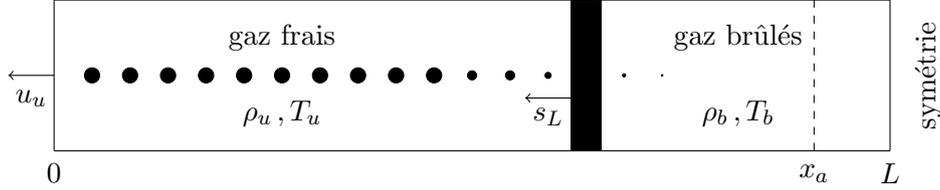


FIGURE 4.7 – Configuration des simulations mono-dimensionnelles de flamme diphasique

Les propriétés physiques du mélange gazeux sont les mêmes que celles adoptées dans la section précédente, les propriétés des particules de graphite sont regroupées dans le tableau (4.4).

ρ (kg.m ⁻³)	c_p (J.kg ⁻¹ .K ⁻¹)	Δh (J.kg ⁻¹)
2200	709	9.2 10 ⁶

TABLE 4.4 – Propriétés physiques des particules de graphite

4.2.2 Choix du filtre

On s'intéresse dans un premier temps aux effets des caractéristiques du filtre sur la vitesse de propagation de la flamme ainsi que sur les profils de température et de fraction massique de la phase gazeuse continue. Etant donné la géométrie du problème, on considère dans un premier temps le filtre boîte défini par :

$$g_{\square}(\mathbf{x}) = \prod_{i=1}^3 R(x_i) \quad (4.2.2)$$

où R est la fonction porte mono-dimensionnelle définie par :

$$R(x) = \begin{cases} \frac{1}{b_{\square}} & \text{si } |x| < \frac{b_{\square}}{2} \\ \frac{1}{2b_{\square}} & \text{si } |x| = \frac{b_{\square}}{2} \\ 0 & \text{si } |x| > \frac{b_{\square}}{2} \end{cases} \quad (4.2.3)$$

où b_{\square} correspond au support de la fonction porte s'identifiant à la taille caractéristique du filtre. Le milieu étant supposé homogène dans les directions transverses au sens de propagation de la flamme, des particules fictives espacées de la distance initiale inter-particules L_p sont prises en compte dans les directions transverses sur une épaisseur correspondant au support de la fonction. Des particules fictives sont également prises en compte dans la direction correspondant au sens de propagation de la flamme lorsque la distance entre la position de la particule x_p et le bord du domaine $x = 0$ ou L est inférieur au support [130].

En pratique, la taille caractéristique du filtre doit être suffisamment grande pour filtrer les fluctuations à petite échelle jouant ainsi le rôle de filtre passe-bas mais elle doit également rester petite devant l'échelle d'observation macroscopique. Il faut donc s'attendre, particulièrement pour le filtre boîte, à ce que la taille du filtre soit fonction de la fraction volumique de particules [122]. On se propose ici d'illustrer les caractéristiques du filtre pour un chargement $\sigma_p = 100 \text{ g.m}^{-3}$, des particules de graphite de diamètre $d_p = 2 \cdot 10^{-5} \text{ m}$ et une richesse gazeuse initiale nulle.

Les mauvaises propriétés attendues [34] du filtre boîte où subsistent encore des fluctuations sont illustrées sur la figure (4.9) pour le profil de fraction volumique α_p obtenus pour $b_\square = 2L_p$, $4L_p$ et $6L_p$. En pratique, les vitesses de propagation du front obtenues pour ces trois largeurs de filtre sont quasi-identiques et le décalage en abscisse des profils correspond à un transitoire différent associé à l'allumage. En revanche, comme attendu, une augmentation de la largeur de filtre a pour effet d'étaler les profils dans le front de flamme.

Si un filtre gaussien est souvent utilisé (*e.g.* [130]), on se propose ici d'étudier deux autres filtres dont les propriétés sont discutées dans [34]. Le premier filtre considéré est le filtre triangulaire obtenu par convolution du filtre boîte :

$$g_\wedge(\mathbf{x}) = g_\square * g_\square(\mathbf{x}) = \prod_{i=1}^3 T(x_i) \quad (4.2.4)$$

où T est la fonction triangulaire mono-dimensionnelle définie par :

$$T(x) = \begin{cases} \frac{2}{b_\wedge} \left(1 - \frac{2}{b_\wedge}|x|\right) & \text{si } |x| < \frac{b_\wedge}{2} \\ 0 & \text{si } |x| \geq \frac{b_\wedge}{2} \end{cases} \quad (4.2.5)$$

où b_\wedge est le support de la fonction triangulaire donné par $b_\wedge = 2b_\square$. Le deuxième filtre considéré obtenu par une convolution triple du filtre boîte est plus proche du filtre gaussien :

$$g_\cap(\mathbf{x}) = g_\square * g_\square * g_\square(\mathbf{x}) = \prod_{i=1}^3 Q(x_i) \quad (4.2.6)$$

où Q est la fonction quadratique mono-dimensionnelle définie par :

$$Q(x) = \begin{cases} \frac{9}{b_\cap} \left(\frac{1}{4} - \frac{3}{b_\cap^2}x^2\right) & \text{si } |x| < \frac{b_\cap}{6} \\ \frac{27(b_\cap - 2|x|)^2}{8b_\cap^3} & \text{si } \frac{b_\cap}{6} \leq |x| < \frac{b_\cap}{2} \\ 0 & \text{si } |x| \geq \frac{b_\cap}{2} \end{cases} \quad (4.2.7)$$

où b_\cap est le support de la fonction triangulaire donné par $b_\cap = 3b_\square$. Les trois filtres mono-dimensionnels sont illustrés sur la figure (4.8) pour $b_\square = 1$.

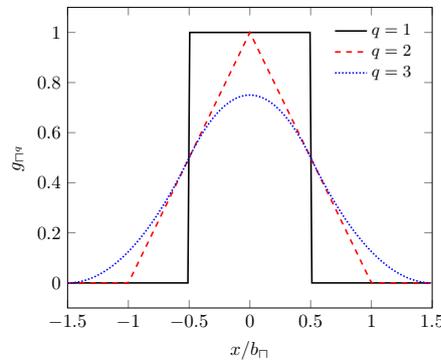


FIGURE 4.8 – Filtres mono-dimensionnels g_\square , g_\wedge et g_\cap pour $b_\square = 1$

4.2. Flammes diphasiques

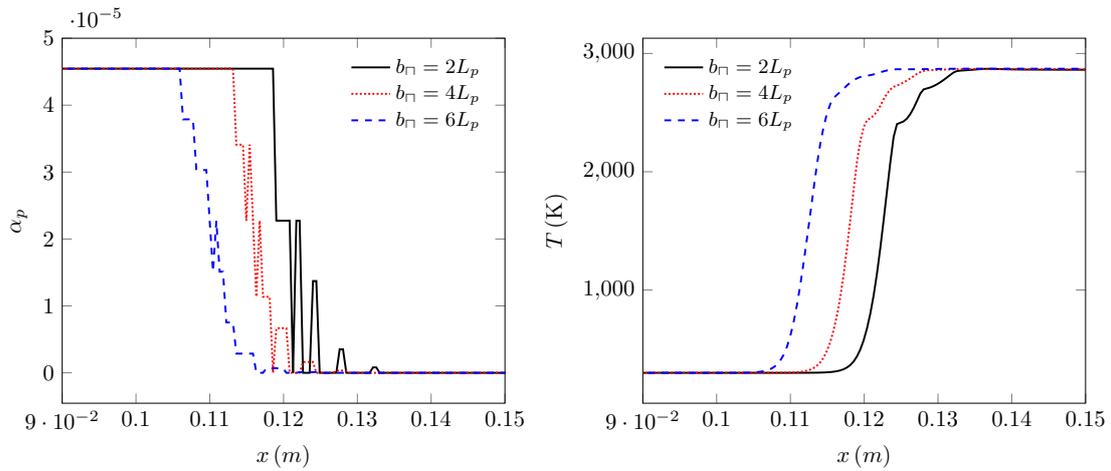


FIGURE 4.9 – Profils de fraction volumique solide et de température dans le cas du filtre boîte

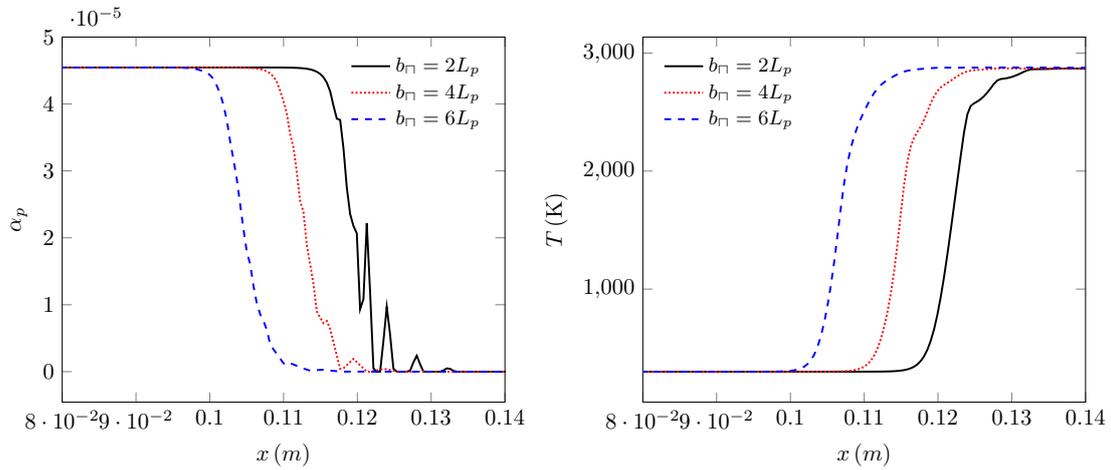


FIGURE 4.10 – Profils de fraction volumique solide et de température dans le cas du filtre triangulaire

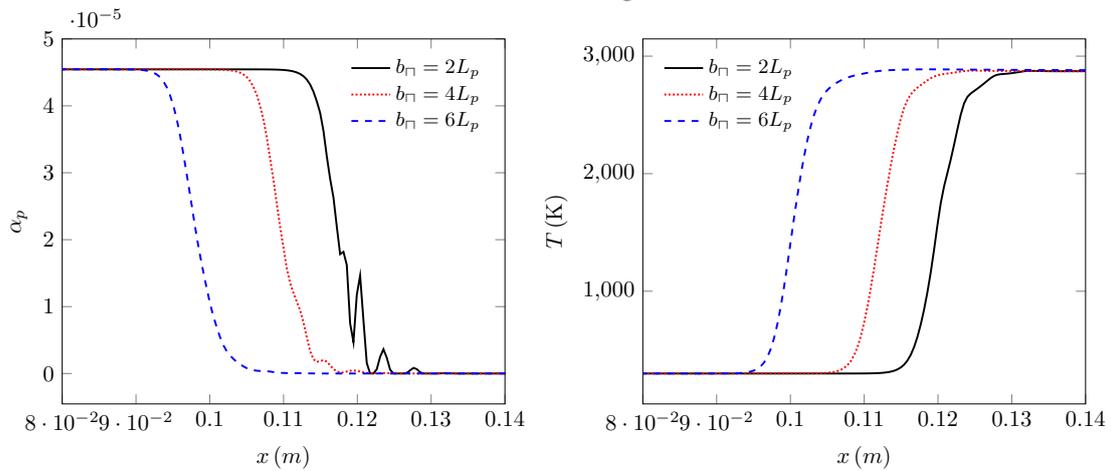


FIGURE 4.11 – Profils de fraction volumique solide et de température dans le cas du filtre quadratique

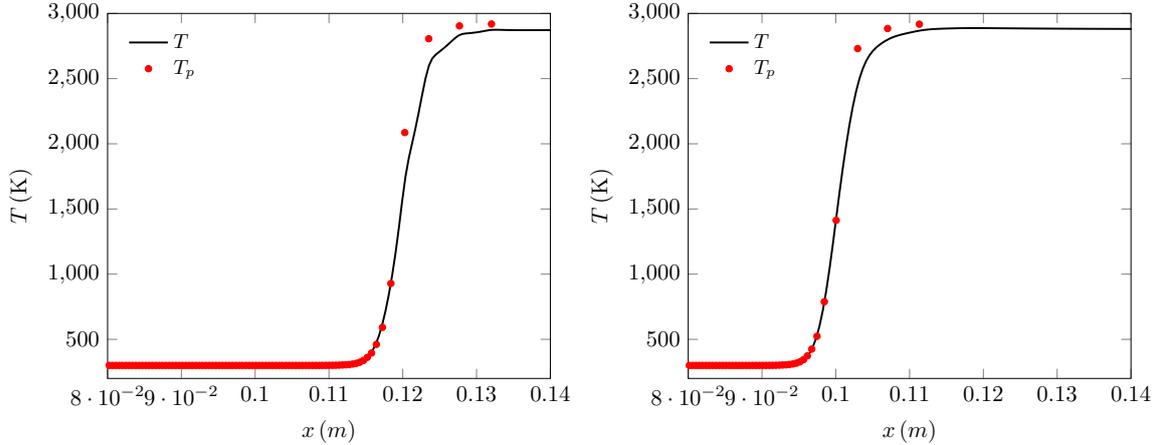


FIGURE 4.12 – Profils de température dans la phase continue et température de particule pour $b_{\Gamma} = 2L_p$ (gauche) et $b_{\Gamma} = 6L_p$ (droite).

Si les filtres triangulaire et quadratique permettent d'atténuer de manière significative les fluctuations du profil de fraction volumique pour $b_{\Gamma} \geq 4L_p$, seul le filtre quadratique filtre la totalité des fluctuations à petite échelle pour $b_{\Gamma} \geq 6L_p$. En revanche, si la structure de flamme semble rester inchangée, la vitesse moyenne de propagation du front de combustion dépend de la taille caractéristique du filtre. La détermination de cette vitesse moyenne fait l'objet de la prochaine section mais on peut ici anticiper les résultats au travers des profils de fraction volumique ou de température. Les résultats obtenus montrent qu'une augmentation de la taille caractéristique du filtre vient augmenter la vitesse de propagation quelque soit la forme du filtre considérée. Ce comportement n'est pas surprenant puisqu'une augmentation de la taille du filtre conduit à une diffusion effective plus importante et, dans le cas purement gazeux, on rappelle que la vitesse de flamme varie comme la racine carrée du coefficient de diffusion [98]. Des variations de l'ordre de 15% peuvent être observées sur les vitesses de flamme en fonction de la taille du filtre mettant ainsi en évidence le problème de la séparation d'échelle dans les cas les plus pénalisant (chargement, ...). Dans les configuration étudiées, l'épaisseur caractéristique du front de flamme est grande devant le diamètre des particules mais est du même ordre de grandeur que la taille caractéristique du filtre retenue en pratique pour filtrer les fluctuations à petite échelle, en particulier les fluctuations associées au profil de fraction volumique. Néanmoins, la taille caractéristique du filtre retenue dans cette étude est probablement surestimée principalement en raison de la configuration adoptée dans les dimensions transverses à la direction de propagation de flamme. D'autres filtres, en particulier le filtre gaussien, peuvent également être mis en œuvre mais on se limitera dans la suite de ce travail au filtre quadratique avec $b_{\Gamma} = 6L_p$ lorsque la largeur de filtre n'est pas précisée.

4.2.3 Détermination de la vitesse du front de flamme

On s'intéresse dans cette partie à la détermination de la vitesse du front de flamme dans la même configuration précédente, c'est-à-dire pour un chargement $\sigma_p = 100 \text{ g.m}^{-3}$ de particules de graphite de diamètre $d_p = 2 \cdot 10^{-5} \text{ m}$ et une richesse gazeuse initiale nulle.

Une estimation de la vitesse de flamme peut être obtenue à partir de la condition de saut Eq. (4.1.19) pour la masse volumique du mélange gazeux. La vitesse obtenue est illustrée sur la figure (4.1.3) pour les trois largeurs de filtre considérées précédemment, c'est-à-dire $b_{\Gamma} = 2L_p$, $4L_p$ et $6L_p$. Dans les trois cas, la vitesse de combustion présente, après une phase transitoire associée à l'allumage, un régime quasi-stationnaire marqué par des oscillations quasi-périodiques similaires à celles observées dans [24]. La valeur moyenne en temps, $s_L \simeq 3 \text{ cm.s}^{-1}$, est sensiblement la même pour les trois largeurs de filtre et, comme dans [24], l'intervalle de temps entre deux oscillations $\delta t \simeq 0.015 \text{ s}$ correspond approximativement au temps mis par le front de flamme pour parcourir la distance inter-particule

4.2. Flammes diphasiques

$L_p = 4.52 \cdot 10^{-4}$ m. Dans le régime quasi-stationnaire, on vérifie bien sur la figure (4.14) où sont reportés les profils de fraction volumique et de température que la vitesse moyenne obtenue correspond bien à la vitesse d'une onde progressive puisqu'on a $\alpha_p(x, t_2) = \alpha_p(x - s_a(t_2 - t_1), t_1)$ et $T(x, t_2) = T(x - s_a(t_2 - t_1), t_1)$ où $s_a = s_L + u_f$ est la vitesse de l'onde progressive.

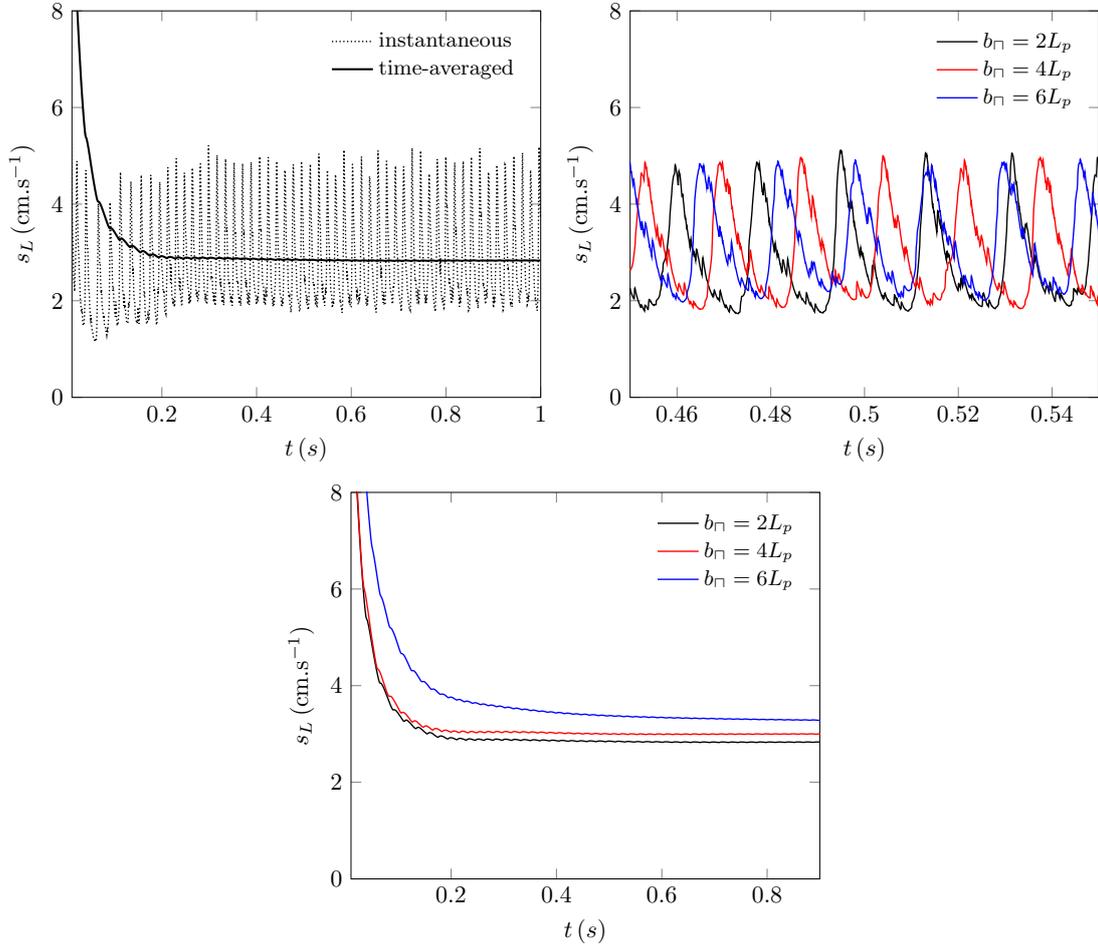


FIGURE 4.13 – Evolution de la vitesse de combustion à partir de la condition de saut Eq. (4.1.19) pour un chargement $\sigma_p = 100 \text{ g.m}^{-3}$, un diamètre $d_p = 2 \cdot 10^{-5}$ m et une richesse gazeuse initiale nulle.

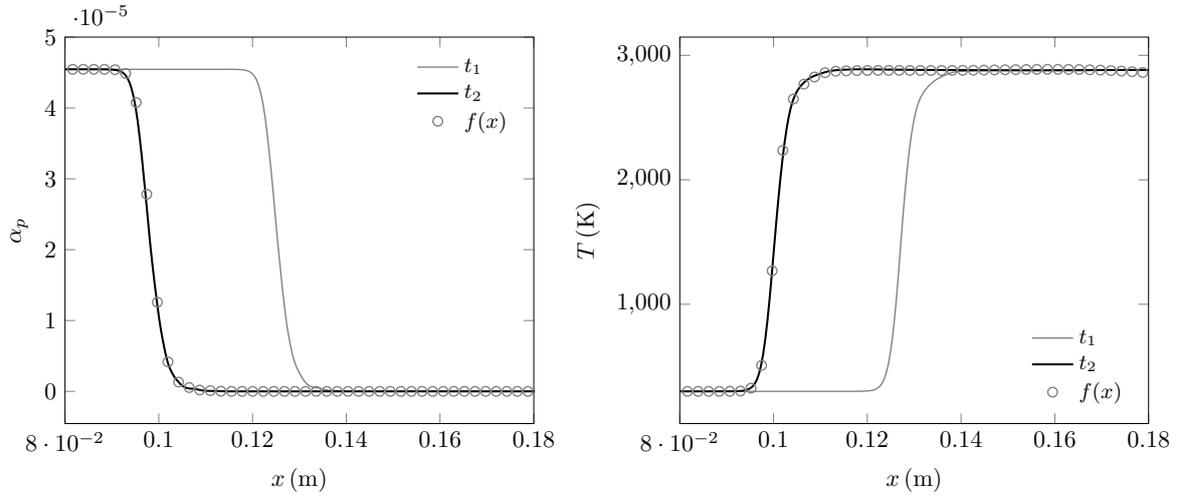


FIGURE 4.14 – Profils de fraction volumique et de température dans le front de flamme aux instants t_1 et t_2 dans le régime quasi-stationnaire et comparaison avec le profil de l’onde progressive $f(x) \equiv f(x - s_a(t_2 - t_1), t_1)$

4.2.4 Caractéristiques des flammes

On s’intéresse dans cette partie aux caractéristiques de la flamme, principalement la vitesse laminaire de combustion, en fonction de différents paramètres caractérisant le nuage de poussières. Il existe relativement peu de données disponibles dans la littérature sur la propagation de flammes dans un nuage de particules de graphite, principalement en raison d’une faible réactivité des poudres de graphite pur (extinction, stabilisation difficile, . . .) [7, 31]. On se propose ici pour cette première étude d’estimer l’influence du chargement σ_p et du diamètre de particule d_p . En raison des simplifications adoptées (schéma cinétique à une étape, equi-diffusion massique, . . .), les simulations présentées ici se veulent essentiellement qualitatives. On rappelle également que, dans une première approche, les fermetures adoptées pour les termes d’échange correspondent aux fermetures classiques. Une première étude tenant compte de la fraction volumique dans les termes d’échange sur la base d’une approximation quasi-stationnaire négligeant les interactions entre particules est néanmoins présentée à la fin de cette partie.

4.2.4.1 Influence du chargement

Afin de pouvoir comparer les résultats des simulations aux données disponibles dans [7], on s’intéresse dans un premier temps à l’influence du chargement σ_p pour des particules de diamètre $d_p = 8 \cdot 10^{-6}$ m et une richesse gazeuse initiale nulle. Les résultats obtenus reportés sur la figure (4.15) pour des chargements $\sigma_p = 100 - 350 \text{ g.m}^{-3}$ viennent illustrer la faible réactivité des poudres de graphite pur avec des vitesses de flamme relativement faibles de l’ordre de 6 cm.s^{-1} . Comme nous l’avons signalé précédemment, les prédictions présentées ici se veulent essentiellement qualitatives. Néanmoins, les vitesses de flamme prédites sont du même ordre de grandeur que celles reportées dans [7], entre 7 et 11 cm.s^{-1} pour un chargement compris entre 100 et 230 g.m^{-3} . On retrouve également la tendance reportée dans [7] avec une vitesse de combustion maximale obtenue pour un chargement de l’ordre de 230 g.m^{-3} .

Dans [7], les faibles niveaux de vitesse de flamme observés sont, en partie, attribués au faible pourcentage de matière volatile présente dans les particules. Si les résultats présentés ici ne prennent pas en compte de matière volatile, des simulations ont également été réalisées pour une richesse gazeuse initiale non nulle fonction de la proportion de matière volatile présente dans les particules. On définit ici la fraction molaire initiale de monoxyde de carbone dans le mélange gazeux à partir de la proportion

4.2. Flammes diphasiques

de matière volatile vm par la relation :

$$X_{CO} = \frac{vm}{W_{CO}} \sigma_p \frac{RT}{P_{th}} \quad (4.2.8)$$

Les résultats reportés sur la figure (4.15) pour une proportion de matière volatile $vm = 0.2$ mettent bien en évidence une augmentation de la vitesse de flamme, d'autant plus marquée pour des chargements élevés. On retrouve ainsi les tendances reportées dans [7] même si les niveaux de vitesse obtenus à partir des simulations restent inférieurs aux niveaux expérimentaux.

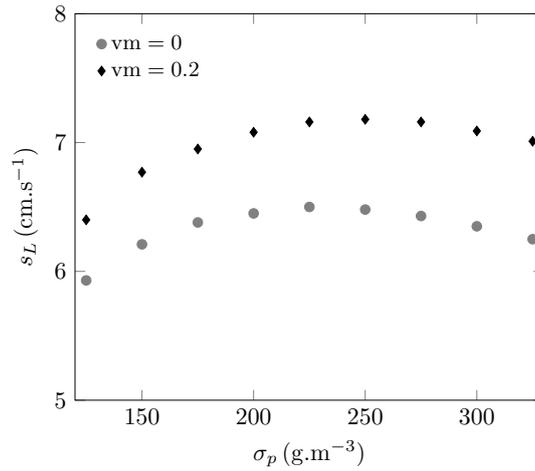
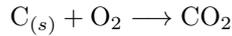


FIGURE 4.15 – Influence du chargement et de la richesse gazeuse initiale sur la vitesse de flamme

Les profils de fraction massique et de température dans le front de flamme dans le cas $vm = 0$ et $vm = 0.2$ sont illustrés sur la figure (4.16) pour le chargement $\sigma_p = 100 \text{ g.m}^{-3}$ et sur la figure (4.17) pour $\sigma_p = 300 \text{ g.m}^{-3}$. Ces deux chargements correspondent respectivement à une richesse globale de 0.97 et 2.93. La richesse globale du mélange correspond à la réaction globale pour le mélange gaz-particules :



Le premier chargement correspond ainsi à un mélange pauvre pour lequel les particules de graphite sont entièrement oxydées et une certaine proportion d'oxydant reste présente dans les gaz brûlés comme illustré sur la figure (4.16). A l'inverse, les profils illustrés sur la figure (4.17) pour le chargement $\sigma_p = 300 \text{ g.m}^{-3}$ correspondent à un mélange riche pour lequel une certaine proportion de particules reste présente dans les gaz brûlés. Ces dernières se comportent dans cette zone comme des particules inertes, l'oxydant ayant été entièrement consommé.

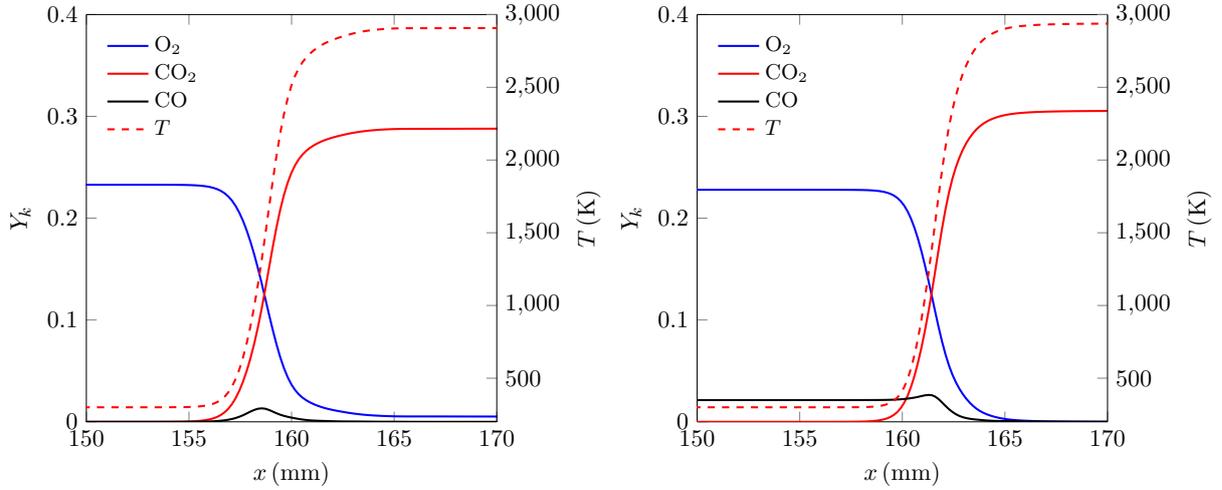


FIGURE 4.16 – Structure du front de flamme pour le chargement $\sigma_p = 100 \text{ g.m}^{-3}$ dans le cas $vm = 0$ (gauche) et $vm = 0.2$ (droite)

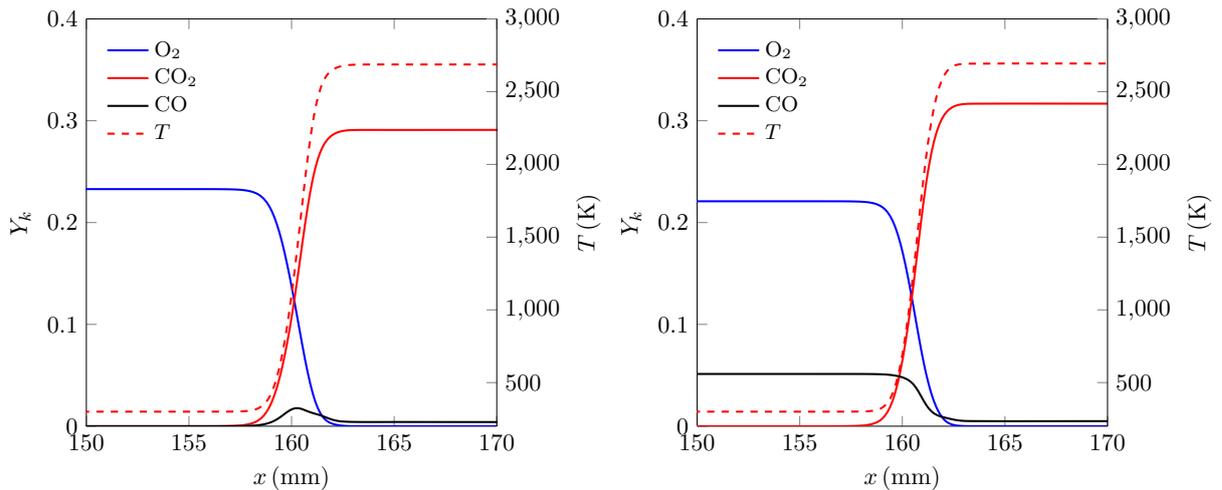


FIGURE 4.17 – Structure du front de flamme pour le chargement $\sigma_p = 300 \text{ g.m}^{-3}$ dans le cas $vm = 0$ (gauche) et $vm = 0.2$ (droite)

4.2.4.2 Influence du diamètre de particule

Une étude de sensibilité a également été menée en fonction du diamètre de particule. Cette étude a été réalisée pour un chargement $\sigma_p = 150 \text{ g.m}^{-3}$ correspondant à un mélange proche de la stoechiométrie. Les résultats obtenus reportés sur la figure (4.18) pour des diamètres compris entre 4 et $20 \cdot 10^{-6} \text{ m}$ sont conformes aux tendances reportées dans [7, 31] indiquant une diminution de la vitesse de combustion avec une augmentation du diamètre de particule, tout du moins dans le cas d'un mélange pauvre ou proche de la stoechiométrie. Dans le cas d'un mélange riche, une tendance inverse peut être observée [127] mais semble ne pas être retrouvée ici dans le cas du chargement $\sigma_p = 300 \text{ g.m}^{-3}$.

4.2. Flammes diphasiques

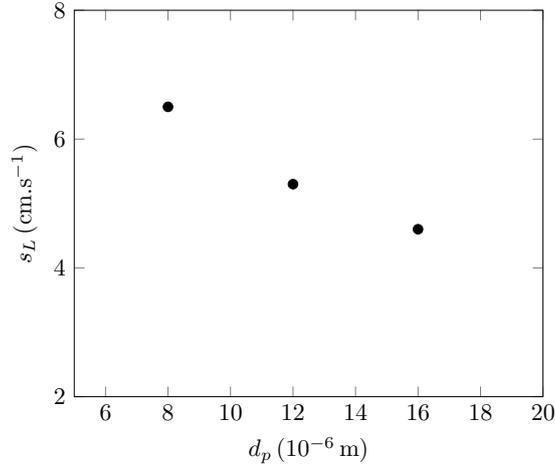


FIGURE 4.18 – Influence du diamètre de particule sur la vitesse de flamme

4.2.4.3 Influence des fermetures adoptées pour les termes d'échange

On s'intéresse dans cette partie à l'influence des fermetures adoptées pour les termes d'échange. On se limite dans cette première étude aux fermetures quasi-stationnaires et aux approximations diagonales dites *lumped* des échanges de masse et de chaleur présentés dans les chapitres 2 et 3.

On rappelle que dans le cadre des fermetures classiques, les coefficients d'échange s'écrivent, lorsqu'on peut négliger les écarts de vitesse, sous la forme :

$$h_p = \frac{10\pi\alpha_\beta^2\lambda_\beta d_p}{9\left(1 - (1 - \alpha_\beta)^{\frac{1}{3}}\right) - \alpha_\beta(3 + \alpha_\beta)}, \quad \psi_{eff} = \frac{\psi}{1 + \left(1 - \frac{9(1 - \alpha_\beta)^{1/3} + 3\alpha_\beta + 6\alpha_\beta^2 - 9}{5\alpha_\beta^2}\right)\mathcal{D}_a}$$

Dans le cas d'une fermeture quasi-stationnaire et d'une approximation *lumped*, nous avons vu dans les chapitres 2 et 3 que, pour un nuage monodisperse, les problèmes de fermeture pouvaient être résolus sur la cellule unitaire de Chang et, dans ce cas, les expressions précédentes obtenues dans le cas d'une particule isolée deviennent :

$$h_p = 2\pi\lambda_\beta d_p, \quad \psi_{eff} = \frac{\psi}{1 + \mathcal{D}_a}$$

L'influence de ces fermetures vis-à-vis des fermetures classiques a été estimée pour le chargement $\sigma_p = 300 \text{ g.m}^{-3}$ et le diamètre $d_p = 12 \cdot 10^{-6} \text{ m}$. Les résultats reportés sur la figure (4.19) pour les profils de concentration et de température dans le front de flamme montrent que malgré le cas très dilué considéré ici, des différences peuvent être observées dans le front de flamme. Il s'agit ici de résultats préliminaires puisque l'étude présentée dans le chapitre 2 sur la validité de l'approximation quasi-stationnaire *lumped* nécessite d'être poursuivie sur des cas plus réalistes (gradient de température moyenne, micro-structure, ...). Néanmoins, cette première étude montre que les fermetures proposées sont susceptibles de jouer un rôle dans des cas où le chargement moyen est plus important ou par exemple, en amont du front de flamme, lorsque l'écart de vitesse conduit à un chargement local plus important.

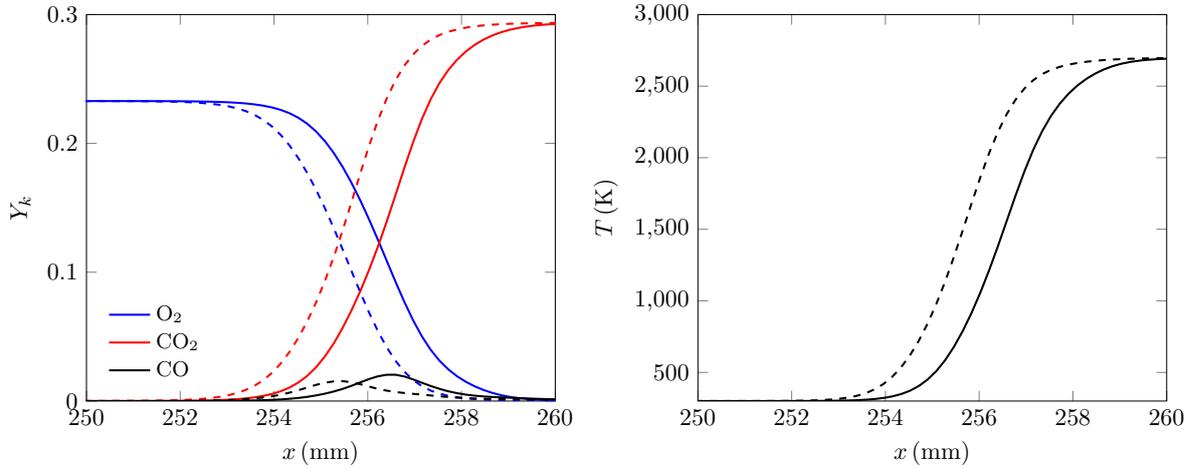


FIGURE 4.19 – Influence des fermetures adoptées pour les termes d’échange sur les profils de concentration (gauche) et de température (droite) dans le front de flamme. Lignes pleines (resp. pointillées) : fermetures classiques (resp. *lumped*)

4.3 Conclusions

Nous avons abordé dans ce chapitre l’estimation de la vitesse de flamme laminaire d’un nuage monodisperse de particules de graphite. Cette estimation a été menée à partir de simulations détaillées Euler-Lagrange réalisées à partir du logiciel P²REMICS développé à l’IRSN dans une configuration de flamme plane non étirée 1D. Pour cette première étude, la plupart des calculs ont été menés en adoptant les fermetures classiques pour les termes d’échange.

En raison des simplifications adoptées (schéma cinétique à une étape, equi-diffusion massique, ...), les résultats obtenus se veulent essentiellement qualitatifs. Néanmoins, les vitesses de flamme prédites sont en bon accord avec les données expérimentales disponibles dans le cas laminaire. Les différences observées avec d’autres données disponibles dans la littérature peuvent être attribuées à plusieurs phénomènes qui, dans cette première contribution, n’ont pas été pris en compte. Il s’agit en particulier de la présence de matière volatile naturellement présente dans les particules charbonnées qui n’est pas prise en compte ici ou du niveau de température dans les gaz frais a priori sous-estimé car les transferts radiatifs n’ont pas été pris en compte. Néanmoins, malgré ces limitations, les résultats obtenus sont conformes avec certaines tendances reportées dans la littérature (influence du chargement, ...) et viennent ainsi illustrer l’intérêt des simulations Euler-Lagrange. Nous avons cependant observé dans les simulations réalisées que les caractéristiques du filtre, en particulier sa taille, pouvaient venir modifier la vitesse de combustion laminaire. Si les résultats obtenus ne sont pas surprenant puisqu’une augmentation de la taille du filtre tend à augmenter la vitesse de combustion laminaire en raison d’une diffusion plus importante, ils mettent en évidence ici, dans les cas les plus pénalisant, le problème de la séparation d’échelle. Dans les configuration étudiées, l’épaisseur caractéristique du front de flamme est grande devant le diamètre des particules mais est du même ordre de grandeur que la taille caractéristique du filtre retenue pour filtrer *suffisamment* les fluctuations à petite échelle de la fraction volumique. Néanmoins, la taille caractéristique du filtre retenue dans cette étude est probablement surestimée principalement en raison de la configuration adoptée dans les dimensions transverses à la direction de propagation de flamme.

Des simulations ont également été menées en adoptant les fermetures quasi-stationnaires et les approximations diagonales dites *lumped* des échanges de masse et de chaleur présentés dans les chapitres 2 et 3. Les résultats obtenus dans un cas dilué montrent une relative faible sensibilité vis-à-vis des fermetures classiques. Néanmoins, ces fermetures sont susceptibles de jouer un rôle dans des cas où le chargement

4.3. Conclusions

moyen est plus important ou, même pour les mélanges initialement dilués, lorsque l'écart de vitesse en amont du front de flamme conduit à un chargement local plus important. Dans ce cas, la validité des approximations quasi-stationnaires diagonales devra au préalable être étudiée en poursuivant les études présentées dans les chapitres 2 et 3 pour des cas plus réalistes.

Conclusions et perspectives

Dans ce travail, nous nous sommes intéressés à la modélisation multi-échelle de la combustion d'un nuage de particules, en particulier, à la description macroscopique Euler-Lagrange utilisée pour les simulations détaillées visant à mieux appréhender les mécanismes de propagation de flamme dans un nuage de poussières et à fournir une estimation de la vitesse de combustion laminaire utilisée en tant que donnée d'entrée pour les fermetures algébriques de vitesse de flamme turbulente utilisées dans les outils d'évaluation.

La démarche suivie dans ce travail pour réaliser le changement d'échelle et obtenir la description macroscopique Euler-Lagrange a consisté à obtenir les équations de transport macroscopiques et les termes d'échange entre les deux phases à partir de la méthode de prise de moyenne volumique et d'une proposition de représentation pour les fluctuations.

Ces fermetures basées sur une analyse du problème local pour les fluctuations permettent d'établir un lien clair entre les phénomènes de transport à l'échelle de la particule et la description macroscopique. Contrairement à l'approche classique présentée dans le chapitre 1 nécessitant la détermination du champ localement non-perturbé en fonction du champ macroscopique, le changement d'échelle est réalisé dans le cadre d'un seul et même formalisme et les fermetures proposées font intervenir directement les grandeurs macroscopiques.

Dans le chapitre 2, les développements ont dans un premier temps été menés sur un problème modèle de transfert de chaleur avec un terme source homogène dans la phase dispersée modélisant de manière simplifiée le dégagement de chaleur associé à l'oxydation des particules. L'analyse du problème local pour les fluctuations de température nous a permis de proposer une approximation instationnaire du problème mixte micro-macro. Dans le cas d'une particule isolée, la fermeture proposée pour les termes d'échange de chaleur entre la phase continue et la phase dispersée est formellement équivalente à la fermeture classique basée sur la définition d'un champ de température localement non-perturbé par la présence de la particule. En revanche, dans le cas général, le modèle proposé est significativement différent puisqu'il prend en compte des échanges particule-particule ainsi qu'une dépendance des coefficients d'échange en fonction du taux de dilution.

En comparant les résultats obtenus à partir du modèle macroscopique dans le cas d'une configuration sans gradient de température moyenne à des calculs directs à la micro-échelle réalisées pour des micro-structures simples unidimensionnelles, nous avons montré dans un premier temps que les températures prédites par le modèle correspondaient aux solutions filtrées obtenues numériquement pour le problème local. Nous nous sommes dans un deuxième temps intéressé à la validité de l'approximation quasi-stationnaire qui, pour des raisons pratiques, est fréquemment adoptée dans les simulations Euler-Lagrange. Les résultats obtenus montrent que les températures prédites par l'approximation quasi-stationnaire s'identifient bien aux temps longs aux solutions filtrées du problème local.

Nous nous sommes ensuite intéressé à la validité d'une approximation diagonale de la matrice des coefficients d'échange, ce qui revient à négliger les échanges particule-particule comme c'est le cas des fermetures classiques. Nous avons considéré pour cela une micro-structure bidimensionnelle et, comme dans le cas précédent, une configuration sans gradient de température moyenne. Dans le cas d'une approximation dite *lumped*, les problèmes de fermeture peuvent être résolus sur une cellule unitaire contenant une seule particule comme c'est le cas pour la résolution du problème de couche limite dans l'approche classique. En comparant les prédictions de l'approximation quasi-stationnaire *lumped* aux solutions filtrées obtenues numériquement pour le problème local, il apparaît que si la prédiction de la température moyenne de la phase continue reste correcte, les écarts de température entre la phase

4.3. Conclusions

continue et les particules sont sous-estimés. Nous avons également montré que l'approximation diagonale pouvait sur la configuration étudiée être améliorée en utilisant d'autres coefficients diagonaux. Les prédictions du modèle peuvent en effet être améliorées ici en substituant le coefficient *lumped* par le coefficient diagonal dans la matrice des coefficients d'échange. Cependant, si les prédictions du modèle sont améliorées dans le cas considéré, la détermination du coefficient diagonal nécessite la résolution du problème de fermeture en tenant compte de toutes les particules contenues dans le volume de prise de moyenne, ce qui en pratique réduit donc l'intérêt de ce type d'approximation diagonale.

Dans le chapitre 3, nous nous sommes intéressés à la modélisation macroscopique des transferts de masse entre la phase continue et des particules de carbone. Dans un premier temps, une étude bibliographique nous a permis d'identifier le mécanisme d'oxydation des particules dans la gamme des diamètres considérée. Ce mécanisme correspond à une combustion en phase gazeuse infiniment lente devant la diffusion massique des espèces au voisinage de la particule. Sur la base d'une analyse du problème des fluctuations à l'échelle locale et en reprenant les développements menés dans le chapitre 2 sur les transferts thermiques, nous avons proposé une approximation quasi-stationnaire du problème mixte micro-macro avec une matrice des coefficients d'échange diagonale. Le modèle macroscopique obtenu s'écrit ainsi de manière similaire au modèle classique, mais l'approche proposée prend en compte une dépendance en fonction du taux de dilution dans le calcul du taux effectif de la réaction hétérogène. A l'instar du travail réalisé pour les échanges thermiques, une équivalence formelle entre l'approche proposée et l'approche classique a été obtenue dans le cas limite d'une particule isolée. En revanche, dans le cas général, le taux de dilution tend à augmenter le taux de consommation de la particule, en particulier dans le régime diffusif. Afin de valider le modèle macroscopique, nous nous sommes intéressés aux résultats analytiques et numériques proposés dans la littérature pour l'oxydation d'une particule de carbone isolée. Nous avons montré que l'évolution du diamètre et de la température prédits par le modèle est en très bon accord avec les résultats proposés dans la littérature.

En dernier lieu, nous avons abordé dans le chapitre 4 la simulation de flammes laminaires diphasiques. Dans un premier temps, afin de valider les nombreuses simplifications adoptées (schéma cinétique à étape, equi-diffusion massique, ...), nous nous sommes intéressés à une flamme de prémélange correspondant à la combustion homogène du monoxyde de carbone et au calcul de la vitesse de flamme laminaire pour différentes richesses.

Dans un deuxième temps, nous avons réalisé une première étude sur l'influence du chargement et de la taille des particules sur la vitesse de combustion laminaire pour un nuage monodisperse de particules de graphite. Les résultats des simulations Euler-Lagrange sont en bon accord avec les résultats disponibles dans la littérature même s'il s'agit ici d'une étude essentiellement qualitative en raison des nombreuses simplifications adoptées. La plupart des simulations ont été menées en adoptant dans un premier temps les fermetures classiques des termes d'échange. Une première étude a également menée sur la base des fermetures quasi-stationnaires avec les approximations diagonales proposées dans les chapitres 2 et 3. Si les premiers résultats présentés dans ce travail montrent une sensibilité relativement faible des résultats vis-à-vis du taux de dilution pour la configuration étudiée, le taux de dilution est susceptible de jouer un rôle plus important, notamment, dans le cas où la propagation de flamme conduit à un chargement local plus important en amont de la flamme. En revanche, nous avons observé dans les simulations réalisées que les caractéristiques du filtre, en particulier sa taille, pouvaient venir modifier la vitesse de combustion laminaire. Si les résultats obtenus ne sont pas surprenant puisqu'une augmentation de la taille du filtre tend à augmenter la vitesse de combustion laminaire en raison d'une diffusion plus importante, ils mettent en évidence ici le problème de la séparation d'échelle. Dans les configuration étudiée, l'épaisseur caractéristique du front de flamme est grande devant le diamètre des particules mais est du même ordre de grandeur que la taille caractéristique du filtre retenue pour filtrer *suffisamment* les fluctuations à petite échelle de la fraction volumique. Néanmoins, la taille caractéristique du filtre retenue dans cette étude est probablement surestimée principalement en raison de la configuration

adoptée dans les dimensions transverses à la direction de propagation de flamme.

L'intérêt de la méthode de prise de moyenne avec fermetures et des simulations détaillées Euler-Lagrange ont été mises en évidence dans ce travail et de nombreuses pistes restent à explorer.

Dans le cadre de la modélisation macroscopiques des échanges, la démarche proposée ici pour les transferts de masse pourrait être étendue à d'autres types de particules, en particulier métalliques, et à d'autres types de mécanisme d'oxydation, en particulier le mécanisme d'oxydation correspondant au régime de flamme attachée. Il serait également intéressant d'étudier le problème de changement d'échelle avec la méthode de prise de moyenne volumique avec fermetures pour les transferts de quantité de mouvement et de comparer la description obtenue avec les contributions récentes proposées sur ce sujet. Enfin, il faudrait également prendre en compte les transferts radiatifs qui ont été négligés ici alors qu'ils sont susceptibles de jouer un rôle important en fonction du type de particule considéré et de leur taille.

Dans le cadre de l'utilisation du modèle macroscopique pour l'estimation de la vitesse laminaire de flamme dans un nuage de particules, les qualités prédictives d'une chimie simplifiée pour la combustion homogène en phase gazeuse pourraient être améliorées en adoptant par des méthodes où le facteur pré-exponentiel est ajusté en fonction de la richesse du mélange. Par ailleurs, la possibilité de présence de matière volatile dans les particules de carbone doit être prise en compte dans la description des transferts de masse.

De plus, il faudrait étendre les simulations menées pour des nuages monodisperses à des nuages polydisperses et prendre en compte les mélanges dits hybrides, c'est-à-dire les mélanges constitués de particules de graphite et de particules métalliques.

Dans ce contexte, on pourrait étendre les expériences numériques présentées dans le chapitre 2 à des cellules plus complexes et étudier la validité et la qualité de l'approximation diagonale des termes d'échange. Il serait également intéressant d'étudier l'impact des termes non-classiques et de juger de leur importance sur l'estimation de la vitesse de flamme.

Appendices

Annexe A

Equations locales instantanées

A.1 Transfert de matière multi-constituant

Le point central dans la modélisation du transfert de matière dans un mélange multi-constituant réside dans la détermination de la relation entre les gradients de fraction et le flux de diffusion. L'approche de Maxwell-Stefan est la plus adaptée pour décrire le transfert de matière multiconstituant [73]. L'équation de Maxwell-Stefan pour un système isotherme et isobare s'écrit sous la forme [132] :

$$\mathbf{d}_{\beta,k} = \sum_{j=1(j \neq i)}^{N_e} \frac{X_{\beta,k} X_{\beta,j} (\mathbf{u}_{\beta,j} - \mathbf{u}_{\beta,k})}{\mathcal{D}_{\beta,kj}} \quad (\text{A.1.1})$$

$$\mathbf{d}_{\beta,k} = \frac{X_{\beta,k}}{RT} \nabla \mu_{\beta,k} \quad (\text{A.1.2})$$

où $X_{\beta,k}$, $\mathcal{D}_{\beta,kj}$ et $\mathbf{d}_{\beta,k}$ représentent respectivement la fraction molaire, le coefficient de diffusion binaire et la force motrice associée au constituant k , le terme $\mu_{\beta,k} = \mu_{\beta,k}^0 + RT \ln(a_{\beta,k} X_{\beta,k})$ représente le potentiel chimique molaire et $a_{\beta,k}$ le coefficient d'activité pour l'espèce considérée.

La combinaison de l'équation de Maxwell-Stefan avec la définition du potentiel chimique donne une équation plus adaptée à l'étude de transfert de matière multi-constituant [101] :

$$\sum_{j=1}^{N_e} (\mathcal{A}_{\beta,kj})_{T,P,X_{k \neq i}} \nabla x_{\beta,k} = \sum_{j=1(j \neq i)}^{N_e} \frac{X_{\beta,k} X_{\beta,j} (\mathbf{u}_{\beta,j} - \mathbf{u}_{\beta,k})}{\mathcal{D}_{\beta,kj}} \quad i = 1, 2, \dots, N_e - 1, \quad (\text{A.1.3})$$

avec $\mathcal{A}_{\beta,kj} = \delta_{\beta,kj} + X_{\beta,k} \partial_x \ln a_{\beta,k} X_{\beta,j}$,

Cette théorie prend en compte, à la fois, les effets multi-constituant et les effets de non idéalité des mélanges avec le terme $\mathcal{A}_{\beta,kj}$. Dans le cas des mélanges assimilés à des gaz parfaits, les coefficients d'activité sont égaux à un, par conséquent la matrice $[\mathcal{A}_{\beta}]$ est la matrice d'identité. A partir de la relation Eq. (A.1.3), le flux de diffusion massique peut s'écrire sous une forme semblable à celle de la loi de Fick [101] :

$$\mathbf{j}_{\beta,k} = - \sum_{j=1}^{N_e-1} \rho D_{\beta,kj} \nabla Y_{\beta,j} \quad (\text{A.1.4})$$

où on a posé :

$$[D_{\beta}] = [\mathcal{H}_{\beta}] [D_{\beta}^*] [\mathcal{H}_{\beta}]^{-1} \quad (\text{A.1.5})$$

$$[D_{\beta}^*] = [\mathcal{R}_{\beta}]^{-1} [\Gamma_{\beta}] \quad (\text{A.1.6})$$

Pour $(k; j) \in [1; N_e]^2$:

$$\mathcal{R}_{\beta,kj} = -X_{\beta,k} \left(\frac{1}{\mathcal{D}_{\beta,kj}} - \frac{1}{\mathcal{D}_{\beta,kN}} \right), \quad \mathcal{R}_{\beta,k} = \frac{X_{\beta,k}}{\mathcal{D}_{\beta,kN}} + \sum_{j=1(j \neq i)}^N \frac{X_{\beta,k}}{\mathcal{D}_{\beta,kj}} \quad (\text{A.1.7})$$

$$\mathcal{H}_{\beta,kj} = \frac{Y_{\beta,j}}{X_{\beta,j}} \left(\delta_{\beta,kj} - Y_{\beta,k} \left(1 - \frac{Y_{\beta,N_e} X_{\beta,k}}{X_{\beta,N_e} \rho_{\beta,j}} \right) \right) \quad (\text{A.1.8})$$

La matrice $[D_{\beta}^*]$ représente la forme matricielle des coefficients de diffusion molaire de la loi de Fick généralisée. Elle désigne le produit de la matrice $[\mathcal{R}_{\beta}]$ qui regroupe les effets purement diffusionnels inter-constituants et la matrice $[\Gamma_{\beta}]$ qui regroupe les effets liés à la non idéalité du mélange. La matrice $[\mathcal{H}_{\beta}]$ assure le passage du flux molaire au flux massique. Dans le cas de mélanges assimilés à des mélanges gazeux parfaits, la matrice $[\Gamma_{\beta}]$ est égale à la matrice d'identité.

Le calcul de la matrice de diffusion associée à loi de Fick généralisée nécessite de déterminer des coefficients de diffusion binaire. Il existe dans la littérature différentes corrélations pour prévoir les valeurs de ces coefficients. Nous présentons ici la corrélation de Fuller *et al.* [50] qui a donné des résultats relativement proches aux résultats expérimentaux à basse pression :

$$\mathcal{D}_{\beta,kj} = \frac{1.43 \times 10^{-7} T_{\beta}^{1,75}}{2P_{\beta} [(1/W_k) + (1/W_{\beta,j})]^{-1} [(\sum_v)_{\beta,k}^{1/3} + (\sum_v)_{\beta,j}^{1/3}]^2} \quad (\text{A.1.9})$$

où $(\sum_v)_A$ et $(\sum_v)_B$ représentent respectivement les volumes de diffusion calculés en sommant des termes de contribution pour chaque atome [114]. Cette corrélation permet bien de vérifier que $\mathcal{D}_{\beta,kj} = \mathcal{D}_{\beta,jk}$ et que $\mathcal{D}_{\beta,kj}$ ne dépend pas de la composition de mélange, ce qui est observé pour la plupart des mélanges gazeux binaires sous faible pression.

Analyse de la matrice de diffusion massique

Dans cette partie, nous nous intéressons au mélange gazeux de $\{O_2, CO, CO_2, N_2\}$ assimilé à un mélange parfait, les coefficients d'activité sont égaux à un pour toutes les espèces. Les coefficients binaires du mélange présentés dans le tableau (A.1) ci-dessous sont calculés à $T_{\beta} = 1000 K$ et à pression atmosphérique l'aide de l'expression Eq. (A.1.9) et les propriétés des constituants du mélange (Table A.2). Ces valeurs correspondent aux valeurs obtenues expérimentalement par Walker et Westenberg [139] avec une erreur relative d'ordre 4%.

	O_2	CO	CO_2	N_2
O_2		172.7	135.1	171.1
CO	—		136.3	172.0
CO_2	—	—		135.1
N_2	—	—	—	

TABLE A.1 – Coefficients de diffusion binaire $\mathcal{D} (\times 10^{-6} m^2/s)$ à $T_{\beta} = 1000K$ et $P_{\beta} = 1 atm$

A.1. Transfert de matière multi-constituant

Constituants	Masse Molaire (g/mol)	Somme volumes de diffusion
1 \rightarrow Oxygène (O_2)	31.999	16.31
2 \rightarrow Monoxyde de Carbone (CO)	28.010	18.0
3 \rightarrow Dioxyde de Carbone (CO_2)	44.010	26.9
4 \rightarrow Azote (N_2)	28.013	18.5

TABLE A.2 – La masse molaire et la somme du volume atomique des constituants de mélange

Dans cette étude, la température est fixée à 1000 K , la pression à 1 atm et la fraction massique de l'azote à 0.8 , les coefficients de diffusion de la loi de Fick généralisée sont évalués en fonction des fractions massiques de CO , CO_2 . Le calcul des coefficients de diffusion massique (cf. Figs. A.4 et A.3) permet les conclusions suivantes :

- Les fractions massiques n'ont pas beaucoup d'influence sur les coefficients diagonaux.
- Les coefficients diagonaux varient de façon quasi-linéaire avec les fractions des constituants du mélange.
- Les coefficients non-diagonaux sont généralement négligeables devant les coefficients diagonaux, sauf pour CO où ils sont inférieurs d'un ordre de grandeur par rapport aux valeurs diagonaux.
- Les coefficients diagonaux sont égaux à 4% près aux coefficients binaires par rapport au N_2 .

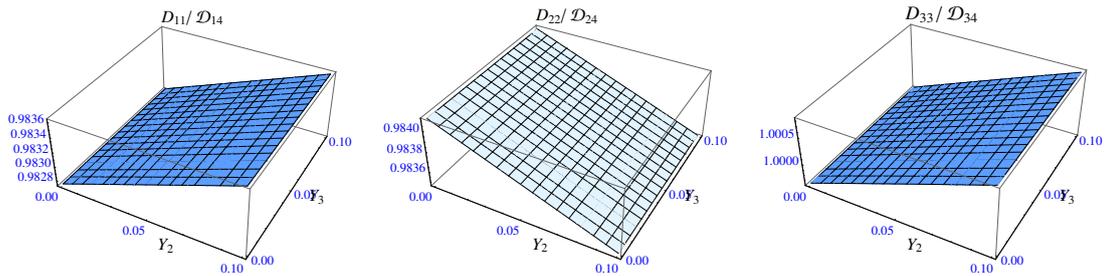


TABLE A.3 – Variation des coefficients de diffusion adimensionnels par les coefficients binaires par rapport au N_2

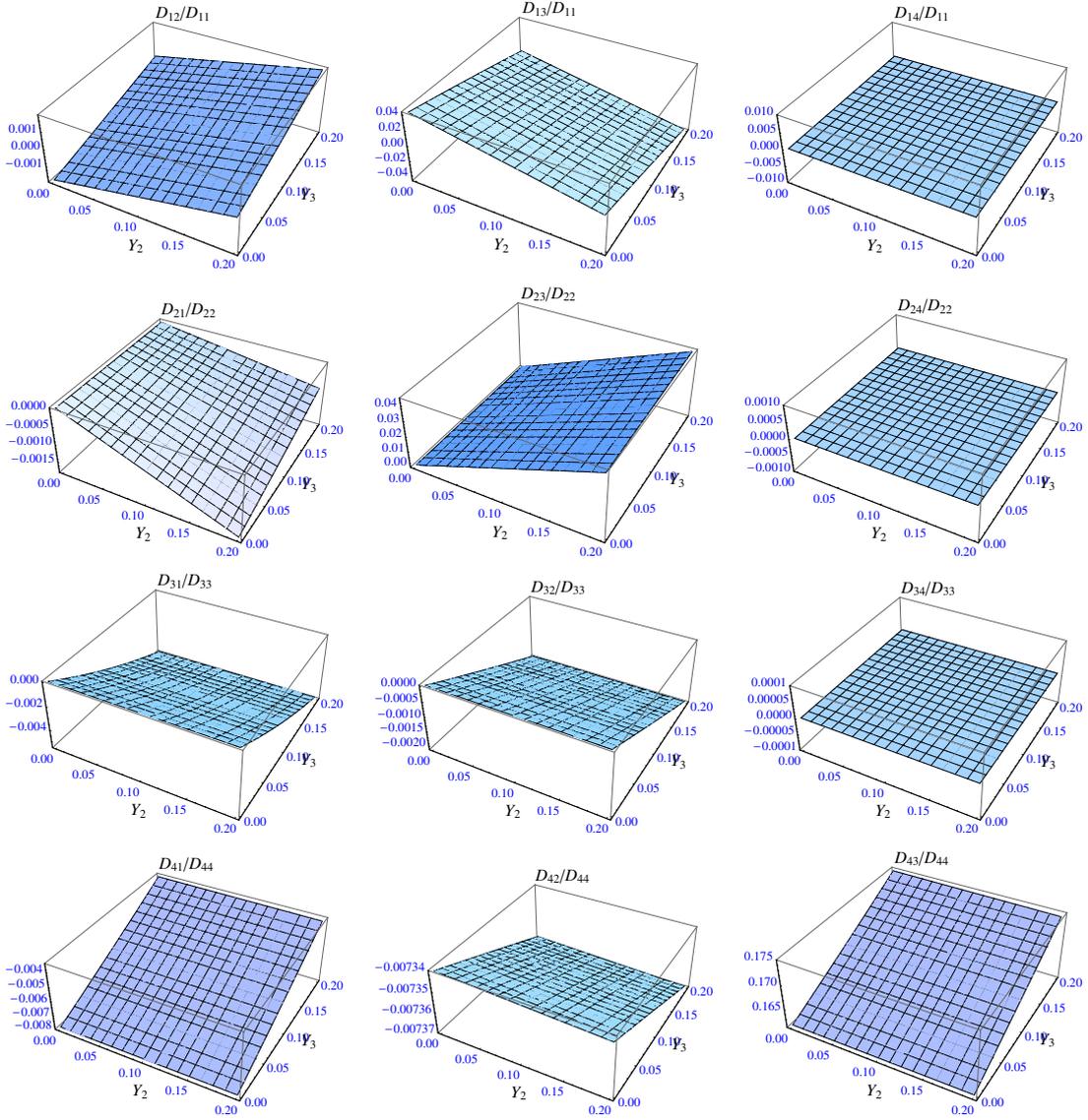


TABLE A.4 – Variation des coefficients de diffusion adimensionnels par les coefficients diagonaux

La loi de Fick généralisée permet de traiter les phénomènes de diffusion multi-constituant avec une précision très convenable et ne nécessite comme données que les valeurs des coefficients de diffusion binaires [20]. Mais contrairement à la loi de Fick, les flux massiques sont couplés entre eux, ce qui nécessite de résoudre simultanément tous les bilans des espèces, cela induit un système lourd à modéliser. On trouve dans la littérature différentes approximations de la loi de Fick généralisée :

Flux Fickien Le flux donné par la loi de Fick :

$$j_i = -\rho \mathcal{D}_{iN} \partial_x y_i x \quad i = 1, 2, \dots, N_e - 1 \quad (\text{A.1.10})$$

où \mathcal{D}_{iN} est le coefficient de diffusion binaire de l'espèce i et l'espèce N considérée comme le solvant.

Flux diagonal Les termes non-diagonaux de la matrice de diffusion $[D]$ sont négligés devant les termes diagonaux, ainsi, seuls les termes diagonaux sont considérés dans le calcul du flux de diffusion :

$$j_i = -\rho D_{ii} \partial_x y_i x \quad i = 1, 2, \dots, N_e - 1 \quad (\text{A.1.11})$$

A.2. Equations locales instantanées de la phase continue

Flux "lumpé" Les gradients de fractions massiques sont considérés du même ordre de grandeur de manière à sommer les coefficients d'une même ligne de la matrice $[D]$:

$$j_i = -\rho \left[\sum_{j=1}^{N-1} D_{ij} \right] \partial_x y_i x \quad i = 1, 2, \dots, N_e - 1 \quad (\text{A.1.12})$$

Approximation de Hirschfelder et Curtiss Dans le modèle de Hirschfelder et al. [28], les coefficients de diffusion de l'espèce i dans un mélange multiconstituant est calculé avec :

$$D_i = (1 - y_i) \left(M \sum_{j=1, j \neq i}^{N_e} \frac{y_j}{M_i \mathcal{D}_{ij}} \right)^{-1} \quad (\text{A.1.13})$$

Cette approximation correspond au premier terme du développement en série de la matrice de diffusion $[D^*]$. Elle constitue l'approximation de premier ordre du flux de diffusion multiconstituant proposé par Giovangigli [56]

$$j_i^e = -\rho D_i \frac{M_i}{M} \nabla \cdot x_i \quad (\text{A.1.14})$$

Cependant, avec cette approximation la conservation de la masse totale n'est plus automatiquement assurée ($\sum_{i=1}^{i=N} j_i^e \neq 0$). Un flux de diffusion correctif j_i^c est alors ajouté pour assurer la conservation de la masse totale [98]. Le flux de diffusion des espèces j_i issu de cette correction est défini par

$$j_i = j_i^e + j_i^c \quad (\text{A.1.15})$$

avec

$$j_i^c = -y_i \sum_{j=1}^{N_e} \rho D_j \frac{M_j}{M} \nabla \cdot x_j \quad (\text{A.1.16})$$

A.2 Equations locales instantanées de la phase continue

L'objet de cette partie est de dériver les équations de transfert pour le mélange gazeux à partir des bilans de masse, de quantité de mouvement et d'énergie associés à chaque espèce.

Bilan de masse

Pour un mélange gazeux constitué de N_e espèces chimiques, l'équation de conservation de la masse de l'espèce k dans la phase continue Ω_β s'écrit :

$$\partial_t (\rho_\beta Y_{\beta,k}) + \nabla \cdot (\rho_\beta Y_{\beta,k} \mathbf{u}_{\beta,k}) = \dot{\omega}_{\beta,k} \quad (\text{A.2.1})$$

$$\text{Avec} \quad \sum_{k=1}^{N_e} \dot{\omega}_{\beta,k} = 0 \quad (\text{A.2.2})$$

où $\dot{\omega}_{\beta,k}$ et $Y_{\beta,k}$ représentent respectivement le taux de réaction et la fraction massique de l'espèce k dans Ω_β . En introduisant le flux de diffusion massique $\mathbf{j}_{\beta,k}$ et la vitesse de diffusion massique $\mathbf{V}_{\beta,k}$ définis pour chaque espèce k dans Ω_β , par :

$$\mathbf{j}_{\beta,k} = \rho_{\beta,k} \mathbf{V}_{\beta,k} = \rho_{\beta,k} (\mathbf{u}_{\beta,k} - \mathbf{u}_\beta) \quad (\text{A.2.3})$$

En sommant les flux de diffusion massique, on obtient les égalités suivantes :

$$\sum_{k=1}^{N_e} \mathbf{j}_{\beta,k} = \sum_{k=1}^{N_e} \rho_{\beta,k} \mathbf{V}_{\beta,k} = 0 \quad (\text{A.2.4})$$

L'équation de conservation de la masse de l'espèce k devient :

$$\partial_t (\rho_{\beta} Y_{\beta,k}) + \nabla \cdot (\rho_{\beta} Y_{\beta,k} \mathbf{u}_{\beta}) = -\nabla \cdot \mathbf{j}_{\beta,k} + \dot{\omega}_{\beta,k} \quad (\text{A.2.5})$$

En sommant les N_e équations de conservation de masse des espèces Eq. (A.2.5), on obtient l'équation de conservation de la masse du mélange dans Ω_{β} :

$$\partial_t (\rho_{\beta}) + \nabla \cdot (\rho_{\beta} \mathbf{u}_{\beta}) = 0 \quad (\text{A.2.6})$$

Bilan de quantité de mouvement

Le bilan de quantité de mouvement associé à chaque espèce k dans Ω_{β} s'écrit [146] :

$$\partial_t (\rho_{\beta,k} \mathbf{u}_{\beta,k}) + \nabla \cdot (\rho_{\beta,k} \mathbf{u}_{\beta,k} \otimes \mathbf{u}_{\beta,k}) = \nabla \cdot \boldsymbol{\sigma}_{\beta,k} + \rho_{\beta,k} \mathbf{g} + \sum_{j=1}^{N_e} \mathbf{P}_{\beta,kj} + \mathbf{u}_{\beta,k}^* \dot{\omega}_{\beta,k} \quad (\text{A.2.7})$$

Le terme $\mathbf{P}_{\beta,kj}$ représente les interactions des autres espèces du mélange sur l'espèce k et vérifie la relation :

$$\sum_{k=1}^{N_e} \sum_{j=1}^{N_e} \mathbf{P}_{\beta,kj} = 0 \quad (\text{A.2.8})$$

Le dernier terme dans l'équation Eq. (A.2.7) représente la quantité de mouvement associée à la création d'espèce chimique k et vérifie la relation :

$$\sum_{k=1}^{N_e} \mathbf{u}_{\beta,k}^* \dot{\omega}_{\beta,k} = 0 \quad (\text{A.2.9})$$

Le terme $\boldsymbol{\sigma}_{\beta,k}$ représente le tenseur des contraintes :

$$\boldsymbol{\sigma}_{\beta,k} = -P_{\beta,k} \mathbf{I} + \boldsymbol{\tau}_{\beta,k} \quad (\text{A.2.10})$$

où $P_{\beta,k}$ et $\boldsymbol{\tau}_{\beta,k}$ représentent respectivement la pression partielle et le tenseur des contraintes visqueuses. En sommant les N_e équations de quantité de mouvement associées à chaque espèce k Eq. (A.2.7), on obtient :

$$\partial_t (\rho_{\beta} \mathbf{u}_{\beta}) + \nabla \cdot \left(\sum_{k=1}^{N_e} \rho_{\beta,k} \mathbf{u}_{\beta,k} \otimes \mathbf{u}_{\beta,k} \right) = \nabla \cdot \sum_{k=1}^{N_e} \boldsymbol{\sigma}_{\beta,k} + \rho_{\beta} \mathbf{g} \quad (\text{A.2.11})$$

On introduit la décomposition la vitesse $\mathbf{u}_{\beta,k}$ en vitesse de mélange \mathbf{u}_{β} et vitesse de diffusion $\mathbf{V}_{\beta,k}$, l'équation précédente s'écrit :

$$\partial_t (\rho_{\beta} \mathbf{u}_{\beta}) + \nabla \cdot (\rho_{\beta} \mathbf{u}_{\beta} \otimes \mathbf{u}_{\beta}) + = \nabla \cdot \boldsymbol{\sigma}_{\beta} + \rho_{\beta} \mathbf{g} - \nabla \cdot \sum_{k=1}^{N_e} \rho_{\beta,k} \mathbf{V}_{\beta,k} \otimes \mathbf{V}_{\beta,k} \quad (\text{A.2.12})$$

où $\boldsymbol{\sigma}_{\beta}$ représente le tenseur des contraintes associé au système multi-espèces :

$$\boldsymbol{\sigma}_{\beta} = \sum_{k=1}^{N_e} \boldsymbol{\sigma}_{\beta,k} \quad (\text{A.2.13})$$

A.2. Equations locales instantanées de la phase continue

Le dernier terme dans le second membre de l'équation Eq. (A.2.12) est appelé tenseur de contrainte de diffusion, il traduit la contribution des mécanismes de diffusion au bilan global de quantité de mouvement [100]. Le tenseur des contraintes $\boldsymbol{\sigma}_\beta$ est classiquement modélisé à l'aide de deux contributions [145] :

$$\boldsymbol{\sigma}_\beta = -P_\beta \mathbf{I} + \boldsymbol{\tau}_\beta \quad (\text{A.2.14})$$

Le terme $\boldsymbol{\tau}_\beta$ représente le tenseur des contraintes visqueuses du mélange défini pour un fluide Newtonien par :

$$\boldsymbol{\tau}_\beta = \mu_\beta \left(\nabla \mathbf{u}_\beta + (\nabla \mathbf{u}_\beta)^t \right) - \frac{2}{3} \mu_\beta (\nabla \cdot \mathbf{u}_\beta) \mathbf{I} \quad (\text{A.2.15})$$

où μ_β et P_β représentent respectivement la viscosité cinématique du mélange et la pression du mélange défini par :

$$P_\beta = \sum_{k=1}^{N_e} P_{\beta,k} \quad (\text{A.2.16})$$

Pour un mélange gazeux ou chaque espèce suit la loi d'état des gaz parfaits :

$$P_\beta = \rho_\beta \frac{R}{\bar{W}_\beta} T_\beta \quad (\text{A.2.17})$$

où T_β représente la température de la phase continue.

Bilan d'énergie

L'équation locale instantanée de bilan d'énergie totale associé à chaque espèce k dans Ω_β s'écrit [146] :

$$\begin{aligned} \partial_t (\rho_{\beta,k} E_{\beta,k}) + \nabla \cdot (\rho_{\beta,k} E_{\beta,k} \mathbf{u}_{\beta,k}) &= -\nabla \cdot \mathbf{q}_{\beta,k} + \rho_{\beta,k} \mathbf{g} \cdot \mathbf{u}_{\beta,k} + \nabla \cdot (\boldsymbol{\sigma}_{\beta,k} \cdot \mathbf{u}_{\beta,k}) \\ &+ \sum_{j=1}^{N_e} (Q_{\beta,kj} + \mathbf{P}_{\beta,kj} \cdot \mathbf{u}_{\beta,k}) + \dot{\omega}_{\beta,k} E_{\beta,k}^* \end{aligned} \quad (\text{A.2.18})$$

avec

$$\sum_{k=1}^{N_e} \dot{\omega}_{\beta,k} E_{\beta,k}^* = 0 \quad (\text{A.2.19})$$

$$\sum_{k=1}^{N_e} \sum_{j=1}^{N_e} Q_{\beta,kj} = 0 \quad (\text{A.2.20})$$

où on a posé $E_{\beta,k} = e_{\beta,k} + \frac{1}{2} u_{\beta,k}^2$ et $E_{\beta,k}^* = e_{\beta,k}^* + \frac{1}{2} u_{\beta,k}^{*2}$. Les termes $\mathbf{q}_{\beta,k}$ et $Q_{\beta,kj}$ dans l'équation Eq. (A.2.18), représentent respectivement le flux de chaleur par conduction et le transfert d'énergie thermique de l'espèce j à l'espèce k . Le dernier terme dans l'équation Eq. (A.2.18) représente l'énergie associée à la création des espèces chimiques k . A partir du bilan de quantité de mouvement Eq. (A.2.7), on obtient l'équation de l'énergie cinétique associée à chaque espèce k dans Ω_β :

$$\begin{aligned} \partial_t \left(\frac{1}{2} \rho_{\beta,k} u_{\beta,k}^2 \right) + \nabla \cdot \left(\frac{1}{2} \rho_{\beta,k} u_{\beta,k}^2 \mathbf{u}_{\beta,k} \right) &= \rho_{\beta,k} \mathbf{g} \cdot \mathbf{u}_{\beta,k} + \nabla \cdot (\boldsymbol{\sigma}_{\beta,k} \cdot \mathbf{u}_{\beta,k}) - \boldsymbol{\sigma}_{\beta,k} : \nabla \mathbf{u}_{\beta,k} \\ &+ \sum_{j=1}^{N_e} \mathbf{P}_{\beta,kj} \cdot \mathbf{u}_{\beta,k} + \dot{\omega}_{\beta,k} \left(\mathbf{u}_{\beta,k}^* \cdot \mathbf{u}_{\beta,k} - \frac{1}{2} u_{\beta,k}^2 \right) \end{aligned} \quad (\text{A.2.21})$$

En soustrayant l'équation de l'énergie cinétique du bilan d'énergie totale, on obtient ainsi l'équation du bilan d'énergie interne :

$$\begin{aligned} \partial_t (\rho_{\beta,k} e_{\beta,k}) + \nabla \cdot (\rho_{\beta,k} e_{\beta,k} \mathbf{u}_{\beta,k}) &= -\nabla \cdot \mathbf{q}_{\beta,k} + \boldsymbol{\sigma}_{\beta,k} : \nabla \mathbf{u}_{\beta,k} + \sum_{j=1}^{N_e} Q_{\beta,k,j} + \dot{\omega}_{\beta,k} E_{\beta,k}^* \\ &\quad - \dot{\omega}_{\beta,k} \left(\mathbf{u}_{\beta,k}^* \cdot \mathbf{u}_{\beta,k} - \frac{1}{2} u_{\beta,k}^2 \right) \end{aligned} \quad (\text{A.2.22})$$

En sommant les N_e équations du bilan d'énergie interne associé à chaque espèce k , et en utilisant la définition de l'énergie de mélange Eq. (1.2.1) on obtient :

$$\begin{aligned} \partial_t (\rho_{\beta} e_{\beta}) + \nabla \cdot \left(\sum_{k=1}^{N_e} \rho_{\beta,k} e_{\beta,k} \mathbf{u}_{\beta,k} \right) &= \sum_{k=1}^{N_e} (-\nabla \cdot \mathbf{q}_{\beta,k} + \boldsymbol{\sigma}_{\beta,k} : \nabla \mathbf{u}_{\beta,k}) \\ &\quad - \sum_{k=1}^{N_e} \dot{\omega}_{\beta,k} \left(\mathbf{u}_{\beta,k}^* \cdot \mathbf{u}_{\beta,k} - \frac{1}{2} u_{\beta,k}^2 \right) \end{aligned} \quad (\text{A.2.23})$$

En introduisant la décomposition de la vitesse $\mathbf{u}_{\beta,k} = \mathbf{u}_{\beta} + \mathbf{V}_{\beta,k}$, on obtient :

$$\begin{aligned} \partial_t (\rho_{\beta} e_{\beta}) + \nabla \cdot (\rho_{\beta} e_{\beta} \mathbf{u}_{\beta}) &= -\nabla \cdot \mathbf{q}_{\beta} + \boldsymbol{\sigma}_{\beta} : \nabla \mathbf{u}_{\beta} - \nabla \cdot \left(\sum_{k=1}^{N_e} \rho_{\beta,k} e_{\beta,k} \mathbf{V}_{\beta,k} \right) \\ &\quad + \sum_{k=1}^{N_e} \boldsymbol{\sigma}_{\beta,k} : \nabla \mathbf{V}_{\beta,k} - \sum_{k=1}^{N_e} \dot{\omega}_{\beta,k} \Phi_{\beta,k} \end{aligned} \quad (\text{A.2.24})$$

où on a posé : $\Phi_{\beta,k} = (\mathbf{u}_{\beta,k}^* - \mathbf{u}_{\beta}) \cdot \mathbf{V}_{\beta,k} - \frac{1}{2} V_{\beta,k}^2$ et le terme \mathbf{q}_{β} représente le flux de chaleur du mélange, défini pour un milieu obéissant à la loi de Fourier par :

$$\mathbf{q}_{\beta} = -\lambda_{\beta} \nabla T_{\beta} \quad (\text{A.2.25})$$

où λ_{β} et T_{β} représentent respectivement la conductivité thermique et la température de mélange. L'équation de conservation de l'enthalpie s'obtient à partir de la relation thermodynamique $h_{\beta} = e_{\beta} + P_{\beta}/\rho_{\beta}$ soit :

$$\begin{aligned} \partial_t (\rho_{\beta} h_{\beta}) + \nabla \cdot (\rho_{\beta} h_{\beta} \mathbf{u}_{\beta}) &= -\nabla \cdot \left(\mathbf{q}_{\beta} + \sum_{k=1}^{N_e} \rho_{\beta,k} h_{\beta,k} \mathbf{V}_{\beta,k} \right) + \boldsymbol{\tau}_{\beta} : \nabla \mathbf{u}_{\beta} + \frac{DP_{\beta}}{Dt} \\ &\quad + \sum_{k=1}^{N_e} \boldsymbol{\sigma}_{\beta,k} : \nabla \mathbf{V}_{\beta,k} - \sum_{k=1}^{N_e} \dot{\omega}_{\beta,k} \Phi_{\beta,k} \end{aligned} \quad (\text{A.2.26})$$

En introduisant l'enthalpie sensible d'espèce $H_{\beta,k}$ et l'enthalpie sensible du mélange H_{β} définies par :

$$H_{\beta,k} = \int_{T_0}^{T_{\beta}} C_{p,k} dT = h_{\beta,k} - \Delta h_{f,k}^o \quad (\text{A.2.27})$$

$$\rho_{\beta} H_{\beta} = \sum_{k=1}^{N_e} \rho_{\beta,k} H_{\beta,k} \quad (\text{A.2.28})$$

où $C_{p,k}$ désigne la chaleur massique à pression constante et $\Delta h_{f,k}^o$ représente l'enthalpie de formation de l'espèce k à la température de référence T_0 . En remplaçant h_{β} par $H_{\beta} + \sum_{k=1}^{N_e} \Delta h_{f,k}^o Y_{\beta,k}$ dans

A.3. Bilan d'enthalpie sensible du mélange aux interfaces

l'équation Eq. (A.2.26) et en utilisant l'équation de conservation de la masse des espèces Eq. (A.2.5) l'équation de conservation de l'enthalpie sensible du mélange H_β dans Ω_β s'écrit sous la forme :

$$\begin{aligned} \partial_t (\rho_\beta H_\beta) + \nabla \cdot (\rho_\beta \mathbf{u}_\beta H_\beta) &= -\nabla \cdot \mathbf{q}_\beta + \frac{DP_\beta}{Dt} + \nabla \mathbf{u}_\beta : \boldsymbol{\tau} - \nabla \cdot \left(\sum_{k=1}^{N_e} \rho_\beta Y_{\beta,k} \mathbf{V}_{\beta,k} H_{\beta,k} \right) \\ &+ \dot{\omega}_{\beta,T} + \sum_{k=1}^{N_e} \boldsymbol{\sigma}_{\beta,k} : \nabla \mathbf{V}_{\beta,k} - \sum_{k=1}^{N_e} \dot{\omega}_{\beta,k} \Phi_{\beta,k} \end{aligned} \quad (\text{A.2.29})$$

le terme $\dot{\omega}_{\beta,T}$ représente la quantité de chaleur dégagée par la réaction :

$$\dot{\omega}_{\beta,T} = - \sum_{k=1}^{N_e} \Delta h_{f,k}^o \dot{\omega}_{\beta,k} \quad (\text{A.2.30})$$

Les équations de conservation de quantité de mouvement et d'enthalpie de mélange données par Eqs. (A.2.12)-(A.2.26) sont différentes de la forme proposée par [12, 126, 98, 56]. Brid et al. [12] proposent d'écrire ces équations sous la forme :

$$\partial_t (\rho_\beta \mathbf{u}_\beta) + \nabla \cdot (\rho_\beta \mathbf{u}_\beta \otimes \mathbf{u}_\beta) = \nabla \cdot \boldsymbol{\sigma}_\beta + \rho_\beta \mathbf{g} \quad (\text{A.2.31})$$

$$\partial_t (\rho_\beta h_\beta) + \nabla \cdot (\rho_\beta h \mathbf{u}_\beta) = -\nabla \cdot \mathbf{q}_\beta^t + \boldsymbol{\tau}_\beta : \nabla \mathbf{u}_\beta + \frac{DP_\beta}{Dt} \quad (\text{A.2.32})$$

Pour un mélange multi-espèces \mathbf{q}_β^t représente le flux de chaleur défini par :

$$\mathbf{q}_\beta^t = -\lambda_\beta \nabla T_\beta + \sum_{k=1}^{N_e} \rho_{\beta,k} h_{\beta,k} \mathbf{V}_{\beta,k} + \mathbf{q}_\beta^x \quad (\text{A.2.33})$$

où \mathbf{q}_β^x est un terme généralement négligeable associé à l'effet de thermo-diffusion. La différence entre les deux écritures résulte du fait que le tenseur de contrainte de diffusion est négligé devant le tenseur des contraintes visqueuses et le dernier terme dans l'équation Eq. (A.2.26) est négligé devant le flux de chaleur. Nous adopterons ces simplifications dans la suite du rapport, ainsi, les équations de bilan dans Ω_β s'écrivent :

$$\partial_t (\rho_\beta Y_{\beta,k}) + \nabla \cdot (\rho_\beta Y_{\beta,k} \mathbf{u}_\beta) = -\nabla \cdot (\rho_\beta Y_{\beta,k} \mathbf{V}_{\beta,k}) + \dot{\omega}_{\beta,k} \quad (\text{A.2.34})$$

$$\partial_t \rho_\beta + \nabla \cdot (\rho_\beta \mathbf{u}_\beta) = 0 \quad (\text{A.2.35})$$

$$\partial_t (\rho_\beta \mathbf{u}_\beta) + \nabla \cdot (\rho_\beta \mathbf{u}_\beta \otimes \mathbf{u}_\beta) = \nabla \cdot \boldsymbol{\sigma}_\beta + \rho_\beta \mathbf{g} \quad (\text{A.2.36})$$

$$\begin{aligned} \partial_t (\rho_\beta H_\beta) + \nabla \cdot (\rho_\beta H_\beta \mathbf{u}_\beta) &= -\nabla \cdot \left(\mathbf{q}_\beta + \sum_{k=1}^{N_e} \rho_{\beta,k} H_{\beta,k} \mathbf{V}_{\beta,k} \right) + \boldsymbol{\tau}_\beta : \nabla \mathbf{u}_\beta \\ &+ \frac{DP_\beta}{Dt} + \dot{\omega}_{\beta,T} \end{aligned} \quad (\text{A.2.37})$$

A.3 Bilan d'enthalpie sensible du mélange aux interfaces

La densité volumique des apports d'enthalpie à la phase η résultant des échanges aux interfaces, s'écrit :

$$\mathcal{I}_\eta = -\mathbf{n}_\eta \cdot (\mathbf{q}_\eta^t + \rho_\eta h_\eta (\mathbf{u}_\eta - \mathbf{w})) \quad (\text{A.3.1})$$

Le bilan surfacique sur le mélange diphasique de transfert d'enthalpie aux interfaces s'écrit [126, 123] :

$$\sum_{\eta=\beta,\sigma} \mathcal{I}_\eta = -\mathbf{n}_{\beta\sigma} \cdot (\boldsymbol{\tau}_\beta \cdot (\mathbf{u}_\beta - \mathbf{w})) + \frac{1}{2} \sum_{\eta=\beta,\sigma} \left(\mathbf{n}_\eta \cdot (\mathbf{u}_\eta - \mathbf{w})^2 (\mathbf{u}_\eta - \mathbf{w}) \right) \quad (\text{A.3.2})$$

Les deux termes de membre de droit représentent respectivement la puissance développée par les contraintes de cisaillement lors du transfert de masse aux interfaces et l'apport d'énergie cinétique. La densité volumique des apports d'enthalpie à la phase σ , s'écrit

$$\mathcal{I}_\sigma = \mathbf{n}_{\beta\sigma} \cdot \mathbf{q}_\sigma^t + \mathbf{n}_{\beta\sigma} \cdot (\rho_\sigma (\mathbf{u}_\sigma - \mathbf{w})) h_\sigma \quad (\text{A.3.3})$$

L'enthalpie de formation de solide $\Delta h_{s,k}^0$ est nulle, ainsi l'équation précédente, s'écrit :

$$\mathcal{I}_\sigma = \mathbf{n}_{\beta\sigma} \cdot \mathbf{q}_\sigma + \mathbf{n}_{\beta\sigma} \cdot (\rho_\sigma (\mathbf{u}_\sigma - \mathbf{w})) H_\sigma = \Pi_\sigma \quad (\text{A.3.4})$$

D'autre part, la densité volumique des apports d'enthalpie à la phase continue, s'écrit :

$$\begin{aligned} \mathcal{I}_\beta &= -\mathbf{n}_{\beta\sigma} \cdot (\mathbf{q}_\beta^t + \rho_\beta h_\beta (\mathbf{u}_\beta - \mathbf{w})) \\ &= -\mathbf{n}_{\beta\sigma} \cdot \left(\mathbf{q}_\beta + \sum_{k=1}^{N_e} \mathbf{j}_{\eta,k} h_{\eta,k} + \rho_\beta h_\beta (\mathbf{u}_\beta - \mathbf{w}) \right) \\ &= -\mathbf{n}_{\beta\sigma} \cdot \left(\mathbf{q}_\beta + \sum_{k=1}^{N_e} \mathbf{j}_{\eta,k} h_{\eta,k} + \sum_{k=1}^N \rho_\beta Y_{\eta,k} h_{\eta,k} (\mathbf{u}_\beta - \mathbf{w}) \right) \\ &= -\mathbf{n}_{\beta\sigma} \cdot \mathbf{q}_\beta + \sum_{k=1}^{N_e} \Gamma_{\beta,k} h_{\eta,k} \end{aligned} \quad (\text{A.3.5})$$

En introduisant l'enthalpie la décomposition de l'enthalpie, en enthalpie sensible et enthalpie de formation, on obtient :

$$\begin{aligned} \mathcal{I}_\beta &= -\mathbf{n}_{\beta\sigma} \cdot \mathbf{q}_\beta + \sum_{k=1}^{N_e} \Gamma_{\beta,k} H_{\eta,k} + \sum_{k=1}^{N_e} \Gamma_{\beta,k} \Delta h_{f,k}^0 \\ &= \Pi_\beta + \sum_{k=1}^{N_e} \Gamma_{\beta,k} \Delta h_{f,k}^0 \end{aligned} \quad (\text{A.3.6})$$

A partir des équations Eqs.(A.3.2), (A.3.4) et (A.3.6) le bilan d'enthalpie sensible du mélange s'écrit :

$$\begin{aligned} \Pi_\beta + \Pi_\sigma &= -\sum_{k=1}^{N_e} (\Gamma_{\beta,k} + \Gamma_{\sigma,k}) \Delta h_{f,k}^0 \\ &\quad -\mathbf{n}_{\beta\sigma} \cdot (\boldsymbol{\tau}_\beta \cdot (\mathbf{u}_\beta - \mathbf{w})) + \frac{1}{2} \sum_{\eta=\beta,\sigma} \left(\mathbf{n}_\eta \cdot (\mathbf{u}_\eta - \mathbf{w})^2 (\mathbf{u}_\eta - \mathbf{w}) \right) \\ &= -\sum_{k=1}^{N_e} \Delta h_{f,k}^0 \varpi_k \\ &\quad -\mathbf{n}_{\beta\sigma} \cdot (\boldsymbol{\tau}_\beta \cdot (\mathbf{u}_\beta - \mathbf{w})) + \frac{1}{2} \sum_{\eta=\beta,\sigma} \left(\mathbf{n}_\eta \cdot (\mathbf{u}_\eta - \mathbf{w})^2 (\mathbf{u}_\eta - \mathbf{w}) \right) \end{aligned} \quad (\text{A.3.7})$$

Annexe B

Equations lagrangienne de la phase dispersée

L'objet de cette annexe est de dériver les équations lagrangienne de la phase dispersée à partir des équations locales. Pour cela, nous rappelons que les équations locales de transport dans la phase dispersée s'écrivent :

$$\partial_t \rho_\sigma + \nabla \cdot (\rho_\sigma \mathbf{u}_\sigma) = 0 \quad (\text{B.0.1})$$

$$\partial_t (\rho_\sigma \mathbf{u}_\sigma) + \nabla \cdot (\rho_\sigma \mathbf{u}_\sigma \otimes \mathbf{u}_\sigma) = \rho_\sigma \mathbf{g} \quad (\text{B.0.2})$$

$$\partial_t (\rho_\sigma H_\sigma) + \nabla \cdot (\rho_\sigma \mathbf{u}_\sigma H_\sigma) = -\nabla \cdot \mathbf{q}_\sigma \quad (\text{B.0.3})$$

Pour déterminer les équations d'évolution de masse, de quantité de mouvement et d'enthalpie d'une particule p , nous intégrons les équation locales sur le volume V_p de la particule p , ensuite nous utilisons la théorème de transport de Reynolds et le théorème de la divergence [141], ainsi, on obtient :

$$\frac{dm_p}{dt} = \int_{A_p} \rho_\sigma (\mathbf{u}_\sigma - \mathbf{w}) \cdot \mathbf{n}_{\beta\sigma} dS \quad (\text{B.0.4})$$

$$\frac{dm_p \mathbf{u}_p}{dt} = m_p \mathbf{g} + \int_{A_p} (\mathbf{n}_{\beta\sigma} \cdot (\rho_\sigma (\mathbf{u}_\sigma - \mathbf{w}))) \mathbf{u}_\sigma dS \quad (\text{B.0.5})$$

$$\frac{dm_p H_p}{dt} = \int_{A_p} \mathbf{n}_{\beta\sigma} \cdot (\rho_\sigma (\mathbf{u}_\sigma - \mathbf{w})) H_\sigma + \mathbf{n}_{\beta\sigma} \cdot \mathbf{q}_\sigma dS \quad (\text{B.0.6})$$

m_p , \mathbf{u}_p et H_p représentent respectivement la masse, la vitesse et l'enthalpie de la particule p , définies par :

$$m_p = \int_{V_p} \rho_\sigma dV ; \mathbf{u}_p = \frac{1}{V_p} \int_{V_p} \mathbf{u}_\sigma dV ; H_p = \frac{1}{V_p} \int_{V_p} H_\sigma dV \quad (\text{B.0.7})$$

En utilisant les conditions de saut Eqs. (1.2.43) à (1.2.47), l'équation d'évolution de la vitesse et d'enthalpie de la particule p s'écrivent :

$$\frac{dm_p \mathbf{u}_p}{dt} = m_p \mathbf{g} + \int_{A_p} \mathbf{n}_{\beta\sigma} \cdot (\rho_\beta (\mathbf{u}_\beta - \mathbf{w})) \mathbf{u}_\beta dS - \int_{A_p} (-p_\beta \mathbf{I} + \boldsymbol{\tau}_\beta) \cdot \mathbf{n}_{\beta\sigma} dS \quad (\text{B.0.8})$$

$$\frac{dm_p H_p}{dt} = - \sum_{k=1}^{N_e} \int_{A_p} H_{\beta,k} \Gamma_{\beta,k} dS + \int_{A_p} \mathbf{n}_{\beta\sigma} \cdot \mathbf{q}_\sigma dS - \sum_{k=1}^{N_e} \Delta h_{f,k}^o \int_{A_p} \varpi_k dS \quad (\text{B.0.9})$$

Annexe B. Equations lagrangienne de la phase dispersée

D'autre part, on utilisant la relation Eq. (1.2.43) le condition de saut Eq. (1.2.14), le dernier terme de l'équation précédente, s'écrit :

$$\int_{A_p} \varpi_k \, dS = \int_{A_p} \nu_{\sigma,k} W_k \psi \, dS = \frac{\nu_{\sigma,k} W_k}{\nu_{\sigma,s} W_s} \int_{A_p} \nu_{\sigma,s} W_s \psi \, dS = \frac{\nu_{\sigma,k} W_k}{\nu_{\sigma,s} W_s} \int_{A_p} \Gamma_\sigma \, dS \quad (\text{B.0.10})$$

De le même manière , on trouve :

$$\int_{A_p} H_{\beta,k} \Gamma_{\beta,k} \, dS = \int_{A_p} H_{\beta,k} \varpi_k \, dS = \frac{\nu_{\sigma,k} W_k}{\nu_{\sigma,s} W_s} \int_{A_p} H_{\beta,k} \Gamma_\sigma \, dS \quad (\text{B.0.11})$$

Finalement, les équations lagrangiennes de chaque particule p , s'écrivent :

$$\frac{dm_p}{dt} = \dot{m}_p \quad (\text{B.0.12})$$

$$\frac{dm_p \mathbf{u}_p}{dt} = m_p \mathbf{g} + \mathbf{u}_\beta^{(A_p)} \dot{m}_p + \mathbf{f}_{\beta p} \quad (\text{B.0.13})$$

$$\frac{dm_p H_p}{dt} = Q_p - \sum_{k=1}^{N_e} \frac{\nu_{\sigma,k} W_k}{\nu_{\sigma,s} W_s} H_{\beta,k}^{(A_p)} \dot{m}_p + \Delta H_v \dot{m}_p \quad (\text{B.0.14})$$

où on a posé :

$$\dot{m}_p = \int_{A_p} \rho_\sigma (\mathbf{u}_\sigma - \mathbf{w}) \cdot \mathbf{n}_{\beta\sigma} \, dS \quad (\text{B.0.15})$$

$$\mathbf{f}_{\beta p} = - \int_{A_p} (-p_\beta \mathbf{I} + \boldsymbol{\tau}_\beta) \cdot \mathbf{n}_{\beta\sigma} \, dS \quad (\text{B.0.16})$$

$$Q_{\beta p} = \int_{A_p} \mathbf{q}_\beta \cdot \mathbf{n}_{\beta\sigma} \, dS \quad (\text{B.0.17})$$

$$\mathbf{u}_\beta^{(A_p)} \dot{m}_p = \int_{A_p} \mathbf{u}_\beta \Gamma_\sigma \, dS \quad (\text{B.0.18})$$

$$H_{\beta,k}^{(A_p)} \dot{m}_p = \int_{A_p} H_{\beta,k} \Gamma_\sigma \, dS \quad (\text{B.0.19})$$

$$\Delta H_v = - \sum_{k=1}^{N_e} \frac{\nu_{\sigma,k} W_k}{\nu_{\sigma,s} W_s} \Delta h_{f,k}^\sigma \quad (\text{B.0.20})$$

Annexe C

Propriétés de l'opérateur de moyenne volumique

L'objet de cette annexe est de montrer que l'opérateur de moyenne vérifie la propriété de l'idempotence. Pour cela, nous écrivons le développement en série de Taylor de \bar{a}_β en un point \mathbf{x} autour du centroïde \mathbf{X} :

$$\bar{a}_\beta|_{\mathbf{x}} = \bar{a}_\beta|_{\mathbf{x}} + \mathbf{y} \cdot \nabla \bar{a}_\beta|_{\mathbf{x}} + \frac{1}{2} \mathbf{y} \mathbf{y} : \nabla \nabla \bar{a}_\beta|_{\mathbf{x}} + \dots \quad (\text{C.0.1})$$

où on a posé $\mathbf{y} = \mathbf{x} - \mathbf{X}$

$$\begin{aligned} \alpha_\beta \bar{\bar{a}}_\beta &= \langle \gamma_\beta \bar{a}_\beta \rangle = \langle \gamma_\beta \rangle \bar{a}_\beta|_{\mathbf{x}} + \langle \gamma_\beta \mathbf{y} \rangle \cdot \nabla \bar{a}_\beta|_{\mathbf{x}} + \frac{1}{2} \langle \gamma_\beta \mathbf{y} \mathbf{y} \rangle : \nabla \nabla \bar{a}_\beta|_{\mathbf{x}} + \dots \\ &= \alpha_\beta \bar{a}_\beta|_{\mathbf{x}} + \langle \gamma_\beta \mathbf{y} \rangle \cdot \nabla \bar{a}_\beta|_{\mathbf{x}} + \frac{1}{2} \langle \gamma_\beta \mathbf{y} \mathbf{y} \rangle : \nabla \nabla \bar{a}_\beta|_{\mathbf{x}} + \dots \end{aligned} \quad (\text{C.0.2})$$

Les termes $\langle \gamma_\beta \mathbf{y} \rangle$ et $\langle \gamma_\beta \mathbf{y} \mathbf{y} \rangle$ représentent les moments géométriques, Quintard et Whitaker [107] ont montré que les termes associés aux moments géométriques peuvent être négligés devant le premier terme du second membre de l'équation Eq. (C.0.2) dans un milieu ordonné spatialement périodique. Dans un milieu désordonné Quintard et Whitaker [107] ont montré que $l_\beta \ll r_0$ implique la relation :

$$\nabla \langle \gamma_\beta \mathbf{y} \rangle \ll \alpha_\beta \quad (\text{C.0.3})$$

et que le moment d'ordre 1 peut être estimé par [109] :

$$\langle \gamma_\beta \mathbf{y} \rangle = O(L_\beta \nabla \langle \gamma_\beta \mathbf{y} \rangle) \quad (\text{C.0.4})$$

Ainsi on obtient l'ordre de grandeur du deuxième terme de l'équation Eq. (C.0.2) :

$$\langle \gamma_\beta \mathbf{y} \rangle \cdot \nabla \bar{a}_\beta = O\left(L_\beta \nabla \langle \gamma_\beta \mathbf{y} \rangle \frac{\bar{a}_\beta}{L_\beta}\right) \quad (\text{C.0.5})$$

à partir de l'équation précédente et de la relation Eq. (C.0.4), on obtient :

$$\langle \gamma_\beta \mathbf{y} \rangle \cdot \nabla \bar{a}_\beta \ll \alpha_\beta \bar{a}_\beta \quad (\text{C.0.6})$$

En ce qui concerne le moment d'ordre 2, Quintard et Whitaker [107] ont montré qu'il est de l'ordre de $\alpha_\beta r_0^2$, on peut écrire donc l'ordre de grandeur du troisième terme de l'équation Eq. (C.0.2) sous la forme :

$$\langle \gamma_\beta \mathbf{y} \mathbf{y} \rangle : \nabla \nabla \bar{a}_\beta = O\left(\alpha_\beta r_0^2 \frac{\bar{a}_\beta}{L_\beta^2}\right) \quad (\text{C.0.7})$$

A l'aide de la contrainte de séparation des échelles $r_0 \ll L_\beta$, on obtient :

$$\langle \gamma_\beta \mathbf{y} \mathbf{y} \rangle : \nabla \nabla \bar{a}_\beta \ll \alpha_\beta \bar{a}_\beta \quad (\text{C.0.8})$$

Annexe C. Propriétés de l'opérateur de moyenne volumique

Finalement, l'équation Eq. (C.0.2) devient :

$$\bar{\bar{a}}_\beta = \bar{a}_\beta \quad (\text{C.0.9})$$

On note qu'une démonstration analogique à la précédente en appliquant l'équation Eq. (1.2.49) pour $f = 1$, permet d'écrire les relations suivantes :

$$\langle \bar{a}_\beta |_{\mathbf{x}} \cdot \mathbf{n}_{\beta\sigma} \delta_{\beta\sigma} \rangle = -(\nabla \alpha_\beta) \bar{a}_\beta |_{\mathbf{x}} \quad (\text{C.0.10})$$

$$\langle \nabla \bar{a}_\beta |_{\mathbf{x}} \cdot \mathbf{n}_{\beta\sigma} \delta_{\beta\sigma} \rangle = -(\nabla \alpha_\beta) \cdot \nabla \bar{a}_\beta |_{\mathbf{x}} \quad (\text{C.0.11})$$

D'autre part, la moyenne volumique de produit de deux variables a et b s'écrit :

$$\begin{aligned} \langle \gamma_\beta a_\beta b_\beta \rangle &= \langle \gamma_\beta (\bar{a}_\beta + a'_\beta) (\bar{b}_\beta + b'_\beta) \rangle \\ &= \langle \gamma_\beta \bar{a}_\beta \bar{b}_\beta \rangle + \langle \gamma_\beta \bar{a}_\beta b'_\beta \rangle + \langle \gamma_\beta a'_\beta \bar{b}_\beta \rangle + \langle \gamma_\beta a'_\beta b'_\beta \rangle \end{aligned} \quad (\text{C.0.12})$$

On utilisant la relation d'idempotence, l'équation précédente devient :

$$\begin{aligned} \langle \gamma_\beta a_\beta b_\beta \rangle &= \alpha_\beta \bar{a}_\beta \bar{b}_\beta + \underbrace{\langle \gamma_\beta b'_\beta \rangle}_0 \bar{a}_\beta + \underbrace{\langle \gamma_\beta a'_\beta \rangle}_0 \bar{b}_\beta + \alpha_\beta \overline{a'_\beta b'_\beta} \\ &= \alpha_\beta \bar{a}_\beta \bar{b}_\beta + \alpha_\beta \overline{a'_\beta b'_\beta} \end{aligned} \quad (\text{C.0.13})$$

Annexe D

Résolution du problème de couche limite massique

L'objet de cette annexe est de présenter l'approche classique utilisé pour résoudre le problème de couche limite massique. nous introduisons pour cela les simplifications suivantes :

- L'écoulement est à symétrie sphérique
- Le flux de diffusion suit la loi de Fick et $D_{\beta,k} = D_\beta$
- Les variations de $\rho_\beta D_\beta$ et λ_β au voisinage de la particule sont négligeables
- Le rapport entre la résistance thermique interne et la résistance thermique externe est négligeable devant l'unité (*i.e.* $Bi \ll 1$), cela signifie que la température dans la particule est uniforme
- Une fermeture au premier ordre de taux de réaction hétérogène est proposée ci-dessous :

$$\varpi_k = \nu_{\sigma,k} W_k B e^{-\frac{T_a}{T_p}} Y_{\beta,O_2} \quad (\text{D.0.1})$$

Sous ces hypothèses, les équations de transfert massique au voisinage de la particule s'écrivent :

$$\partial_t (\rho_\beta Y_{\beta,O_2}) + \nabla \cdot (\rho_\beta Y_{\beta,O_2} \mathbf{u}_\beta) = \rho_\beta D_\beta \Delta Y_{\beta,O_2} \quad (\text{D.0.2})$$

$$\partial_t \rho_\beta + \nabla \cdot (\rho_\beta \mathbf{u}_\beta) = 0 \quad (\text{D.0.3})$$

Les relations de saut s'écrivent :

$$\rho_\sigma (\mathbf{u}_\sigma - \mathbf{w}) \cdot \mathbf{n}_{\beta\sigma} = \varpi_s \quad (\text{D.0.4})$$

$$(-\rho_\beta Y_{\beta,O_2} (\mathbf{u}_\beta - \mathbf{w}) + \rho_\beta D_\beta \nabla Y_{\beta,O_2}) \cdot \mathbf{n}_{\beta\sigma} = \varpi_{O_2} \quad (\text{D.0.5})$$

$$\rho_\beta (\mathbf{u}_\beta - \mathbf{w}) \cdot \mathbf{n}_{\beta\sigma} = \rho_\sigma (\mathbf{u}_\sigma - \mathbf{w}) \cdot \mathbf{n}_{\beta\sigma} \quad (\text{D.0.6})$$

D'autre part, en intégrant l'équation Eq.(D.0.4) sur la surface de la particule on obtient :

$$\frac{dm_p}{dt} = \int_{A_p} \varpi_s dS \quad (\text{D.0.7})$$

Nous nous plaçons dans le repère lié à la particule en mouvement avec une vitesse \mathbf{u}_σ constante, les équations Eqs.(D.0.2) et (D.0.3) s'écrivent :

$$\partial_{t^*} (\rho_\beta Y_{\beta,O_2}) + \nabla^* \cdot (\rho_\beta Y_{\beta,O_2} \mathbf{u}_\beta^*) = \rho_\beta D_\beta \Delta^* Y_{\beta,O_2} \quad (\text{D.0.8})$$

$$\partial_{t^*} \rho_\beta + \nabla^* \cdot (\rho_\beta \mathbf{u}_\beta^*) = 0 \quad (\text{D.0.9})$$

De la même manière, les relations de saut (D.0.4) à (D.0.6) s'écrivent :

$$\rho_\sigma \mathbf{w}^* \cdot \mathbf{n}_{\sigma\beta} = \varpi_s \quad (\text{D.0.10})$$

$$(-\rho_\beta Y_{\beta,O_2} (\mathbf{u}_\beta^* - \mathbf{w}^*) + \rho_\beta D_\beta \nabla^* Y_{\beta,O_2}) \cdot \mathbf{n}_{\beta\sigma} = \varpi_{O_2} \quad (\text{D.0.11})$$

$$-\rho_\beta (\mathbf{u}_\beta^* - \mathbf{w}^*) \cdot \mathbf{n}_{\beta\sigma} = \rho_\sigma \mathbf{w}^* \cdot \mathbf{n}_{\beta\sigma} \quad (\text{D.0.12})$$

Annexe D. Résolution du problème de couche limite massique

Nous supposons ici que l'écoulement au voisinage de la particule est quasi-stationnaire et que le transfert par convection dans le repère lié à la particule est négligeable dans le devant le transfert par diffusion, les équations (D.0.8) et (D.0.9) s'écrivent en coordonnées sphériques sous la forme :

$$\rho_\beta D_\beta \frac{d}{dr} \left(r^2 \frac{dY_{\beta, O_2}}{dr} \right) = 0 \quad (\text{D.0.13})$$

$$\frac{d}{dr} (r^2 \rho_\beta u_\beta^*) = 0 \quad (\text{D.0.14})$$

— Les conditions aux limites à la surface réactive r_p et à la couche limite massique δ_Y et thermique δ_T s'écrivent :

$$\begin{aligned} Y_{\beta, O_2} &= Y_{\beta, O_2}^s & \text{en} & \quad r = r_p \\ Y_{\beta, O_2} &= Y_{\beta, O_2}^\infty & \text{en} & \quad r = \delta_Y \end{aligned}$$

— Les relations de saut (D.0.10) à (D.0.12) à l'interface réactive r_p s'écrivent :

$$\rho_\sigma w^* = \varpi_s \quad (\text{D.0.15})$$

$$-\rho_\beta D_{\beta, O_2} \left(\frac{dY_{\beta, O_2}}{dr} \right) = \varpi_{O_2} \quad (\text{D.0.16})$$

$$\rho_\beta (u_\beta^* - w^*) = -\rho_\sigma w^* \quad (\text{D.0.17})$$

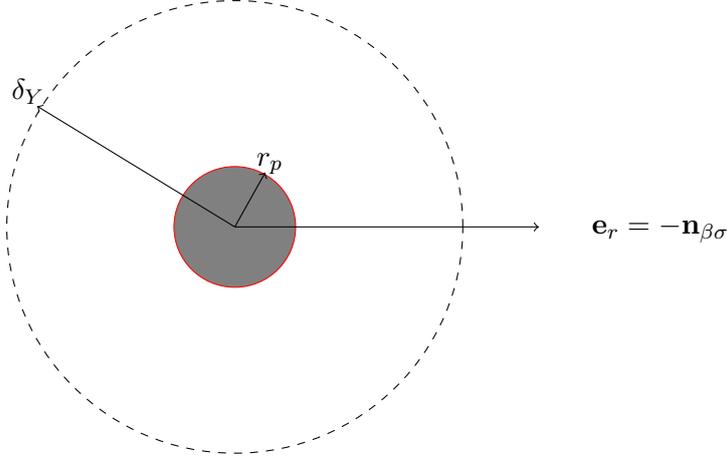


FIGURE D.1 – Couche limite massique

En intégrant l'équation Eq. (D.0.13) entre r_p et r et en utilisant la relation de saut Eq. (D.0.16), on obtient :

$$\rho_\beta D_{\beta, O_2} \frac{\partial Y_{\beta, O_2}}{\partial r} = -\frac{r_p^2}{r^2} \varpi_{O_2} \quad (\text{D.0.18})$$

En intégrant l'équation précédente entre r et δ_Y , et en utilisant la condition limite en δ_Y on obtient :

$$Y_{\beta, O_2} = Y_{\beta, O_2}^\infty + \left(\frac{r_p}{r} - \frac{r_p}{\delta_Y} \right) \frac{\varpi_{O_2}}{\rho_\beta D_{\beta, O_2}} r_p \quad (\text{D.0.19})$$

En introduisant le nombre de Damköhler [87, 86] :

$$\mathcal{D}_a = \frac{|\nu_{\sigma, O_2}| W_{O_2} B e^{-\frac{T_a}{T_p}}}{\rho_\beta D_{\beta, O_2}} r_p \quad (\text{D.0.20})$$

Annexe D. Résolution du problème de couche limite massique

En utilisant l'équation de fermeture du taux de réaction Eq. (D.0.1) et l'équation précédente, l'équation Eqs. (D.0.19) devient :

$$Y_{\beta,O_2} = Y_{\beta,O_2}^\infty - \left(\frac{r_p}{r} - \frac{r_p}{\delta_Y} \right) \mathcal{D}_a Y_{\beta,O_2}^s \quad (\text{D.0.21})$$

La fraction massique de l'oxygène et la température à la surface réactive s'écrivent donc sous la forme :

$$Y_{\beta,O_2}^s = \frac{1}{1 + \left(1 - \frac{r_p}{\delta_Y} \right) \mathcal{D}_a e^{-\frac{T_a}{T_p}}} Y_{\beta,O_2}^\infty \quad (\text{D.0.22})$$

En utilisant les équations Eqs. (D.0.7)-(D.0.1)-(D.0.22), on obtient :

$$\frac{dm_p}{dt} = \frac{\nu_{\sigma,s} W_s B e^{-\frac{T_a}{T_p}}}{1 + \left(1 - \frac{r_p}{\delta_Y} \right) \mathcal{D}_a} A_p Y_{\beta,O_2}^\infty \quad (\text{D.0.23})$$

L'épaisseur de la couche limite massique est définie à partir du nombre de Sherwood [128] :

$$\frac{\delta_Y}{r_p} = \frac{1}{1 - \frac{2}{Sh}} \quad (\text{D.0.24})$$

En général, le nombre de Sherwood peut être estimé à partir de corrélation de Ranz-Marshall [113] :

$$Sh = 2 + 0.6 \text{Re}_p^{1/2} \text{Pr}^{1/3} \quad (\text{D.0.25})$$

Pour une particule placée dans un milieu au repos, on obtient la valeur $Sh = Nu = 2$, ce qui implique que les épaisseurs des couches limites deviennent infinies ($\delta_Y \rightarrow \infty$). Finalement le taux de consommation de la particule s'écrit :

$$\frac{dm_p}{dt} = \frac{\nu_{\sigma,s} W_s B e^{-\frac{T_a}{T_p}}}{1 + \mathcal{D}_a e^{-\frac{T_a}{T_p}}} A_p Y_{\beta,O_2}^\infty \quad (\text{D.0.26})$$

— Régime réactif ($\mathcal{D}_a \ll 1$) : l'oxydation de la particule est limitée par la réaction

$$\frac{dm_p}{dt} = \nu_{\sigma,s} W_s B e^{-\frac{T_a}{T_p}} A_p Y_{\beta,O_2}^\infty \quad (\text{D.0.27})$$

— Régime diffusif ($\mathcal{D}_a \gg 1$) : l'oxydation est limitée par la diffusion

$$\frac{dm_p}{dt} = \frac{\nu_{\sigma,s} W_s}{|\nu_{\sigma,O_2}| W_{O_2}} \frac{\rho_\beta D_{\beta,O_2}}{r_p} A_p Y_{\beta,O_2}^\infty \quad (\text{D.0.28})$$

Annexe E

Résolution des problèmes de fermeture

E.1 Solutions analytique pour la cellule unitaire 1D

L'objet de cette annexe est de présenter la méthode utilisé pour calculer analytiquement les coefficients d'échange associés au milieu stratifié unidimensionnel étudié dans 2.5.1.

Problèmes de Fermeture quasi-stationnaire Pour un problème purement diffusif et unidimensionnel, le problème de fermeture quasi-stationnaire associé aux variables s_p^∞ , s'écrit

$$\frac{d^2 s_p^\infty}{d\hat{x}^2} - \alpha_\beta^{-1} \sum_{k=1}^{N_V} \hat{h}_{pk}^\infty = 0 \quad \text{dans la phase-}\beta \quad (\text{E.1.1})$$

$$s_p^\infty = 1 \quad \text{sur } A_p \quad (\text{E.1.2})$$

$$s_p^\infty = 0 \quad \text{sur } A_j \text{ avec } j \neq p \quad (\text{E.1.3})$$

$$s_p^\infty(\hat{x} + \hat{r}_i) = s_p^\infty(\hat{x}) \quad (\text{E.1.4})$$

$$\langle \gamma_\beta s_p^\infty \rangle = 0 \quad (\text{E.1.5})$$

avec :

$$\hat{h}_{pj}^\infty = \frac{ds_p^\infty}{d\hat{x}} \Big|_{(\hat{x}_j - r_j)} - \frac{ds_p^\infty}{d\hat{x}} \Big|_{(\hat{x}_j + r_j)} \quad (\text{E.1.6})$$

La solution du problème de fermeture peut être construite à partir des polynômes du second degré définis sur les intervalles $]\hat{x}_j; \hat{x}_{j+1}[$ par :

$$s_p^\infty = \frac{1}{2} \alpha_\beta^{-1} \sum_{p=1}^{N_V} \hat{h}_{pj}^\infty \hat{x}^2 + c_p \hat{x} + e_p \quad (\text{E.1.7})$$

En introduisant l'expression précédente dans les problèmes de fermeture, nous obtenons un système linéaire à 3*9 équations. La résolution de ce système avec le logiciel de calcul symbolique Mathematica [68] nous permet de déterminer tous les coefficients polynomiaux. Le fait d'introduire la solution dans l'équation Eq. (E.1.6) conduit à :

$$\hat{h}_{pj}^\infty = \begin{cases} \hat{h}_{11}^\infty ; & \text{si } p = j \\ \hat{h}_{12}^\infty ; & \text{sinon} \end{cases} \quad (\text{E.1.8})$$

E.1. Solutions analytique pour la cellule unitaire 1D

où \hat{h}_{11}^∞ et \hat{h}_{12}^∞ sont définis comme

$$\hat{h}_{11}^\infty = \frac{6}{\alpha_\beta} + \frac{24\alpha_\beta^2}{-36 + \alpha_\beta(38 - 3(1 - \alpha_\beta)\alpha_\beta)} \quad (\text{E.1.9})$$

$$\hat{h}_{12}^\infty = -\frac{3}{\alpha_\beta} + \frac{24\alpha_\beta^2}{-36 + \alpha_\beta(38 - 3(1 - \alpha_\beta)\alpha_\beta)} \quad (\text{E.1.10})$$

Problèmes de fermeture lié aux effets d'histoire Le problème de fermeture instationnaire associé aux variables s_p^* , s'écrit

$$\partial_t s_p^* + \delta(\hat{t})s_p^\infty = \hat{\nabla}^2 s_p^* - \alpha_\beta^{-1} \sum_{k=1}^{N_V} \hat{h}_{pk}^* \quad \text{dans la phase-}\beta \quad (\text{E.1.11})$$

$$s_p^* = 1 - u(\hat{t}) \quad \text{sur } A_p \quad (\text{E.1.12})$$

$$s_p^* = 0 \quad \text{sur } A_j \text{ avec } p \neq j \quad (\text{E.1.13})$$

$$s_p^*(\hat{x} + \hat{r}_i) = s_p^*(\hat{x}) \quad (\text{E.1.14})$$

$$\langle \gamma_\beta s_p^* \rangle = 0 \quad (\text{E.1.15})$$

avec :

$$\hat{h}_{pj}^* = \partial_{\hat{x}} s_p^*|_{(\hat{x}_j - r_j)} - \partial_{\hat{x}} s_p^*|_{(\hat{x}_j + r_j)} \quad (\text{E.1.16})$$

Le problème s'écrit dans le domaine de Laplace sous la forme :

$$\xi \{s_p^*\} + s_p^\infty = \frac{d^2 \{s_p^*\}}{\hat{x}^2} - \alpha_\beta^{-1} \sum_{k=1}^{N_V} \{\hat{h}_{pk}^*\} \quad \text{dans la phase-}\beta \quad (\text{E.1.17})$$

$$\{s_p^*\} = 0 \quad \text{sur } A_p \text{ avec } 1 \leq p \leq N_V \quad (\text{E.1.18})$$

$$\{s_p^*\}(\hat{x} + r_i) = \{s_p^*\}(\hat{x}) \quad (\text{E.1.19})$$

$$\langle \gamma_\beta \{s_p^*\} \rangle = 0 \quad (\text{E.1.20})$$

avec :

$$\{\hat{h}_{pj}^*\} = \frac{d\{s_p^*\}}{d\hat{x}}|_{(\mathbf{x}'_j - r_j)} - \frac{d\{s_p^*\}}{d\hat{x}}|_{(\mathbf{x}'_j + r_j)} \quad (\text{E.1.21})$$

on obtient :

$$\begin{aligned} \{s_p^*\} &= c_p e^{\sqrt{\xi}\hat{x}} + e_p e^{-\sqrt{\xi}\hat{x}} - \frac{1}{\xi} \alpha_\beta^{-1} \sum_{p=1}^{N_V} \{\hat{h}_{pj}^*\} - \alpha_\beta^{-1} \left(\frac{1}{\xi^2} + \frac{\hat{x}^2}{2\xi} \right) \sum_{p=1}^{N_V} \hat{h}_{pj}^\infty \\ &\quad - \frac{c_p \hat{x} + e_p}{\xi} \end{aligned} \quad (\text{E.1.22})$$

Avec la même méthodologie utilisé pour le problème quasi-stationnaire, on obtient :

$$\{\hat{h}_{pj}^*\} = \begin{cases} \{\hat{h}_{11}^*\}; & \text{si } p = j \\ \{\hat{h}_{12}^*\}; & \text{sinon} \end{cases} \quad (\text{E.1.23})$$

$$\begin{aligned} \{\hat{h}_{11}^*\} &= \frac{\alpha_\beta(3 \coth[\kappa] + \tanh[\kappa])}{18\kappa} - \frac{\alpha_\beta(36 - \alpha_\beta(38 - (3 - 7\alpha_\beta)\alpha_\beta))}{6\kappa^2(36 - \alpha_\beta(38 - 3(1 - \alpha_\beta)\alpha_\beta))} \\ &\quad + \frac{2\alpha_\beta^4}{9(1 - \kappa \coth[\kappa])(36 - \alpha_\beta(38 - 3(1 - \alpha_\beta)\alpha_\beta))} \end{aligned} \quad (\text{E.1.24})$$

$$\{\hat{h}_{12}^*\} = \frac{\frac{8\alpha_\beta^4 \kappa^3 e^{-\kappa}}{\kappa \cosh[\kappa] - \sinh[\kappa]} + 108(\kappa - 1)\alpha_\beta + (1 - \alpha_\beta)\alpha_\beta^2(114 - 9\alpha_\beta - 15\alpha^2) - 8\kappa\alpha_\beta^5}{36(\kappa - 1)\kappa^2(36 - \alpha_\beta(38 - 3(1 - \alpha_\beta)\alpha_\beta))} - \frac{\alpha_\beta(3 \coth[\kappa] + \tanh[\kappa])}{36\kappa} \quad (\text{E.1.25})$$

où on a posé $\kappa^2 = \frac{\alpha_\beta^2}{36}\xi$

E.2 Coefficient *lumped* pour un milieu périodique

L'objet de cette annexe est de démontrer que pour un milieu périodique, le coefficient *lumped* utilisé dans la section 2.5.2 peut être calculé à partir d'une cellule unitaire. Pour cela, nous introduisons le variable fermeture *lumped* S^∞ , défini par :

$$S^\infty = \sum_{p=1}^{N_V} s_p^\infty \quad (\text{E.2.1})$$

En sommant les N_V problèmes de fermeture associés à s_p^∞ , on obtient ainsi le problème de fermeture associé à S^∞ :

$$0 = \nabla^2 S^\infty - \alpha_\beta^{-1} \sum_{p=1}^{N_V} \hat{h}_p^\infty \quad \text{dans la phase-}\beta \quad (\text{E.2.2})$$

$$S^\infty = 1 \quad \text{sur } A_p \quad 1 \leq p \leq N_V \quad (\text{E.2.3})$$

$$S^\infty(\mathbf{x} + \mathbf{r}_i) = S^\infty(\mathbf{x}) \quad (\text{E.2.4})$$

$$\langle \gamma_\beta S^\infty \rangle = 0 \quad (\text{E.2.5})$$

avec :

$$\hat{h}_p = \sum_{j=1}^{N_V} \hat{h}_{pj}^\infty = \int_{A_p} \hat{\mathbf{n}}_{\beta\sigma} \cdot \nabla S^\infty d\hat{S} \quad (\text{E.2.6})$$

Le système illustré dans la figure (2.1) est périodique dans toutes les directions, les coefficient h_p ne dépendent pas de p . En conséquence, h_p peut être calculé pour une cellule d'unité.

E.3 Méthode de résolution des problèmes de fermeture quasi-stationnaire

L'objet de cette annexe est de présenter la méthode classique pour résoudre les problèmes de fermeture quasi-stationnaire. Afin d'alléger l'écriture des équations l'indice ∞ sera abandonné dans cette partie, dans ce cas, le problème de fermeture I^∞ s'écrit :

$$\lambda_\beta \nabla^2 s_p - \alpha_\beta^{-1} H_p = 0 \quad \text{dans } \Omega_\beta \quad (\text{E.3.1})$$

$$s_p = 1 \quad \text{sur } A_p \quad (\text{E.3.2})$$

$$s_p = 0 \quad \text{sur } A_p \text{ avec } j \neq p \quad (\text{E.3.3})$$

$$s_p(\mathbf{x} + \mathbf{r}_i) = s_p(\mathbf{x}) \quad \text{sur } A_e \quad (\text{E.3.4})$$

$$\langle \gamma_\beta s_p \rangle = 0 \quad (\text{E.3.5})$$

où on a posé :

$$H_p = \langle \mathbf{n}_{\beta\sigma} \cdot \lambda_\beta \nabla s_p \delta_{\beta\sigma} \rangle \quad (\text{E.3.6})$$

E.3. Méthode de résolution des problèmes de fermeture quasi-stationnaire

Une des principales difficultés associée à la résolution numérique des problèmes de fermeture provient de la nature intégréo-différentielle (intégrale de la solution apparaisse comme terme source dans l'équation (E.3.8)). cette difficulté peut être levée en introduisant la décomposition suivante [102, 104] :

$$s_p = s_p^I + H_p s_p^{II} \quad (\text{E.3.7})$$

Cette décomposition permet de s'affranchir de son caractère intégréo-différentielle et conduit à une résolution plus simple de deux sous-problèmes indépendants suivants :

Problème *I* :

$$\lambda_\beta \nabla^2 s_p^I = 0 \quad \text{dans } \Omega_\beta \quad (\text{E.3.8})$$

$$s_p^I = 1 \quad \text{sur } A_p \quad (\text{E.3.9})$$

$$s_p^I = 0 \quad \text{sur } A_p \text{ avec } j \neq p \quad (\text{E.3.10})$$

$$s_p^I(\mathbf{x} + \mathbf{r}_i) = s_p^I(\mathbf{x}) \quad \text{sur } A_e \quad (\text{E.3.11})$$

$$(\text{E.3.12})$$

Problème *II* :

$$\lambda_\beta \nabla^2 s_p^{II} - \alpha_\beta^{-1} = 0 \quad \text{dans } \Omega_\beta \quad (\text{E.3.13})$$

$$s_p^{II} = 0 \quad \text{sur } A_p \quad (\text{E.3.14})$$

$$s_p^{II} = 0 \quad \text{sur } A_p \text{ avec } j \neq p \quad (\text{E.3.15})$$

$$s_p^{II}(\mathbf{x} + \mathbf{r}_i) = s_p^{II}(\mathbf{x}) \quad \text{sur } A_e \quad (\text{E.3.16})$$

La condition de moyenne nulle sur s_p Eq. (E.3.5) permet de déterminer H_p par la relation :

$$H_p = -\frac{\langle \gamma_\beta s_p^I \rangle}{\langle \gamma_\beta s_p^{II} \rangle} \quad (\text{E.3.17})$$

La variable de fermeture s_p est calculé à partir de l'équation Eq. (E.3.7)

Bibliographie

- [1] T.B. Anderson and R. Jackson. Fluid mechanical description of fluidized beds. equations of motion. *Industrial & Engineering Chemistry Fundamentals*, 6(4) :527–539, 1967.
- [2] K. Annamalai and W. Ryan. Interactive processes in gasification and combustion-ii. isolated carbon, coal and porous char particles. *Progress in Energy and Combustion Science*, 19(5) :383–446, 1993.
- [3] J.A. Arthur. Reactions between oxygen and carbon. *Transactions of the Faraday Society*, 47, 1951.
- [4] J.R. Arthur. Reactions between carbon and oxygen. *Transactions of the Faraday Society*, 47 :164–178, 1951.
- [5] A.B. Ayling and I.W. Smith. Measured temperatures of burning pulverized-fuel particles, and the nature of the primary reaction product. *Combustion and Flame*, 18(2) :173–184, 1972.
- [6] S. Balachandar and M.Y. Ha. Unsteady heat transfer from a sphere in a uniform cross-flow. *Physics of Fluids*, 13(12) :3714–3728, 2001.
- [7] D.R. Ballal. Flame propagation through dust clouds of carbon, coal, aluminium and magnesium in an environment of zero gravity. *Proceedings of the Royal Society of London A : Mathematical, Physical and Engineering Sciences*, 385(1788) :21–51, 1983.
- [8] G.K. Batchelor. The effect of brownian motion on the bulk stress in a suspension of spherical particles. *Journal of fluid mechanics*, 83(1) :97–117, 1977.
- [9] S. Benteboula. *Résolution des équations de Navier-Stokes à faible nombre de Mach. Application à l'étude de l'anneau de vorticit   à masse volumique variable*. PhD thesis, Universit   Paris-Est, 2006.
- [10] M. Bernard. *Approche multi-  chelle pour les   coulements fluide-particules.   cole Doctorale M  canique,   nerg  tique, G  nie civil et Proc  d  s (Toulouse)*, 2014.
- [11] V. K. Bind, S. Roy, and C. Rajagopal. Cfd modelling of dust explosions : Rapid combustion in a 20 l apparatus. *The Canadian Journal of Chemical Engineering*, 89(4) :663–670, 2011.
- [12] R. B. Bird. Transport phenomena. *Applied Mechanics Reviews*, 55(1) :R1–R4, 2002.
- [13] M. Boivin, O. Simonin, and K. D. Squires. Direct numerical simulation of turbulence modulation by particles in isotropic turbulence. *Journal of Fluid Mechanics*, 375 :235–263, 1998.
- [14] P. Bousquet-M  lou. *Mod  lisation macroscopique et simulation num  rique de la solidification des m  langes binaires*. PhD thesis, 2000.
- [15] K. Cannevi  re. *Simulation num  rique directe de la combustion turbulente diphasique : application    l'  tude de la propagation et de la structure des flammes*. PhD thesis, INSA de Rouen, 2003.
- [16] J. Capecelatro and O. Desjardins. An euler–lagrange strategy for simulating particle-laden flows. *Journal of Computational Physics*, 238 :1–31, 2013.
- [17] H. S. Caram and N. R. Amundson. Diffusion and reaction in a stagnant boundary layer about a carbon particle. *Industrial & Engineering Chemistry Fundamentals*, 16(2) :171–181, 1977.
- [18] R. G Carbonell and S. Whitaker. Heat and mass transfer in porous media. In *Fundamentals of transport phenomena in porous media*, pages 121–198. Springer, 1984.
- [19] H.C. Chang. Effective diffusion and conduction in two-phase media : A unified approach. *AIChE Journal*, 29(5) :846–853, 1983.

BIBLIOGRAPHIE

- [20] J. Chastanet. Transport des solvants chlorés en phase gazeuse. effet multiconstituant. *Post doctorat*, 2007.
- [21] F. Cherblanc. *Etude du transport miscible en milieux poreux hétérogènes : Prise en compte du non-équilibre*. PhD thesis, Université Sciences et Technologies-Bordeaux I, 1999.
- [22] E. Climent and J. Magnaudet. Simulation d'écoulements induits par des bulles dans un liquide initialement au repos. *Comptes Rendus de l'Académie des Sciences-Series IIB-Mechanics-Physics-Chemistry-Astronomy*, 324(2) :91–98, 1997.
- [23] E. Climent and J. Magnaudet. Dynamics of a two-dimensional upflowing mixing layer seeded with bubbles : Bubble dispersion and effect of two-way coupling. *Physics of Fluids*, 18(10) :103304, 2006.
- [24] C.T. Cloney, C.T. Ripley, M.J. Pegg, and P.R. Amyotte. Laminar burning velocity and structure of coal dust flames using a unity Lewis number CFD model. *Combustion and Flame*, 190 :87–102, 2018.
- [25] C.T. Cloney, R.C. Ripley, M.J. Pegg, F. Khan, and P.R. Amyotte. Lower flammability limits of hybrid mixtures containing 10 micron coal dust particles and methane gas. *Process Safety and Environmental Protection*, 120 :215–226, 2018.
- [26] C.F.M. Coimbra and R.H. Rangel. Unsteady heat transfer in the harmonic heating of a dilute suspension of small particles. *International journal of heat and mass transfer*, 43(18) :3305–3316, 2000.
- [27] C.T. Crowe, J.D. Schwarzkopf, M. Sommerfeld, and Y. Tsuji. *Multiphase flows with droplets and particles*. CRC press, 2011.
- [28] C.F. Curtiss and J. O. Hirschfelder. Integration of stiff equations. *Proceedings of the National Academy of Sciences*, 38(3) :235–243, 1952.
- [29] D. Cvetkovic, D.M. Cvetković, P. Rowlinson, and S. Simic. *Eigenspaces of graphs*, volume 66. Cambridge University Press, 1997.
- [30] M. D'Amico, O. Dufaud, J.-C. Latché, S. Trélat, and L. Perrin. Parametric study of the explosivity of graphite-metals mixtures. *Journal of Loss Prevention in the Process Industries*, 43 :714–720, 2016.
- [31] Miriam D'Amico. *Étude expérimentale et modélisation des explosions hybrides solides/solides : application au cas des mélanges de poussières graphite/métaux*. PhD thesis, Université de Lorraine, 2016.
- [32] Y. Davit and M. Quintard. Comment on frequency-dependent dispersion in porous media. *Physical Review E*, 86(1) :013201, 2012.
- [33] Y. Davit and M. Quintard. *Handbook of Porous Media*, chapter Theoretical analysis of transport in porous media : Multi-Equation and Hybrid Models for a Generic Transport Problem with Non-Linear Source Terms. Taylor & Francis, 2015.
- [34] Y. Davit and M. Quintard. Technical notes on volume averaging in porous media i : How to choose a spatial averaging operator for periodic and quasiperiodic structures. *Transport in Porous Media*, 119(3) :555–584, 2017.
- [35] P.E. DesJardin, J.D. Felske, and M.D. Carrara. Mechanistic model for aluminum particle ignition and combustion in air. *Journal of propulsion and power*, 21(3) :478–485, 2005.
- [36] O. Dufaud. Application des principes de la securite intrinseque aux explosions de poussières : de la moderation en toutes choses, 2011.
- [37] O. Dufaud, L. Perrin, and M. Traore. Dust/vapour explosions : Hybrid behaviours ? *Journal of Loss Prevention in the Process Industries*, 21(4) :481–484, 2008.
- [38] F. Duval. *Modélisation du renoyage d'un lit de particules : contribution a l'estimation des propriétés de transport macroscopiques*. PhD thesis, Toulouse, INPT, 2002.

- [39] F. Duval, F. Fichot, and M. Quintard. A local thermal non-equilibrium model for two-phase flows with phase-change in porous media. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 47(3) :613–639, 2004.
- [40] T. Echehki. Asymptotic analysis of steady two-reactant premixed flames using a step-function reaction rate model. *Combustion and Flame*, 172 :280–288, 2016.
- [41] R.K. Eckhoff. *Dust explosions in the process industries : identification, assessment and control of dust hazards*. Elsevier, 2003.
- [42] R.K. Eckhoff. Current status and expected future trends in dust explosion research. *Journal of Loss Prevention in the Process Industrie*, 18 :225–237, 2005.
- [43] A. Einstein. Eine neue bestimmung der moleküldimensionen. *Annalen der Physik*, 324(2) :289–306, 1906.
- [44] S. Elghobashi. Particle-laden turbulent flows : direct simulation and closure models. In *Computational fluid Dynamics for the Petrochemical Process Industry*, pages 91–104. Springer, 1991.
- [45] L.S. Fan and C. Zhu. *Principles of gas-solid flows*. Cambridge University Press, 2005.
- [46] A. Favre, L.S.G. Kovaszny, R. Dumas, J. Gaviglio, and M. Coantic. La turbulence en mécanique des fluides. *Gauthier Villars*, 1976.
- [47] Z.G. Feng and Efstathios E. Michaelides. Unsteady heat transfer from a sphere at small peclet numbers. *Journal of fluids engineering*, 118(1) :96–102, 1996.
- [48] J.H. Ferziger and T. Echehki. A simplified reaction rate model and its application to the analysis of premixed flames. *Combustion science and technology*, 89(5-6) :293–315, 1993.
- [49] M.A. Field. Rate of combustion of size-graded fractions of char from a low-rank coal between 1 200 k and 2 000 k. *Combustion and Flame*, 13(3) :237–252, 1969.
- [50] E.N. Fuller, P.D. Schettler, and J. C. Giddings. New method for prediction of binary gas-phase diffusion coefficients. *Industrial & Engineering Chemistry*, 58(5) :18–27, 1966.
- [51] W. Gao, T. Mogi, J. Yu, X. Yan, J. Sun, and R. Dobashi. Flame propagation mechanisms in dust explosions. *Journal of Loss Prevention in the Process Industries*, 36 :186–194, 2015.
- [52] L. Gastaldo, Babik F., F. Duval, C. Lapuerta, and J.C. Latché. Simulation of accelerated deflagration using the P²REMICS software. In NURETH Organization, editor, *International Topical Meeting on Nuclear Reactor Thermal Hydraulics*, volume 17, 2017.
- [53] R. Gatignol. The faxén formulas for a rigid particle in an unsteady non-uniform stokes-flow. *Journal de Mécanique théorique et appliquée*, 2(2) :143–160, 1983.
- [54] C. Georgakis, J. Congalidis, and Y.Y. Lee. Physical interpretation of the feasibility region in the combustion of char by use of single and double film theories. *Industrial & Engineering Chemistry Fundamentals*, 19(1) :98–103, 1980.
- [55] L.G. Gibilaro, K. Gallucci, R. Di Felice, and P. Pagliai. On the apparent viscosity of a fluidized bed. *Chemical engineering science*, 62(1) :294–300, 2007.
- [56] V. Giovangigli. Multicomponent flow modeling. *Science China Mathematics*, 55(2) :285–308, 2012.
- [57] F. Golfier, M. Quintard, and S. Whitaker. Heat and mass transfer in tubes : An analysis using the method of volume averaging. *Journal of Porous Media*, 5(3), 2002.
- [58] A.L. Graham. On the viscosity of suspensions of solid spheres. *Applied Scientific Research*, 37(3-4) :275–286, 1981.
- [59] W.G. Gray. A derivation of the equations for multi-phase transport. *Chemical Engineering Science*, 30(2) :229–233, 1975.
- [60] J. Guo, M. Quintard, and F. Laouafa. Dispersion in porous media with heterogeneous nonlinear reactions. *Transport in Porous Media*, 109(3) :541–570, 2015.

BIBLIOGRAPHIE

- [61] P. Gupta, A.K. Sadhukhan, and R.K. Saha. Analysis of the combustion reaction of carbon and lignite char with ignition and extinction phenomena : shrinking sphere model. *International Journal of Chemical Kinetics*, 39(6) :307–319, 2007.
- [62] Man Yeong Ha and Byeong Ryun Choi. A numerical study on the combustion of a single carbon particle entrained in a steady flow. *Combustion and Flame*, 97(1) :1–16, 1994.
- [63] J. He and O. Simonin. Non-equilibrium prediction of the particle-phase stress tensor in vertical pneumatic conveying. *ASME-PUBLICATIONS-FED*, 166 :253–253, 1993.
- [64] L. Hervo. *Simulation numérique de l'écoulement d'un mélange air et phase dispersée pour l'allumage d'une chambre de combustion aéronautique via un formalisme Euler Lagrange*. PhD thesis, Institut Supérieur de l'Aéronautique et de l'Espace, 2017.
- [65] A.T Hjelmfelt and L.F. Mockros. Motion of discrete particles in a turbulent fluid. *Applied Scientific Research*, 16(1) :149–161, 1966.
- [66] R.A. Horn and C.R. Johnson. *Matrix analysis*. Cambridge university press, 1990.
- [67] J.B. Howard, G.C. Williams, and D.H. Fine. Kinetics of carbon monoxide oxidation in postflame gases. In *Symposium (International) on Combustion*, volume 14, pages 975–986. Elsevier, 1973.
- [68] Wolfram Research, Inc. Mathematica, Version 11.3. Champaign, IL, 2018.
- [69] M. Iseli. In-vessel hydrogen deflagration and detonation in ITER-FEAT. *Fusion Engineering and Design*, 54(3) :421–430, 2001.
- [70] A. Janès and J. Chaineaux. Explosions de poussières dans les lieux de travail. INRS documentation 2331-220, INERIS, 2010.
- [71] G. Janeschitz. Plasma-wall interaction issues in ITER. *Journal of Nuclear Materials*, 290-293 :1–11, 2001.
- [72] L.N. Khitrin. Fundamental principles of carbon combustion and factors intensifying the burning of solid fuels. In *Symposium (International) on Combustion*, volume 6, pages 565–573. Elsevier, 1957.
- [73] R. Krishna and J.A. Wesselingh. The maxwell-stefan approach to mass transfer. *Chemical Engineering Science*, 52(6) :861–911, 1997.
- [74] K.K. Kuo. *Principles of combustion*. Number TJ254. 5 K85 2005. 2005.
- [75] P. Landereau. *Modèles macroscopiques pour les écoulements monophasiques en milieu poreux fracturé : Application aux tests de puits*. PhD thesis, Paris, ENSAM, 2000.
- [76] N.M. Laurendeau. Heterogeneous kinetics of coal char gasification and combustion. *Progress in energy and combustion science*, 4(4) :221–270, 1978.
- [77] F. Laurent and M. Massot. Multi-fluid modelling of laminar polydisperse spray flames : origin, assumptions and comparison of sectional and sampling methods. *Combustion theory and modelling*, 5(4) :537–572, 2001.
- [78] B. Lewis and G. Von Elbe. *Combustion, flames and explosions of gases*. Elsevier, 2012.
- [79] P.A. Libby and T.R. Blake. Theoretical study of burning carbon particles. *Combustion and Flame*, 36 :139–169, 1979.
- [80] P.A. Libby and T.R. Blake. Burning carbon particles in the presence of water vapor. *Combustion and Flame*, 41 :123–147, 1981.
- [81] Y. Ling, S. Balachandar, and M. Parmar. Inter-phase heat transfer and energy coupling in turbulent dispersed multiphase flows. *Physics of Fluids*, 28(3) :033304, 2016.
- [82] A.N. Lipatnikov. *Modeling and Simulation of Turbulent Combustion*, chapter RANS Simulations of Premixed Turbulent Flames. Energy, Environment, and Sustainability. Springer, 2018.
- [83] J. Lux. *Comportement thermique macroscopique de milieux fibreux réels anisotropes : étude basée sur l'analyse d'images tridimensionnelles*. PhD thesis, Université Sciences et Technologies-Bordeaux I, 2005.

- [84] W. Magnus. On the exponential solution of differential equations for a linear operator. *Communications on pure and applied mathematics*, 7(4) :649–673, 1954.
- [85] A. Majda and J. Sethian. The derivation and numerical solution of the equations for zero mach number combustion. *Combustion science and technology*, 42(3-4) :185–205, 1985.
- [86] A. Makino. An approximate explicit expression for the combustion rate of a small carbon particle. *Combustion and flame*, 90(2) :143–154, 1992.
- [87] A. Makino and C.K. Law. Quasi-steady and transient combustion of a carbon particle : Theory and experimental comparisons. In *Symposium (International) on Combustion*, volume 21, pages 183–191. Elsevier, 1988.
- [88] M.R. Maxey and J.J. Riley. Equation of motion for a small rigid sphere in a nonuniform flow. *Physics of Fluids (1958-1988)*, 26(4) :883–889, 1983.
- [89] E.E. Michaelides and Z. Feng. Heat transfer from a rigid sphere in a nonuniform flow and temperature field. *International journal of heat and mass transfer*, 37(14) :2069–2076, 1994.
- [90] C. Moyne. Two-equation model for a diffusive process in porous media using the volume averaging method with an unsteady-state closure. *Advances in Water Resources*, 20(2-3) :63–76, 1997.
- [91] A.S. Mukasya and A.S. Rogachev. Discrete reaction waves : Gasless combustion of solid powder mixtures. *Progress in Energy and Combustion Science*, 34 :377–416, 2008.
- [92] M.F.R. Mulcahy and I.W. Smith. Kinetics of combination of pulverized fuel. a review of theory and experiment. 1969.
- [93] A. Neophytou and E. Mastorakos. Simulations of laminar flame propagation in droplet mists. *Combustion and Flame*, 156 :1627–1640, 2009.
- [94] M. Nifuku, T. Matsuda, and H. Enomoto. Recent development of standardization of testing methods for dust explosion in japan. *Journal of Loss Prevention in the Process Industries*, 13(3-5) :243–251, 2000.
- [95] H.Y. Park and Y.H. Park. Laminar burning velocities of atmospheric coal air mixtures. *Journal of Electric Power and Energy*, 2(1) :89–96, 2016.
- [96] D. Paulhiac. *Modélisation de la combustion d'un spray dans un bruleur aéronautique*. PhD thesis, 2015.
- [97] N. Peters. The turbulent burning velocity for large-scale and small-scale turbulence. *Journal of Fluid Mechanics*, 384 :107–132, 1999.
- [98] T. Poinso and D. Veynante. *Theoretical and numerical combustion*. RT Edwards, Inc., 2005.
- [99] C. Proust. Turbulent flame propagation in large dust clouds. *Journal of Loss Prevention in the Process Industries*, 49 :859–869, 2017.
- [100] M. Quintard. Description des écoulements multiphasiques multicomposants. Cours de DEA Mécanique, 1995.
- [101] M. Quintard, L. Bletzacker, D. Chenu, and S. Whitaker. Nonlinear, multicomponent, mass transport in porous media. *Chemical Engineering Science*, 61(8) :2643–2669, 2006.
- [102] M. Quintard, M. Kaviany, and S. Whitaker. Two-medium treatment of heat transfer in porous media : numerical results for effective properties. *Advances in water resources*, 20(2-3) :77–94, 1995.
- [103] M. Quintard, M. Kaviany, and S. Whitaker. Two-medium treatment of heat transfer in porous media : numerical results for effective properties. *Advances in water resources*, 20(2-3) :77–94, 1997.
- [104] M. Quintard and S. Whitaker. One-and two-equation models for transient diffusion processes in two-phase systems. In *Advances in heat transfer*, volume 23, pages 369–464. Elsevier, 1993.

BIBLIOGRAPHIE

- [105] M. Quintard and S. Whitaker. Transport in ordered and disordered porous media : volume-averaged equations, closure problems, and comparison with experiment. *Chemical Engineering Science*, 48(14) :2537–2564, 1993.
- [106] M. Quintard and S. Whitaker. Convection, dispersion, and interfacial transport of contaminants : Homogeneous porous media. *Advances in Water resources*, 17(4) :221–239, 1994.
- [107] M. Quintard and S. Whitaker. Transport in ordered and disordered porous media i : The cellular average and the use of weighting functions. *Transport in porous media*, 14 :163–177, 1994.
- [108] M. Quintard and S. Whitaker. Transport in ordered and disordered porous media ii : Generalized volume averaging. *Transport in porous media*, 14 :179–206, 1994.
- [109] M. Quintard and S. Whitaker. Transport in ordered and disordered porous media iv : Computer generated porous media for three-dimensional systems. *Transport in Porous Media*, 15(1) :51–70, 1994.
- [110] M. Quintard and S. Whitaker. Local thermal equilibrium for transient heat conduction : theory and comparison with numerical experiments. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 38(15) :2779–2796, 1995.
- [111] M. Quintard and S. Whitaker. *Theoretical analysis of transport in porous media*. Marcel Dekker Inc., New York, 2000.
- [112] R.H. Rangel and W.A. Sirignano. An evaluation of the point-source approximation in spray calculations. *Numerical heat transfer*, 16(1) :37–57, 1989.
- [113] W.E. Ranz, W.R. Marshall, et al. Evaporation from drops. *Chem. Eng. Prog*, 48(3) :141–146, 1952.
- [114] R.C. Reid, J.M. Prausnitz, and B.E. Poling. *The properties of gases and liquids*. 1987.
- [115] J. Reveillon and L. Vervisch. Analysis of weakly turbulent dilute-spray flames and spray combustion regimes. *Journal of Fluid Mechanics*, 537 :317–347, 2005.
- [116] M.L. Rightley and F.A. Williams. Analytical approximations for structures of wet co flames with one-step reduced chemistry. *Combustion and flame*, 101(3) :287–301, 1995.
- [117] M.L. Rightley and F.A. Williams. Burning velocities of co flames. *Combustion and Flame*, 110(3) :285–297, 1997.
- [118] M. Rubel, M. Cecconello, J.A. Malmberg, G. Sergienko, W. Biel, J.R. Drake, A. Hedqvist, A. Huber, and V. Philipps. Dust particles in controlled fusion devices : morphology, observations in the plasma and influence on the plasma performance. *Nuclear Fusion*, 41(8) :1087, 2001.
- [119] M. Rubel, J. Von Seggern, P. Karduck, V. Philipps, and A. Vevecka-Priftaj. Analysis and oxidation of thick deposits on textor plasma facing components. *Journal of nuclear materials*, 266 :1185–1190, 1999.
- [120] U.S Chemical Safety and Hazard Investigation Board. Combustible dust hazard study. report no. 2006-h-1. *Journal of Loss Prevention in the Process Industries*, 2006.
- [121] M. Silvestrini, B. Genova, and F.J.L Trujillo. Correlations for flame speed and explosion overpressure of dust clouds inside industrial enclosures. *Journal of Loss Prevention in the process industries*, 21 :374–392, 2008.
- [122] J.A. Simeonov, S. Bateman, and J. Calantoni. Filter width and uncertainty estimation in continuum modeling of particle phases. *International Journal of Multiphase Flow*, 74 :79–83, 2015.
- [123] O. Simonin. Modélisation numérique des écoulements turbulents diphasiques à inclusions dispersées. *École de Printemps de Mécanique des Fluides numériques*, 1991.
- [124] O. Simonin. Continuum modelling of dispersed two-phase flows. *Lecture series-van Kareman Institute for fluid dynamics*, 2 :K1–K47, 1996.
- [125] T. Skjold, B.J. Arntzen, O.R. Hansen, I.E. Storvik, and R.K. Eckhoff. Simulation of dust explosions in complex geometries with experimental input from standardized tests. *Journal of Loss Prevention in the process industries*, 19 :210–217, 2006.

- [126] J.C. Slattery. *Advanced transport phenomena*. Cambridge University Press, 1999.
- [127] L Douglas Smoot and M Duane Horton. Propagation of laminar pulverized coal-air flames. *Progress in Energy and Combustion Science*, 3(4) :235–258, 1977.
- [128] S.V. Sotirchos, B. Srinivas, and N.R. Amundson. Modelling of the combustion of single char particles. *Reviews in Chemical Engineering*, 2(3-4) :175–236, 1984.
- [129] H. Stehfest. Algorithm 368 : Numerical inversion of laplace transforms [d5]. *Communications of the ACM*, 13(1) :47–49, 1970.
- [130] R. Sun and H. Xiao. Diffusion-based coarse graining in hybrid continuum–discrete solvers : Theoretical formulation and a priori tests. *International Journal of Multiphase Flow*, 77 :142–157, 2015.
- [131] F.D. Tang, S. Goroshin, and A.J. Higgins. Modes of particle combustion in iron dust flames. *Proceedings of the Combustion Institute*, 33(2) :1975–1982, 2011.
- [132] R. Taylor and R. Krishna. *Multicomponent mass transfer*, volume 2. John Wiley & Sons, 1993.
- [133] S. Trélat. Dust explosion risk during graphite-moderated reactors decommissioning. In *International conference of agricultural engineering*, 2012.
- [134] H. Tsuji and K. Matsui. An aerothermochemical analysis of combustion of carbon in the stagnation flow. *Combustion and flame*, 26 :283–297, 1976.
- [135] A. Umemura and S. Takamori. Percolation theory for flame propagation in non- or less-volatile fuel spray : A conceptual analysis to group combustion excitation mechanism. *Combustion and Flame*, 141 :336–349, 2005.
- [136] P.G.J. Van der Wel. Ignition and propagation of dust explosions. 1993.
- [137] J.P. Van Dorselaere, D. Perrault, M. Barrachin, A. Bentaib, J. Bez, P. Cortes, C. Seropian, N. Trégourès, and J. Vendel. R&d on support to iter safety assessment. *Fusion Engineering and Design*, 84(7-11) :1905–1911, 2009.
- [138] C. Viozat. *Calcul d'écoulements stationnaires et instationnaires à petit nombre de Mach, et en maillages étirés*. PhD thesis, 1998.
- [139] R.E. Walker and A.A. Westenberg. Molecular diffusion studies in gases at high temperature. iv. results and interpretation of the co₂-o₂, ch₄-o₂, h₂-o₂, co-o₂, and h₂o-o₂ systems. *The Journal of Chemical Physics*, 32(2) :436–442, 1960.
- [140] S. Whitaker. Forced convection heat transfer correlations for flow in pipes, past flat plates, single cylinders, single spheres, and for flow in packed beds and tube bundles. *AIChE Journal*, 18(2) :361–371, 1972.
- [141] S. Whitaker. A simple geometrical derivation of the spatial averaging theorem. *Chemical engineering education*, 19(1), 1985.
- [142] S. Whitaker. Coupled transport in multiphase systems : a theory of drying. *Advances in heat transfer*, 31 :1–104, 1998.
- [143] S. Whitaker. *The method of volume averaging, theory and applications of transport in porous media*. Kluwer Academic publishers, 1999.
- [144] S. Whitaker. Theory and applications of transport in porous media : The method of volume averaging. *The Netherlands : Kluwer Academic Publishers*, 1999.
- [145] S. Whitaker. Derivation and application of the stefan-maxwell equations. *Revista Mexicana de Ingeniería Química*, 8(3) :213–244, 2009.
- [146] S. Whitaker. Mechanics and thermodynamics of diffusion. *Chemical engineering science*, 68(1) :362–375, 2012.
- [147] F.A. Williams. *Combustion Theory*. The Benjamin/Cummings Publishing Company, 1985.
- [148] C. Yang, M. Quintard, and G. Debenest. Upscaling for adiabatic solid–fluid reactions in porous medium using a volume averaging theory. *Transport in Porous Media*, 108(2) :497–529, 2015.

BIBLIOGRAPHIE

- [149] F. Zanotti and R.G. Carbonell. Development of transport equations for multiphase system-i : General development for two phase system. *Chemical Engineering Science*, 39(2) :263–278, 1984.
- [150] D.Z. Zhang and A. Prosperetti. Momentum and energy equations for disperse two-phase flows and their closure for dilute suspensions. *International Journal of Multiphase Flow*, 23(3) :425–453, 1997.
- [151] H.Y. Zhang and X.Y. Huang. A two-equation analysis of convection heat transfer in porous media. *Transport in porous media*, 44(2) :305–324, 2001.

Résumé

La présence de fines particules de matières oxydables est rencontrée dans de nombreuses situations industrielles. Le risque d'explosion de poussières présente une menace constante pour les industries de transformation qui fabriquent, utilisent ou manipulent des poudres ou des poussières de matières combustibles. Dans le secteur nucléaire, les scénarios envisagés traitent, en particulier, le risque d'explosion de poussières de graphite liées aux opérations de démantèlement des réacteurs Uranium Naturel Graphite Gaz. La problématique considérée, dans le cadre de ce travail de thèse, est celle de la combustion d'un mélange dilué gaz-particules. L'objectif de cette thèse est de développer un modèle Euler-Lagrange macroscopique permettant de prédire la vitesse laminaire de flamme qui est une des données essentielles pour les modèles de vitesse de flamme turbulente utilisés dans l'évaluation des risques d'explosion de poussières. Dans un premier temps, les équations macroscopiques de transferts massique et thermique sont dérivées à partir de la méthode de prise de moyenne volumique. L'intérêt de l'approche utilisée ici est de proposer des problèmes de fermeture permettant d'estimer les coefficients de transferts effectifs, tels que les coefficients d'échanges thermiques et le coefficient effectif de la réaction hétérogène. Dans un deuxième temps, des simulations Euler-Lagrange sont utilisées pour déterminer la vitesse de flamme laminaire diphasique plane en fonction des caractéristiques du mélange gazeux et des poussières de graphite. Le modèle proposé dans ce travail est comparé au modèle Euler-Lagrange classique basé sur la résolution du problème de couche limite pour une particule isolée en milieu infini. Cette étude montre que les effets du taux de dilution et des échanges indirects entre les particules ne sont pas systématiquement négligeables dans les échanges macroscopiques entre les deux phases. D'autre part, la présente étude laisse entrevoir la potentialité de l'approche proposée pour les simulations détaillées de l'écoulement diphasique.

Mots clés : Combustion, modélisation multi-échelle, écoulement diphasique, transferts de chaleur et de masse, approche Euler-Lagrange, prise de moyenne volumique, vitesse de flamme laminaire, réaction hétérogène.

Abstract

The presence of fine particles of oxidizable materials is encountered in many industrial situations. The risk of dust explosion presents a constant threat in transformation industries that manufacture, use or manipulate powders or combustible materials dusts. In nuclear safety analysis, one of the main scenarios is the risk of graphite dust explosion that may occur during decommissioning operations of Uranium Natural Graphite Gas reactors. The issue considered in this thesis is related to combustion of a dilute gas-particle mixture. This work aims at developing a macroscopic Euler-Lagrange model for predicting laminar flame velocity, which is one of the essential data for turbulent flame velocity models used to evaluate the risk of dust explosion. First, the macroscopic heat and mass transfer equations are derived using the volume averaging method. The major interest of the proposed approach is to provide closure problems that allow to estimate the effective transport coefficients, such as heat exchange coefficients and the effective coefficient of the heterogeneous reaction. Second, Euler-Lagrange simulations are used to determine the plane two-phase laminar flame velocity as a function of gas mixture and graphite dust characteristics. The proposed model is compared to the classical Euler-Lagrange model based on the resolution of the boundary layer problem in the vicinity of an isolated particle in an infinite medium. Results show that the dilution rate and the indirect particle-particle exchanges are not systematically negligible in the macroscopic exchanges between the two-phases. On the other hand, this study suggests the potentiality of the proposed approach for detailed simulations of two-phase flow.

Key words: Combustion, multi-scale modelling, two-phase flow, heat and mass transfer, Euler-Lagrange approach, volume averaging method, laminar burning velocity, heterogeneous reactions