



HAL
open science

**Modélisation de la combustion turbulente via une
méthode de tabulation de la cinétique chimique détaillée
couplée à des fonctions de densités de probabilité.
Application aux foyers aéronautiques**

Matthieu Rullaud

► **To cite this version:**

Matthieu Rullaud. Modélisation de la combustion turbulente via une méthode de tabulation de la cinétique chimique détaillée couplée à des fonctions de densités de probabilité. Application aux foyers aéronautiques. Physique [physics]. INSA de Rouen, 2004. Français. NNT : . tel-00006868

HAL Id: tel-00006868

<https://theses.hal.science/tel-00006868>

Submitted on 10 Sep 2004

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

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

THESE

présentée

par

Rullaud Matthieu

A L'INSA DE ROUEN

Pour l'obtention du grade de

Docteur

Discipline : Energétique

Spécialité : Mécanique des fluides

**Modélisation de la combustion turbulente via une méthode
de tabulation de la cinétique chimique détaillée
couplée à des fonctions densités de probabilité.
Application aux foyers aéronautiques.**

soutenu le 1^{er} juin 2004

Rapporteurs

Ken Bray

Professeur Emérite, Cambridge Uni. (U.K.)

Hui Ying Wang

Chargé de recherche au CNRS.

Composition du jury

Abdelkrim Boukhalfa

Professeur, INSA de Rouen.

Michel Cazalens

Expert senior combustion, Snecma.

Denis Veynante

Directeur de recherche au CNRS, EM2C

Luc Vervisch

Professeur, INSA de Rouen.



L'avion militaire "Rafale" équipé de deux moteurs Snecma M88-2

Remerciements

Je tiens à exprimer ma reconnaissance à Messieurs Michel Trinité et Michel Ledoux pour m'avoir accueilli au sein du CORIA et ainsi m'avoir permis de réaliser une thèse dans d'excellentes conditions de travail.

Je remercie Luc Vervicsh et Michel Cazalens pour m'avoir fait confiance et pour avoir brillamment conduit cette thèse. Votre expérience, votre disponibilité, votre implication et votre gentillesse ont été des atouts essentiels pour ce travail et pour mes projets d'avenir.

Mes remerciements vont également à tous les membres du jury pour avoir apporté un grand intérêt à cette étude. Merci aux rapporteurs, Ken Bray et Hui Ying Wang d'avoir examiné cette thèse, Abdelkrim Boukhalfa d'avoir présidé ce jury et Denis Veynante, Michel Cazalens, Luc Vervisch pour votre implication dans ce travail.

Merci au personnel de Snecma Moteurs pour leur motivation et leur réactivité dans ce travail et à Christophe Baudouin de m'avoir accueilli aujourd'hui dans son équipe.

Je remercie toutes les personnes avec qui j'ai passé du temps que ce soit dans le travail ou dans les moments de détente. Merci Karine, Jéjé et Christelle pour tous ces moments toujours aussi agréables en votre compagnie, Cyrille pour ton aide et ta gentillesse, Cécile et Sandra vos services et un petit clin d'œil à JP pour ton aide.

Bien sûr ces remerciements vont à toutes les personnes présentes ce 1^{er} juin 2004 et en particulier toute ma famille : Papa, Maman, Anselme, So, Fréd, Cricri, Nelly, Val, Pepette (désolé!), Nono, kiki, Tati, Mamie, Tata, sans oublier Philippe et Valérie qui trouvent presque toujours leur chemin ...

Un grand merci à mon amour et pour ne pas la citer Frédérique Saffray, Pupuce, ou ces jours-ci Popotamus pour tous les moments passés avec toi.

Enfin, merci Topaze pour me réveiller la nuit et me faire arriver au travail à des heures impossibles. Ton travail est accompli et la relève arrive ...

À Frédérique

Table des matières

Nomenclature	v
Préambule	2
Introduction	4
I MÉTHODES DE TABULATION DE LA CINÉTIQUE CHIMIQUE	24
1 Structures des flammes laminaires	26
1.1 Les flammes de diffusion à contre-courant	27
1.1.1 L'étirement local	27
1.1.2 Le point de stagnation	31
1.1.3 Le taux de dissipation scalaire	31
1.2 Les flammes prémélangées laminaires	33
1.2.1 Les zones de réaction	33
1.2.2 La vitesse de flamme laminaire	35
1.2.3 Méthode FPI, Flame Prolongation of ILDM (Gicquel, 1999)	36
1.3 Méthodes de calcul des paramètres de contrôle	40
1.3.1 La fraction de mélange	40
1.3.2 La variable d'avancement	45
1.4 Différences entre les flammes laminaires prémélangées et de diffusion	50
1.4.1 Les réactifs	50
1.4.2 Les produits de combustion et la température	52
1.4.3 Les polluants	52
1.5 Conclusion	58
2 Flammes prémélangées utilisées pour tabuler les flammes de diffusion	60
2.1 Méthode de comparaison	60
2.2 Dihydrogène/air ($Le=1$)	62
2.3 Méthane/air ($Le=1$)	65

2.4	Méthane/air ($Le \neq 1$)	67
3	Analyse de la structure interne des flammes partiellement prémélangées	72
3.1	Configuration	72
3.2	Combustion Hydrogène / Hélium / air	77
3.3	Combustion Méthane / air	85
4	Flammes prémélangées pour tabuler les flammes partiellement prémélangées	110
4.1	Méthode de comparaison	111
4.2	Comparaisons Expérience / Diffusion / Prémélange, limitées aux domaines des flammelettes de diffusion à contre-courant	112
4.3	Expérience / FPI	116
5	Méthode de tabulation FTC, Flame Tabulated Chemistry	120
5.1	Génération de la table	120
5.2	Comparaison FTC / Expérience	123
6	Conclusion de la première partie	126
II	MODÉLISATION DE LA COMBUSTION TURBULENTE	128
1	Introduction	130
2	Comportement statistique de $\left(\overline{c Z^*}\right)$	131
2.1	Analyse d'une DNS	131
2.2	Étude des flammes jets turbulentes expérimentales	132
2.2.1	Définition de l'équilibre de Y_c pour l'expérience	132
2.2.2	Corrélation entre c et Z	132
3	Prise en compte des fluctuations turbulentes	138
3.1	Approximation au premier ordre	139
3.2	Approximation au second ordre	140
4	Couplage avec l'écoulement turbulent	141
5	Conclusion	143
III	VALIDATION DE PCM-FTC	144
1	Flamme D	146
1.1	Moyennes conditionnées à Z^*	148
1.2	Moyennes de Favre	154

2	Flamme F	162
2.1	Moyennes conditionnées à Z^*	162
2.2	Moyennes de Favre	165
3	Flammes liftées	174
3.1	Expérience de Muñiz et Mungal	174
3.2	Configuration numérique	175
3.3	Hauteurs de décollement	179
3.4	Extinction	180
4	Conclusion sur la validation	182
	Conclusion générale	184
	Perspectives	188
5	Le schéma cinétique GRI II	192

Nomenclature

Lettres romaines

a	Etirement moyen	s^{-1}
$a(x)$	Etirement local $a(x) = -\frac{\partial u}{\partial x}$	s^{-1}
c	Avancement de la réaction normalisé ($c = Y_c/Y_c^{eq}$)	-
D	Coefficient de diffusion moléculaire	$m^2.s^{-1}$
D_T	Coefficient de diffusion turbulente	$m^2.s^{-1}$
k	Energie cinétique turbulente	$m^2.s^{-2}$
M	Masse molaire	$g.mol^{-1}$
P	Pression	Pa
R	Constante des gaz parfaits, $R \approx 8.314$	$J.mol^{-1}.K^{-1}$
s	Rapport stœchiométrique massique de la réaction, $s = \nu_O M_O / \nu_F M_F$	-
S_o^L	Vitesse de flamme laminaire	$m.s^{-1}$
T	Température	K
u	Vitesse	$m.s^{-1}$
Y	Fraction massique d'une espèce ou d'un élément atomique	-
Y_c	Variable de progrès de la réaction	-
Z	Fraction de mélange	-

Lettres grecques

χ	Taux de dissipation scalaire	s^{-1}
δ_r	Epaisseur de la zone de réaction	m
ϵ	Taux de dissipation de la turbulence	$m^2.s^{-3}$
μ_j^n	Nombre d'éléments atomiques j dans l'espèce n	-
μ	Viscosité dynamique	$kg.(m.s)^{-1}$
ν	Coefficient stœchiométrique	-
ρ	Densité	$kg.m^{-3}$
ϕ	Variables thermo-chimiques (T, Y) ou richesse locale	
φ	Rapport d'équivalence ou produit $Y_c Y_c$	-
τ_m	Temps caractéristique mécanique	s^{-1}
τ_t	Temps caractéristique turbulent	s^{-1}
τ_c	Temps caractéristique chimique	s^{-1}
$\dot{\omega}$	Taux de consommation	s^{-1}

Indices

i	Espèce i
F	Combustible
O	Oxydant ou condition de mélange
P	Produit de la réaction
$,o$	Etat initial
eq	Etat d'équilibre chimique
mel	Mélange
q	Quenching
st	Stœchiométrie
$stag$	Stagnation
L	Lean
R	Rich
mel	mélange

Moyennes

$\bar{\cdot}$	Moyenne de Reynolds, $Q = \bar{Q} + Q'$
$\tilde{\cdot}$	Moyenne de Favre, $Q = \tilde{Q} + Q''$, $\tilde{Q} = \overline{\rho Q} / \bar{\rho}$
'	Fluctuation autour de la moyenne de Reynolds
''	Fluctuation autour de la moyenne de Favre

Nombres sans dimension

Sc_i	Nombre de Schmidt de l'espèce i , $Sc_i = \mu / (\rho D_i)$	-
Le_i	Nombre de Lewis de l'espèce i , $Le_i = \lambda / (\rho C_p D_i)$	-
Da	Nombre de Damköhler, $Da = \tau_m / \tau_c$	-
Re	Nombre de Reynolds, $Re = \rho u_o d_o / \mu$	-

Abréviations

CFD	Computational Fluid Dynamics	
CMC	Conditional Moment Closure	(Klimenko and Bilger, 1999)
CPU	Central Processing Unit (s^{-1})	
DNS	Direct Numerical Simulation	
FGM	Flame Generated Manifold	(van Oijen et al., 2001a)
FPI	Flame Prolongation of ILDM	(Gicquel et al., 2000)
FTC	Flame Tabulated Chemistry	
GRI	Gaz Research Institut	(Bowman et al., 1997)
ILDM	Intrinsic Low dimensional Manifold	(Maas and Pope, 1992a)
ISAT	In Situ Adaptative Tabulation	(Pope, 1997)
LES	Large Eddy Simulation	
PCM	Presumed Conditional Moments	
PDF	Probability Density Function	
RANS	Reynolds Average Navier Stokes	

Préambule

L'énergie nécessaire aux moteurs d'avion est générée par la combustion du kérosène à l'intérieur d'un foyer aéronautique. Cette oxydation d'hydrocarbure est indispensable au bon fonctionnement de l'avion, mais elle est aussi à l'origine de la formation d'espèces chimiques polluantes et nocives pour l'homme. Tout comme les autres moyens de transport, l'avion est en partie responsable du changement climatique.

Il y a quelques années, en raison du nombre restreint d'avions et du contournement des zones urbaines, la production des émissions polluantes par les moteurs aéronautiques n'était que très peu considérée.

Aujourd'hui, ces émissions participent, de manière non négligeable, à la dégradation environnementale, dont la part des avions est estimée à 3,5 % du forçage radiatif¹ total issu de toutes activités humaines.

L'augmentation du trafic aérien (environ 5% par an), contraint à diminuer les normes de pollution et oblige ainsi le constructeur à rendre ses moteurs plus écologiques.

C'est l'organisation de l'aviation civile internationale (OACI) qui est chargée de définir les normes d'émissions polluantes². Les principaux polluants qui sont éjectés des foyers aéronautiques, et qui font l'objet de contrôle, sont les monoxydes d'azote et leurs dérivés NO_x, les monoxydes de carbone CO, le dioxyde de carbone CO₂, les suies et les hydrocarbures imbrûlés.

L'industrie aéronautique a réalisé d'importants progrès en réduisant considérablement la consommation de kérosène et en limitant les émissions d'hydrocarbures et de monoxyde de carbone. Ces améliorations ont principalement été obtenues en diminuant le rapport entre le débit de combustible et de comburant donc en améliorant la combustion au sein des foyers aéronautiques. Cependant, un taux de dilution trop élevé peut entraîner des

¹quantifie une perturbation d'origine extérieure imposée au bilan d'énergie radiative du système climatique (W/m^2). Exemple : Gaz à effet de serre.

²Annexe XVI *Protection de l'environnement* Volume II *Emission des moteurs d'aviation* à la convention relative à l'aviation civile internationale.

instabilités et des extinctions locales de la flamme, pouvant aller jusqu'à l'arrêt complet du moteur, impliquant de lourdes conséquences. Le constructeur de moteurs d'avion recherche, par conséquent, un compromis permettant la mise en œuvre de foyers aéronautiques efficaces, plus écologiques tout en assurant leur fiabilité.

Deux axes de recherche et de développement sont utilisés afin d'optimiser les chambres de combustion :

- les études expérimentales,*
- les simulations numériques.*

L'outil informatique est de plus en plus sollicité pour la conception des moteurs en raison des coûts élevés des prototypes et des techniques de mesures expérimentales et de la rapidité, toujours croissante, des ordinateurs associée à une amélioration constante des modèles numériques.

Le travail présenté dans ce manuscrit concerne le développement, la mise en œuvre et la validation de nouvelles formulations pour modéliser la combustion turbulente et simuler des foyers aéronautiques.

Cette thèse s'inscrit dans le cadre d'une convention CIFRE, collaboration entre le CORIA-UMR-CNRS 6614 et SNECMA. Les travaux réalisés auront donc pour vocation l'application à la conception des chambres de combustion aéronautiques.

Introduction

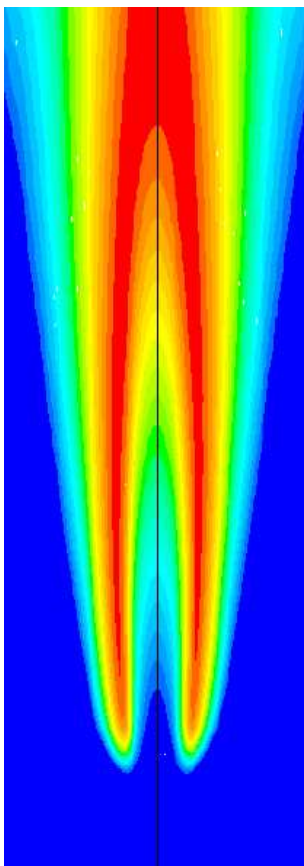


FIG. 1 – *Champ de température moyen d'une flamme suspendue méthane / air.*

flammes turbulentes et laminaires.

La simulation des flammes turbulentes au moyen de l'outil informatique s'est aujourd'hui généralisée. A titre d'exemple, la figure 1 présente le calcul d'une flamme turbulente décrochée d'un brûleur, réalisé avec une approche RANS (Reynolds Average Navier Stokes). Cette flamme est obtenue avec le modèle de combustion développé dans ce mémoire en approximativement 1 heure de calcul. Les résultats permettent d'exploiter la température, les concentrations d'espèces chimiques, les champs de vitesse, l'intensité de la turbulence, les zones de réaction et toutes autres variables moyennes. Dans la mesure où ces calculs sont représentatifs des phénomènes physiques et chimiques se produisant dans une flamme turbulente, les avantages d'un tel outil pour optimiser les chambres de combustion sont évidents.

Cependant, il est nécessaire de formuler des hypothèses afin d'introduire, sous forme mathématique, les phénomènes physiques et chimiques de la combustion turbulente. Cette procédure est appelée "modélisation de la combustion turbulente". Le développement de nouveaux modèles est initié par la compréhension de ces phénomènes au moyen de visualisations et d'analyses de

De Soete (Soete, 1997) définit la combustion comme un ensemble de réactions chimiques, dites élémentaires, pour la majorité bimoléculaires, se terminant par l'oxydation d'un réactif initial appelé combustible (hydrocarbure) par un co-réactif appelé comburant (O_2). Ce processus est finalement -très- exothermique.

Elle est initiée par un apport d'énergie locale, appelé allumage, puis se développe par des réactions en chaîne. Par exemple, l'oxydation d'un hydrocarbure (méthane, kérosène) arrache les atomes d'hydrogène, ce qui permet la formation d'autres molécules, et ainsi de suite, jusqu'à atteindre un équilibre chimique avec une majorité de produits de combustion (l'eau (H_2O), le dioxyde et le monoxyde de carbone (CO_2 , CO)). Le nombre d'atomes de carbone dans le combustible et la variation des éléments atomiques (H, C, O, N) dans les réactifs initiaux multiplient les combinaisons possibles entre atomes, et donc le nombre de molécules chimiques qui peuvent être formées pendant la combustion. Plus ce nombre est élevé, plus le nombre de réactions sera important. Un exemple de schéma cinétique pour la combustion méthane / air est présenté dans l'annexe 5 (49 espèces chimiques, 279 réactions élémentaires réversibles). Un tel schéma cinétique sera utilisé dans ce mémoire pour simuler une chambre de combustion aéronautique. Les réactions chimiques étant connues, il faut maintenant calculer la vitesse à laquelle vont être formées les espèces chimiques.

Les vitesses de formation et de destruction, de chaque espèce chimique, permettent de calculer le taux de réaction $\dot{\omega}$ (en s^{-1}) (Kee et al., 1996). Ces informations regroupées dans le terme "cinétique chimique" sont essentielles en combustion. Un cas limite est atteint, l'équilibre chimique, lorsque les temps de formation des espèces sont infiniment rapides. Dès que les réactifs sont mis en contact à l'échelle moléculaire, ils forment instantanément des produits de combustion, sans passer par des espèces intermédiaires radicalaires. Certains modèles de combustion, par exemple CLE (Combustion Limitée par l'Equilibre) (Ravet and Vervisch, 1998) sont basés sur cette hypothèse de chimie infiniment rapide. Les concentrations d'espèces et la température sont donc déterminées uniquement avec la prédiction du mélange. La fraction de mélange, Z , (Burke and Schumann, 1928) est alors introduite. Cette variable quantifie l'état de mélange entre les atomes du combustible et les atomes du comburant, quelque soit la molécule dans laquelle ils se trouvent. La fraction de mélange est une quantité locale normalisée et elle peut être définie avec ou sans combustion. Dans le combustible pur (sans autre espèce chimique), $Z=1$, et dans le comburant pur, $Z=0$.

A noter, quelque soit le régime de combustion, la fraction de mélange caractérise la richesse locale ϕ :

$$\phi = \frac{Z}{(1-Z)} \frac{(1-Z_{st})}{Z_{st}}$$

Où Z_{st} est la valeur de la fraction de mélange au point stœchiométrique, c'est-à-dire lors d'une combustion complète possible des réactifs.

Sur la figure 2, la température d'équilibre est tracée en fonction de la fraction de mélange (trait) pour la combustion méthane / air. Le résultat est obtenu par minimisation

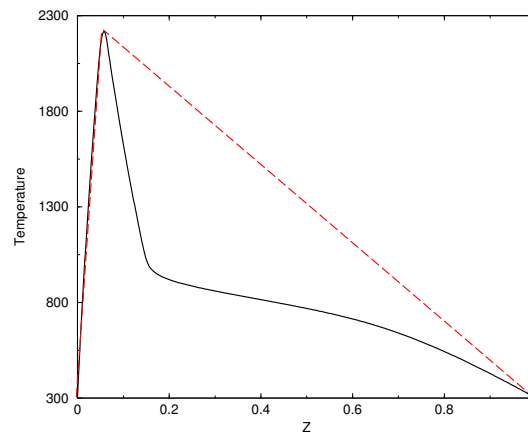


FIG. 2 – Température d'équilibre (en Kelvin) en fonction de la fraction de mélange Z . Combustion méthane / air avec $Z_{st} = 0.055$. Pointillé rouge : Droite de Burke et Schumann (Burke and Schumann, 1928), Ligne noire : équilibre chimique par minimisation de la fonction de Gibbs.

de la fonction de Gibbs, l'enthalpie libre. Pour un mélange fixé, l'enthalpie et la pression sont supposées constantes. Cette définition est comparée à celle initialement proposée par Burke et Schumann en 1928 (Burke and Schumann, 1928) où la température et les espèces chimiques sont supposées être linéaires avec la fraction de mélange, car les phénomènes de dissociation ne sont pas pris en compte.

Depuis ces 25 dernières années, le développement de la chimie détaillée a permis une modélisation plus réaliste de la combustion turbulente. Des modèles sont apparus, toujours basés sur le mélange (Peters, 1986) mais permettant de mesurer les effets de chimie non-infiniment rapide. Une variable d'avancement de la réaction, noté c , permet de mesurer les écarts à l'équilibre chimique. C'est un scalaire réactif local et normalisé. A l'équilibre chimique il est égal à 1 et dans un mélange de réactifs, il est égal à 0.

Cependant, la prise en compte de la cinétique chimique n'est pas suffisante pour décrire un front de flamme. En effet, la réaction ne peut se produire que lorsque les réactifs sont mélangés à l'échelle moléculaire. La diffusion des espèces chimiques est alors un paramètre tout aussi important que le taux de réaction. Deux types de modélisation de la diffusion moléculaire sont couramment utilisés :

- une diffusion constante et égale à la diffusion thermique ($Le=1$)
- une diffusion différentielle, qui tient compte de la diffusion D_{im} propre à une espèce

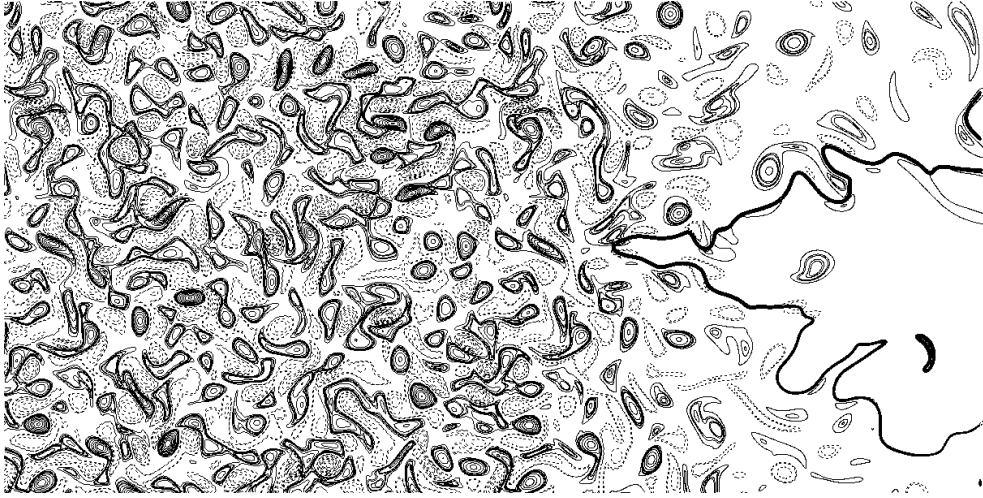


FIG. 3 – DNS 2D d'une flamme en V prémélangée ($\phi =$) dans une turbulence décroissante (Hauguel, 2003). Champs de rotationnel et du taux de réaction (trait épais). Intensité de la turbulence initiale $I = (k^{1/2}/S_L) = 2.5$.

chimique "i" dans un mélange "m" (Kee et al., 1996).

$$D_{im} = \frac{1 - Y_i}{\sum X_j / D_{kj}}$$

Les coefficients de diffusion D_{kj} définissent la diffusion d'une espèce k dans une espèce j.

La deuxième méthode permet une représentation plus réaliste du front de flamme. Elle est limitée par la détermination des coefficients D_{kj} (Hilbert et al., 2004).

Ces phénomènes chimiques peuvent être perturbés par de nombreux phénomènes physiques (rayonnement, perte thermique, turbulence). L'interaction entre la combustion et la turbulence a longtemps été observée expérimentalement (Takahashi et al., 1996) et plus récemment numériquement dans des configurations réalistes (Hauguel, 2003). La figure 3 présente le plissement d'un front de flamme en "V" prémélangé accroché à un fil chaud dans une turbulence décroissante (Hauguel, 2003). La flamme est simplement plissée au passage des tourbillons les plus gros et éventuellement, localement éteinte lorsque les tourbillons sont plus petits et encore suffisamment énergétiques. On observe dans ces simulations des extinctions locales responsables du détachement de paquets de réactifs. Cependant, de manière générale, le front de flamme reste continu et l'épaisseur de la zone de réaction constante et faiblement influencée par les niveaux de turbulence.

L'analyse des résultats expérimentaux et numériques permettent la mise au point de diagrammes de combustion (Peters, 1986; Borghi and Destriau, 1998) utiles pour classer

les différents régimes de flammes possibles. Cependant, les géométries industrielles sont complexes et suffisamment grandes pour observer une multitude de régimes à différents endroits et différents instants. De plus, les régimes de fonctionnement sont variés (par exemple dans les foyers aéronautiques, ils passent du plein gaz pendant la période de décollage pour aller vers d'autres régimes en altitude) ce qui augmente encore les possibilités d'avoir des régimes de combustion différents. Finalement, il faut adapter la modélisation de la combustion turbulente aux cas de fonctionnements les plus généraux possibles.

Les phénomènes instationnaires physiques et chimiques ont lieu sur une gamme d'échelles de tailles et de temps extrêmement larges (Maas and Pope, 1992b) (voir figure 4).

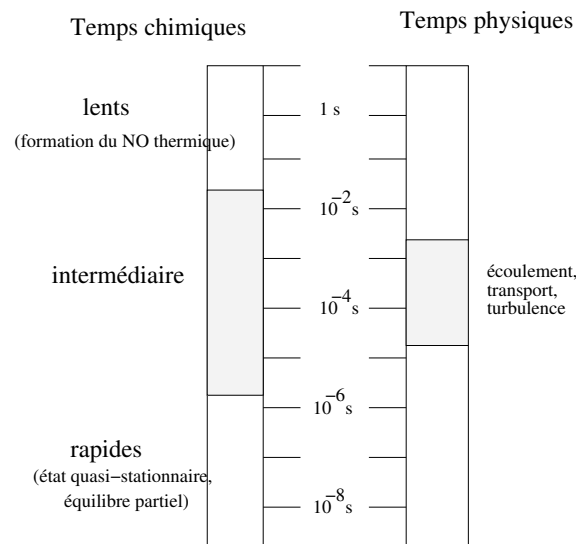


FIG. 4 – Estimation des temps caractéristiques chimiques et turbulents (Maas and Pope, 1992b).

La résolution des équations de transport dépend du code de calcul utilisé. Il en existe trois classes qui se différencient par la gamme des échelles résolues et modélisées :

- La DNS, Direct Numerical Simulation, est la résolution instationnaire des équations de transport "exacte". La taille d'une maille de calcul, ou cellule, est suffisamment petite pour capturer les phénomènes instationnaires de la turbulence. Cependant, la limitation technologique des ordinateurs actuels limite la taille des géométries à quelques mm^3 ne permettant pas les simulations de chambres de combustion réalistes. La chimie détaillée est encore un point faible de ces simulations car la taille des cellules et le pas de temps sont limités par les temps caractéristiques chimiques. Des schémas chimiques à une étape sont donc souvent utilisés (Vervisch et al., 2004b) ou

des combustibles légers tels que l'hydrogène (Mizobuchi et al., 2003). Typiquement, pour réaliser une DNS de la combustion méthane dans l'air, des mailles de l'ordre du μm et des pas de temps de l'ordre de la μs sont nécessaires pour capturer la dynamique de la cinétique chimique (Lindstedt, 2004).

- La LES, Large Eddy Simulation, consiste à résoudre les équations de transport filtrées. Dans le diagramme énergétique de la turbulence (Reveillon, 2003; Moin, 2002), les gros tourbillons sont simulés alors que les plus petits sont modélisés. La taille des mailles est alors plus grande que celle de la DNS et la simulation de géométries complexes devient accessible (Selle, 2004). Cette technique est récente et reste en développement. Son application à la conception des foyers aéronautiques est envisageable à court terme (10 ans). La taille des mailles de calcul est encore trop grande par rapport aux échelles de la chimie détaillée et une modélisation de la cinétique chimique est nécessaire.
- Les méthodes RANS, Reynolds Average Navier Stokes, consistent à résoudre des équations de transport moyennées. C'est la technique la plus rapide et aujourd'hui la plus utilisée dans l'industrie. Le développement et la recherche de fermetures pour les termes liés au transport turbulent n'occupent plus le devant de la scène depuis l'apparition de la LES. En revanche, la modélisation de la chimie détaillée reste une activité importante, car elle peut être utilisée à la fois en LES et en RANS. Ainsi, tous les développements proposés dans ce mémoire sont valables pour ces deux approches.

L'objectif de cette thèse est de disposer d'un outil mathématique d'aide à la conception de foyers aéronautiques. Les temps de calculs et la précision des résultats sont les critères retenus pour concevoir un nouveau modèle de combustion turbulente. En termes d'applications immédiates, cette thèse s'inscrit donc dans le cadre des simulations RANS, avec introduction de la chimie détaillée. Les phénomènes de prémélange partiel, susceptible de se produire dans un foyer aéronautique, seront inclus dans la modélisation. Les comportements chimiques et statistiques des flammes laminaires et turbulentes seront donc étudiés.

Les modèles de combustion turbulente sont nombreux et construits sur des bases différentes. Ainsi le taux de réaction moyen, qui nécessite une fermeture, peut être exprimé par :

- des modèles arithmétiques (par exemple en fonction de la dissipation scalaire),
- une description géométrique. On retrouve dans cette catégorie les modèles de surface

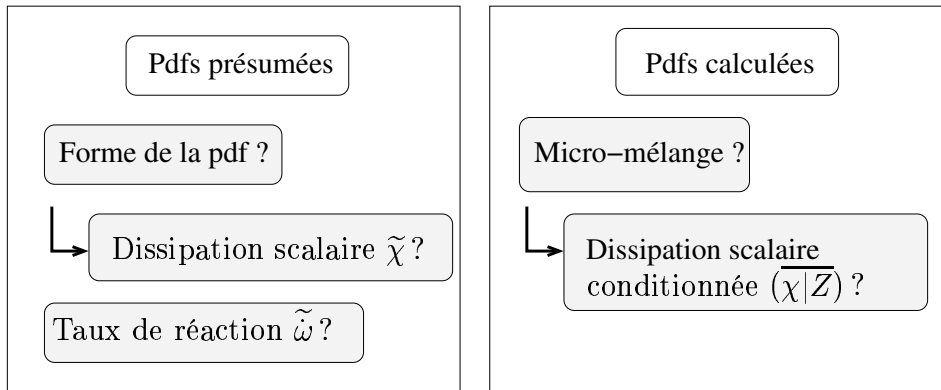


FIG. 5 – Termes modélisés dans les deux approches des fonctions densités de probabilité.

de flamme,

- des modèles introduisant les fonctions de densités de probabilités (Xu and Pope, 2000).

Bien que ces méthodes semblent disjointes, il existe des relations mathématiques entre chacune d'elles (Veynante and Vervisch., 2002). Tous les axes de recherche sont alors possibles et il n'est pas encore démontré qu'une méthode soit plus adaptée qu'une autre. Le choix se porte sur le type de configuration à étudier. Les surfaces de flamme sont ainsi largement utilisées dans les moteurs automobiles en raison de la propagation de front de flamme. La description arithmétique permet d'obtenir des résultats rapides avec une programmation minimale. Les fonctions de densités de probabilités sont les méthodes retenues dans cette étude pour la simulation des foyers aéronautiques afin d'introduire la chimie détaillée.

Les comportements statistique et chimique sont donc reliés par la relation exacte :

$$\tilde{\phi} = \int_{\phi^*} \phi \tilde{P}(\phi^*) d\phi^*$$

$\tilde{\phi} = \overline{\rho\phi}/\bar{\rho}$ est la moyenne au sens de Favre de la variable instantanée ϕ . ϕ^* est la variable probabiliste. La fonction de densité de probabilité \tilde{P} quantifie la probabilité de trouver ϕ dans un voisinage de ϕ^* . \tilde{P} est le paramètre statistique. ϕ est le paramètre chimique (température, concentrations, taux de réaction d'une espèce chimique).

Il existe plusieurs possibilités pour calculer ϕ et le choix de la détermination de la pdf \tilde{P} en dépend. Deux alternatives sont envisageables (voir figure 5) :

- **Transport de pdfs**

Dans cette méthode, ϕ est calculée par une méthode Lagrangienne, suivie d'une particule fluide représentative d'une espèce chimique. Les avantages sont la détermination exacte du taux de réaction ainsi que la prise en compte de l'évolution temporelle et spatiale d'une espèce chimique. L'opération de moyenne statistique est obtenue en moyennant temporellement un nombre suffisant de champs de particules instantanées (20 à 100). Les équations de transport Lagrangiennes des espèces chimiques sont obtenues mathématiquement à partir de l'équation de transport de la pdf (Valino, 1998), d'où son nom "transport de pdf". Cependant, cette méthode nécessite un couplage entre l'écoulement Lagrangien et Eulerien. Notamment, la diffusion moléculaire des équations Lagrangiennes est indéterminée et nécessite une fermeture. Elle est souvent modélisée par un temps turbulent et une relaxation linéaire LMSE (Villermaux, 1986). La précision acquise sur le taux de réaction est alors fortement entachée par la modélisation approximative du micro-mélange. Le nombre conséquent de particules nécessaire pour calculer les moyennes, implique des temps de calcul (CPU) importants. Pour cette raison, les schémas cinétiques utilisés dans cette approche sont réduits ("ILDm" (Maas and Pope, 1992a), basée sur une formulation mathématique ou "ISAT" (Pope, 1997) organisée sur le stockage des taux de réaction ; les premières itérations sont longues mais rapidement optimisées.)

– Pdfs présumées

Dans cette approche, $\tilde{P}(\phi)$ est présumée au cours des itérations à partir d'un nombre limité de moments. Afin de réduire le coût CPU, nous avons opté pour une tabulation complète des formes présumées des pdfs, ainsi que des variables thermodynamiques moyennes qui en résultent. Il est donc nécessaire de faire un calcul préliminaire avant le couplage avec le code de calcul turbulent. Cette méthode est appelée "tabulation de la chimie". Elle peut être générée par des flammes laminaires (Peters, 1986), des PSR Perfectly Stirred Reactor ou encore ILDM (Maas and Pope, 1992a), FPI (Gicquel, 1999). L'opération de moyenne est alors obtenue par des pdfs dont la forme est souvent présumée par les deux premiers moments (la moyenne $\tilde{\phi}$ et la variance $\tilde{\phi'^2}$).

Un exemple de pdf présumée à partir d'une fonction beta (Libby and Williams, 1994) est montré sur la figure 6. Elle est capable de reproduire les formes Gaussiennes, les simples et les doubles pics de Dirac. Cette méthode est peu coûteuse en temps de calcul. Cependant, le maillage doit être raffiné au niveau de la zone de réaction, entraînant un léger coût supplémentaire en temps de calcul lors de la tabulation.

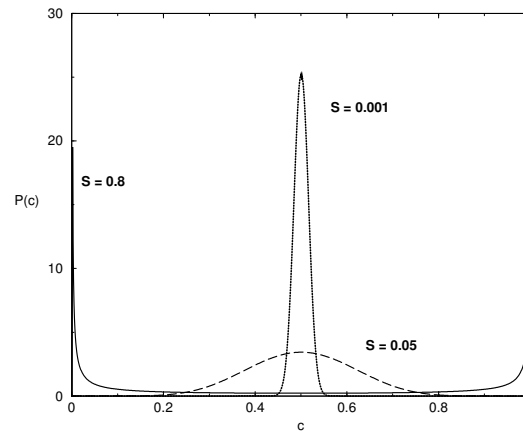


FIG. 6 – Formes de la pdf beta en fonction de sa variable instantanée "c" pour différentes valeurs de ségrégation $S = \tilde{c}''^2 / (\tilde{c}(1 - \tilde{c}))$. La valeur moyenne \tilde{c} est fixée à 0.5.

Différences de résultats entre les deux méthodes :

Les principaux avantages et inconvénients des méthodes de pdfs sont résumés dans le tableau 1.

Méthode	CPU	maillage	Avantages	Inconvénients
Transport de Pdf	Long	Petit	Taux de réaction déterminé	Modélisation de la diffusion moléculaire
Pdfs présumées	Petit	Raffiné proche de la zone de réaction	Couplage possible entre diffusion moléculaire et taux de réaction	Forme présumée de la pdf, modélisation de la dissipation scalaire

TAB. 1 – *Récapitulatifs des avantages et inconvénients des méthodes de pdfs.*

Les formes présumées du type pdf Beta (Libby and Williams, 1994) d'un scalaire inerte (la fraction de mélange) ont été comparées à des DNS (Eswaran and Pope, 1988). Les résultats ont montré des similitudes au passage de la forme modale à bimodale. Zurbach (Zurbach, 1998) a comparé les pdf présumées multiscalaires réactifs en Beta avec le transport de pdf. Une représentation réaliste de l'évolution de la pdf dans l'espace des compositions a été observée.

De plus, les avantages des pdfs présumées sont conservées pour les simulations en LES alors que pour le transport de pdf, l'augmentation du nombre de mailles rend la méthode extrêmement coûteuse (voire impraticable) dans le cas de calculs instationnaires.

La méthode des pdfs présumées est donc adoptée dans cette étude pour le calcul des chambres Snecma.

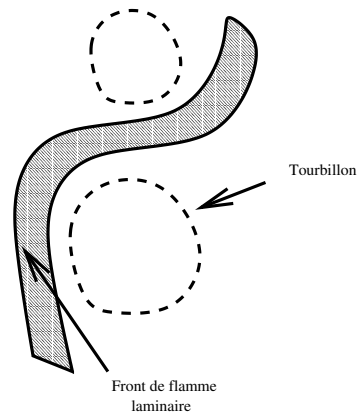
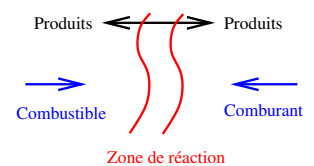


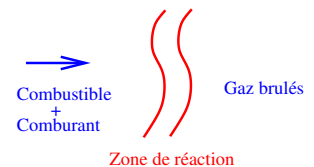
FIG. 7 – *Front de flamme turbulent simplement plissé par la turbulence.*

La stratégie étant définie, il reste de nombreuses méthodes pour introduire la cinétique chimique. Les PSRs ne sont basés que sur les temps caractéristiques chimiques et il n'y a donc pas de couplage entre la diffusion moléculaire des espèces chimiques et les taux de réaction. Il en est de même pour la méthode de tabulation ILDm. Ces méthodes ne sont donc pas retenues. Une solution consiste à simuler directement le front de flamme en le supposant laminaire et simplement plissé par l'écoulement turbulent (voir figure 7) (Peters, 1986). Sur la base de cette hypothèse, des calculs préliminaires peuvent être réalisés sur des flammes laminaires représentatives du front de flamme turbulent. On peut citer deux régimes de combustion distincts couramment utilisés dans les modélisations du front de flamme :

Les flammes non-prémélangées dans lesquelles le combustible et le comburant sont initialement séparés. Par abus de langage, elles sont aussi appelées flammes de diffusion. La bougie est un exemple de flamme non-prémélangée.



Les flammes prémélangées où le combustible et l'oxydant sont mélangés à l'échelle moléculaire avant de réagir. Elles ont la propriété de se propager vers les gaz frais en les consommant.



Dans la majorité des chambres de combustion industrielles, foyers aéronautiques compris, le combustible et le comburant sont initialement séparés pour des raisons de sécurité. Ainsi, tout allumage non contrôlé est évité. Cependant, le brassage turbulent de l'écoulement et la complexité de la géométrie entraîne un régime particulier appelé "**combustion partiellement prémélangée**". Il peut s'agir d'une réaction entre

- deux mélanges de réactifs à deux richesses différentes,

- d’une dilution des réactifs par les produits de combustion.

Ce régime a été observé dans une DNS d’une flamme jet turbulente hydrogène / air en tenant compte de la chimie complexe (Mizobuchi et al., 2003) (voir figure 8). Le scalaire tracé en couleur est le produit $\varphi = \nabla Y_F \cdot \nabla Y_O$, traceur du régime de combustion. Ce produit est normalisé par la valeur de φ dans une flamme laminaire prémélangée à la même richesse. Si φ est supérieur à 0 le régime est prémélangé et si il est négatif le régime est diffusif (Yamashita et al., 1996). Le cadre (figure 8) est un agrandissement dans une zone où les deux régimes sont localement présents.

Un exemple d’une flamme partiellement prémélangée laminaire à contre-courant ($H_2/He/air$) est présenté sur la figure 9. La température est tracée en fonction de la fraction de mélange Z . Les richesses des prémélanges pauvre et riche sont respectivement $Z_L = 0.017$ et $Z_R = 0.14$ ($Z_{st} = 0.036$). Ces mélanges sont constitués de réactifs de produits de combustion et de radicaux (l’avancement de la réaction des mélanges est égal à 0,5). Tous les détails sur ce type de flamme sont présentés dans la partie 3.

Le choix du régime de combustion des flammes laminaires utilisées pour la tabulation dépend du régime de la flamme turbulente à simuler. Les variables chimiques et la température d’une flamme prémélangée turbulente sont idéalement présumées par une flamme laminaire prémélangée. Similairement, les flammes de diffusion laminaires à contre-courant sont choisies pour simuler une flamme de diffusion turbulente.

Aujourd’hui, les brûleurs industriels sont optimisés afin de favoriser le mélange entre le combustible et le comburant. Les injecteurs à swirl sont largement utilisés dans ce but. De plus, les niveaux de turbulence sont élevés et les zones de recirculation nombreuses. Le régime de combustion n’est donc plus académique (prémélange ou non-prémélangé) et des phénomènes de prémélange partiel apparaissent de façon systématique.

Une première approche consiste à simuler une collection de flammes partiellement prémélangées laminaires identiques à celles présentées sur la figure 9. Initialement, un modèle de combustion basé sur cette tabulation (Rullaud and Vervisch, 2002) a été testé sur des flammes de di-hydrogène / air. Une bonne estimation des espèces chimiques et de la température a été retrouvée mais le nombre conséquent de flammes partiellement prémélangées à calculer font que cette méthode est coûteuse en temps de calculs et inexploitable dans les simulations de foyers aéronautiques.

Pour des raisons liées à l’application de nos calculs aux chambres Snecma, géométrie complexe, coût CPU, nous avons opté pour l’utilisation de flammes prototypes simples, pour tabuler la chimie.

Un exemple de flamme à contre-courant laminaire monodimensionnelle, appelée flam-

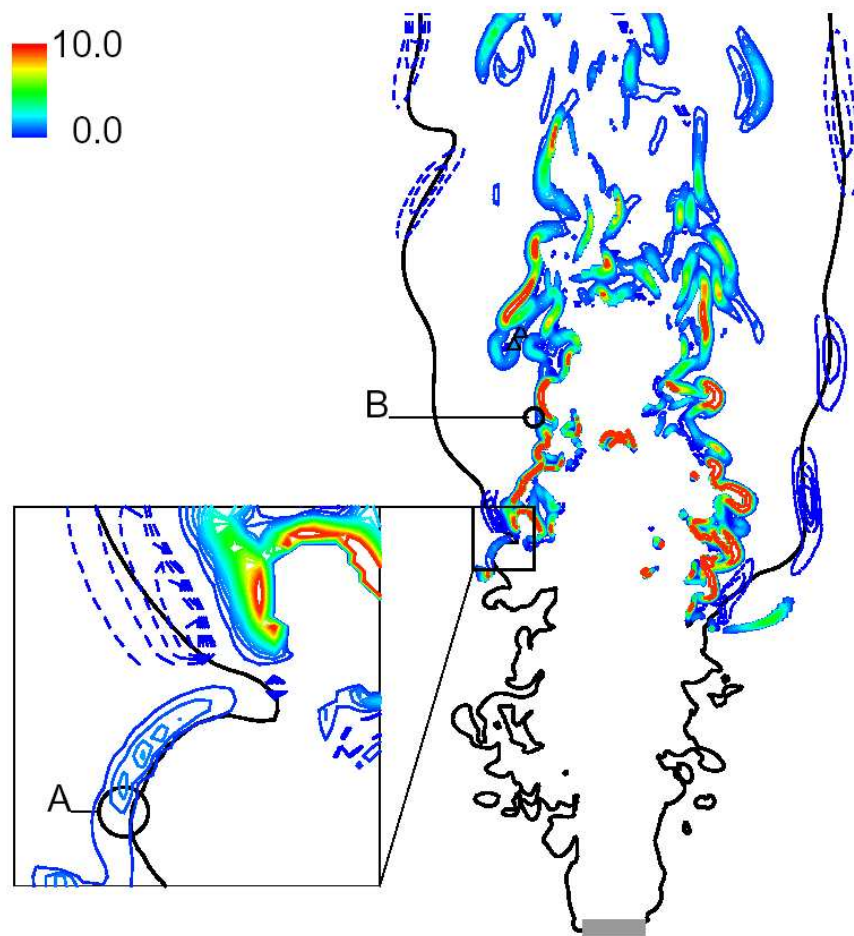


FIG. 8 – DNS d'une flamme jet turbulente Di-hydrogène / air (Mizobuchi et al., 2003).
Couleur : $\varphi = \nabla Y_F \cdot \nabla Y_O$ normalisé par sa valeur en laminaire, pointillés : valeur négative,
trait plein : valeur positive. Trait noir : mélange stœchiométrique.

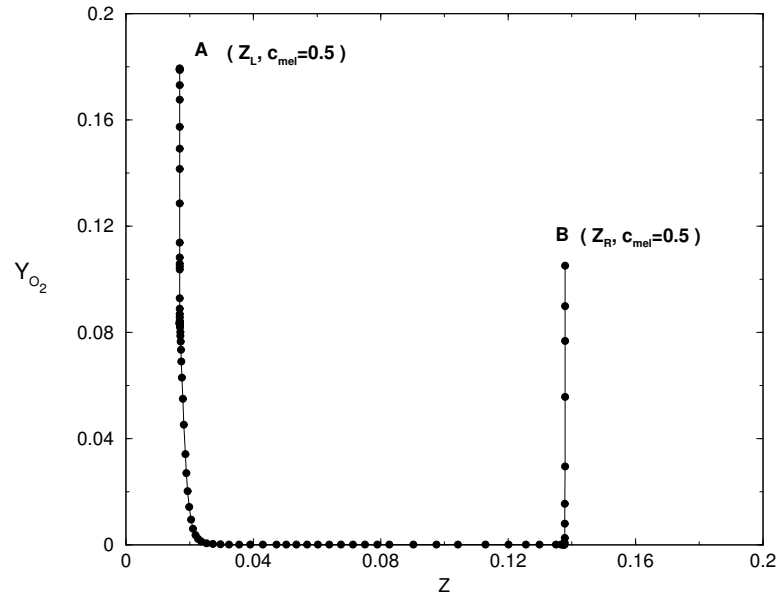


FIG. 9 – Fraction massique du dioxygène en fonction de la fraction de mélange Z d'une flamme partiellement prémélangée ($H_2/He/air$). Le niveau de prémélange est fixé : $c_{mel} = 0.5$ pour les deux mélanges (points A et B), $Z_L=0.017$, $Z_R=0.014$. (conditions limites de la flamme à contre-courant).

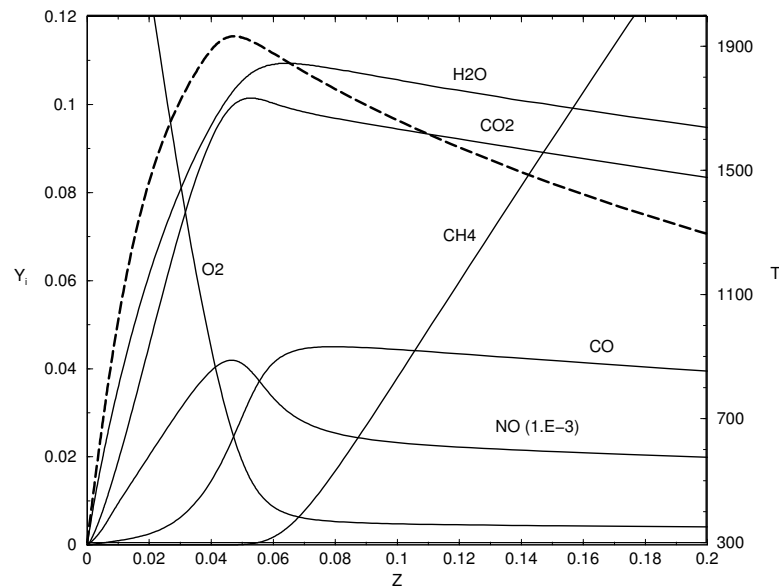


FIG. 10 – Fractions massiques des espèces chimiques (trait plein) et température (pointillés) en fonction de la fraction de mélange Z d'une flamme (méthane / air) de diffusion laminaire à contre-courant avec un étirement moyen de $90 s^{-1}$.

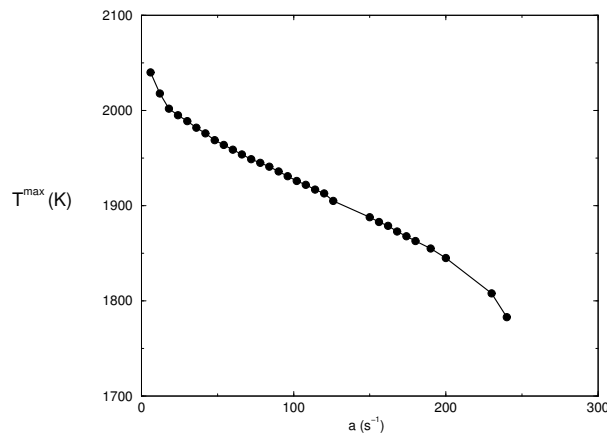


FIG. 11 – *Température maximale (K) des flammes à contre-courant en fonction de l'étirement moyen (s^{-1}). L'extinction, qui se produit pour des étirements moyens supérieurs à $a_q \simeq 240s^{-1}$, limite le domaine d'évolution de la température, dans la zone stœchiométrique, à des valeurs comprises entre 1800 et 2000 K .*

melette (Peters, 1986), est présenté sur la figure 10. Les espèces chimiques et la température sont tracées en fonction de la fraction de mélange "Z". Le combustible, ici le méthane, est en excès du côté riche de la flamme ($Z > Z_{st}$). Le comburant est l'air avec la présence d'oxygène du côté pauvre de la flamme ($Z < Z_{st}$). La température et les produits de combustion (CO_2 et H_2O) ainsi que le monoxyde de carbone (CO) sont maximums à la stœchiométrie ($Z = Z_{st} = 0.055$). Le monoxyde de carbone (CO) est majoritairement présent dans la zone riche de la flamme.

Une collection de flammes laminaires est calculée en augmentant les vitesses d'injection des réactifs. Ainsi, la connaissance de la fraction de mélange et de l'étirement moyen permet de retrouver les variables laminaires. Cependant, lorsque l'étirement augmente, la température maximale de la flamme diminue jusqu'à un niveau de température trop faible pour entretenir la réaction, ce qui provoque son extinction (figure 11). Cette extinction est souvent prématurée, comparée aux conditions réelles des foyers où la combustion est rendue plus robuste par les effets instationnaires et les phénomènes de prémélange partiel. Des observations expérimentales ainsi que des calculs de flammes partiellement prémélangées laminaires (figure 12) montrent qu'il existe une combustion possible même pour des étirements moyens supérieurs à l'extinction d'une flamme laminaire non-prémélangée.

Cette difficulté peut être levée en calculant des flammes prémélangées laminaires pour plusieurs richesses à la place des flammes à contre-courant. Les extinctions ne limitent donc plus la tabulation des flammes laminaires. Les accrochages de flammes sont prédits par la compétition entre les vitesses de flammes turbulentes et les vitesses de l'écoulement.

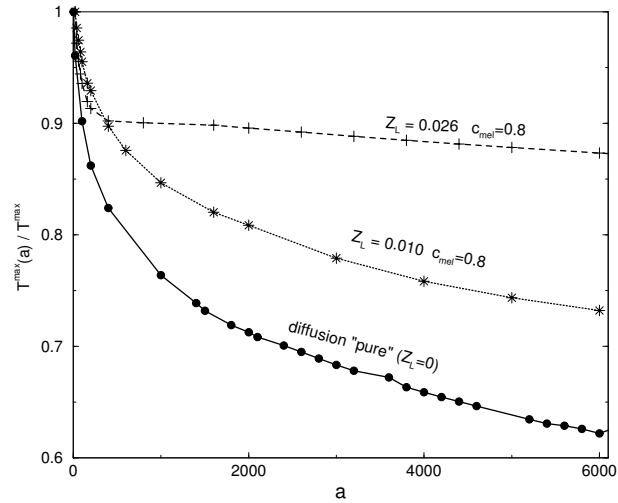


FIG. 12 – *Température maximale normalisée en fonction de l'étirement moyen (s^{-1}) pour différents niveaux de prémélange partiel dans une flamme à contre-courant laminaire $H_2/He/air$.*

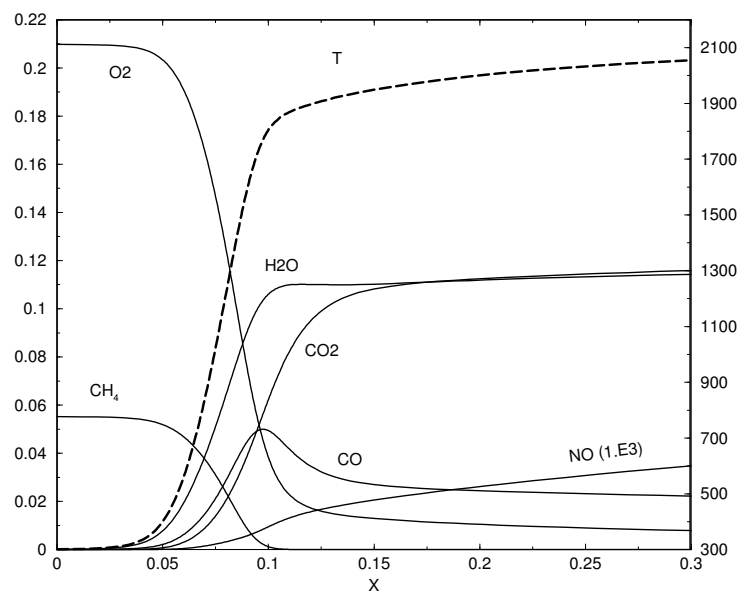


FIG. 13 – *Fractions massiques des espèces chimiques (trait plein) et température (pointillés) en fonction de la position x (en cm) d'une flamme de prémélange laminaire méthane / air stœchiométrique se propageant librement.*

Par exemple, Bradley utilise un taux de réaction recalé sur des flammes prémélangées pour prédire des hauteurs de décollement (Bradley et al., 1990) et des extinctions globales des flammes turbulentes méthane / air (Bradley et al., 1998).

Un exemple de flamme laminaire prémélangée méthane / air est présenté sur la figure 13. Les réactifs injectés en $x=0$ dans les proportions stœchiométriques ($Z = Z_{st}$) sont consommés pour former des produits de combustion en $x \rightarrow \infty$. Les vitesses de formation lentes du monoxyde de carbone sont mises en évidence par la croissance continue du NO alors que certaines espèces ont atteint leur équilibre chimique (H_2O).

Cependant, si on accepte de présumer les propriétés chimiques d'une flamme turbulente non-prémélangée par une collection de flammes prémélangées laminaires (méthodes FPI, Flame Prolongation of ILDM (Gicquel, 1999), FGM, Flame Generated Manifold (van Oijen et al., 2001a)) alors les flux des espèces chimiques et de la température à travers les iso-surfaces de fraction de mélange sont négligés, ce qui limite considérablement le domaine d'application de la modélisation (gradient de fraction de mélange faible, chimie très rapide ...).

Dans ce contexte, les objectifs de ce travail de thèse sont triples :

- On cherchera à apporter des informations supplémentaires nécessaires à la compréhension de la combustion turbulente, notamment en termes de tabulation de la cinétique chimique.
- On proposera une modélisation RANS de la combustion turbulente prenant en compte le détail de la chimie et dont le coût de calcul est faible.
- Ce modèle sera testé sur des flammes de laboratoire et appliqué à un foyer aéronautique Snecma.

Ce manuscrit s'organise en trois parties :

Première partie : Méthode de tabulation de la cinétique chimique

La figure 14 regroupe les différentes méthodes de tabulation rencontrées en combustion turbulente. Cette étude se focalise sur les flammes laminares.

Le premier chapitre rassemble les principaux résultats obtenus avec des flammes laminares monodimensionnelles prémélangées et à contre-courant. Plusieurs définitions de la fraction de mélange "Z", et de l'avancement de la réaction "c" seront étudiées. Les fractions massiques des espèces chimiques Y_i , la température T et les zones de réaction

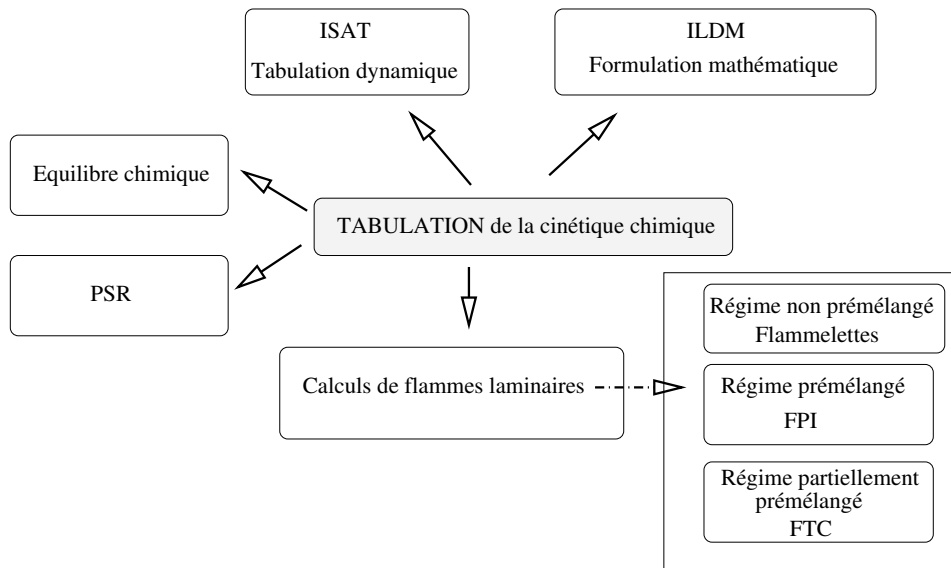


FIG. 14 – Méthodes de tabulation

δ_r des flammes prémélangées et non-prémélangées seront analysées pour ces deux régimes de combustion.

Le deuxième chapitre traite de l'application de la méthode FPI (Gicquel et al., 2000) (ou FGM (van Oijen et al., 2001a)) aux flammes non-prémélangées laminaires. Ces tests mettent en évidence l'impossibilité de prédire le comportement chimique d'une flamme à contre-courant laminaire avec une tabulation utilisant des flammes prémélangées. Dans la prolongation des résultats obtenus, des tests sont effectués sur des mesures effectuées dans des flammes jets partiellement prémélangées (Flammes D et F du laboratoire de Sandia (Barlow and Frank, 2003b), *Californie*). Il s'agit ici d'un post-traitement des mesures expérimentales (sans CFD) dans le but d'estimer les différentes méthodes de tabulation.

Les chapitres 3 et 4 se concentrent sur le phénomène de prémélange partiel et sur son influence sur les espèces chimiques et la température. Les méthodes de tabulation de diffusion et de prémélange seront testées en post-traitant les données expérimentales des flammes jets turbulentes partiellement prémélangées de Sandia (Barlow and Frank, 2003b).

Le cinquième chapitre est consacré à la présentation d'une nouvelle méthode de tabulation de la cinétique chimique, FTC, Flame Tabulated Chemistry, générée pour les simulations de flammes non-prémélangées et partiellement prémélangées. Elle a pour caractéristique de coupler les flammes laminaires prémélangées et non-prémélangées. Cette

tabulation est testée de manière similaire à la tabulation FPI, donc sur les flammes jets turbulentes de Sandia.

Deuxième partie : Modélisation de la combustion turbulente

Dans cette partie, le modèle de combustion turbulent PCM, Presumed Conditional Moment, est présenté en détail. Il est construit à partir de la tabulation FTC et basé sur des moyennes conditionnées sur la fraction de mélange. Deux niveaux d'approximations sont proposés ; le plus précis tient compte des fluctuations conditionnées d'avancement de la réaction, alors que le premier niveau les négligent.

Le comportement statistique des flammes jets turbulentes expérimentales est étudié dans le but de discuter les hypothèses formulées dans la modélisation PCM.

Troisième partie : Résultats

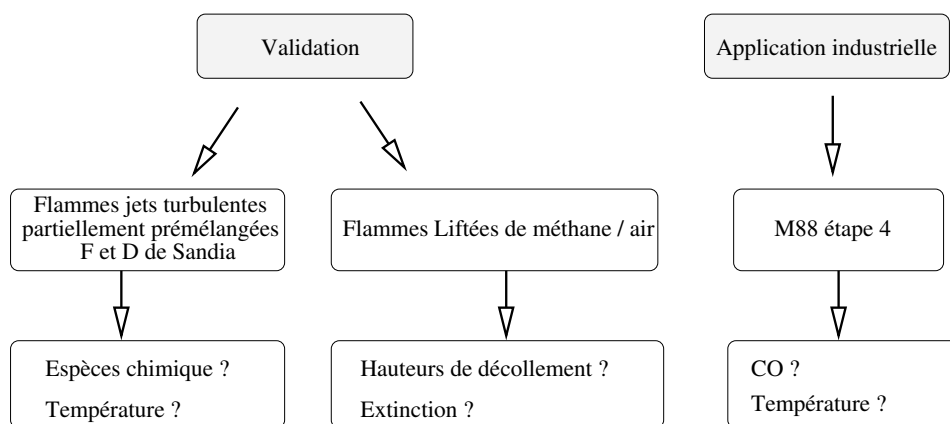


FIG. 15 – Calculs réalisés avec le modèle PCM-FTC

Les calculs réalisés avec le modèle PCM-FTC sont présentés sur la figure 15. Une première partie concerne la validation de la méthode PCM-FTC. Deux cas tests sont réalisés. Le premier consiste à valider les possibilités de prédiction des espèces chimiques. Deux flammes jets turbulentes de Sandia (Barlow and Frank., 1998) sont alors calculées. Les moyennes conditionnées et les moyennes de Favre sont comparées à l'expérience. Le deuxième test consiste à prédire les hauteurs de décollement et les limites d'extinction des flammes jets turbulentes méthane / air en fonction du débit de combustible et de la vitesse de l'air (Muniz and Mungal, 1997).

Le dernier chapitre est consacré à une application du modèle PCM-FTC sur une configuration industrielle : le foyer aéronautique M88 qui équipe actuellement l'avion militaire "*Rafale*". L'étude se focalise sur la prédiction des espèces chimiques, de la température, des zones d'accrochage de la flamme et du rendement de combustion. Ce chapitre est présenté dans un document séparé classé "Confidentiel Industrie".

Ce manuscrit s'achève par une annexe regroupant les informations complémentaires sur le schéma cinétique GRI méthane / air.

Première partie

MÉTHODES DE TABULATION DE LA CINÉTIQUE CHIMIQUE

Chapitre 1

Structures des flammes laminaires

La première étape de l'analyse des méthodes de tabulation consiste à comparer les réponses de flammes laminaires **prémélangées**, se propageant librement (FPI (Gicquel et al., 2000) ou FGM (van Oijen et al., 2001a)), aux flammes laminaires de diffusion à **contre-courant**. Existe-t-il des similitudes entre ces deux types de flammes, qui autoriserait la construction d'une tabulation de la chimie ayant un caractère générique ?

Le vecteur de concentration d'espèces chimiques, la température, et les taux de réaction, qui constituent la table chimique, dépendent de paramètres de contrôle. La fraction de mélange, Z , et la variable d'avancement, c , sont couramment utilisées dans la modélisation de la combustion turbulente. Les méthodes de calculs de ces variables sont discutées dans ce chapitre ainsi que :

- Les épaisseurs des zones de réaction " δ_r ",
- les fractions massiques des espèces chimiques " Y_i ",
- la température.

La configuration des calculs en chimie complexe présentée dans ce chapitre est la suivante : le combustible utilisé est le méthane (CH_4) et le comburant sera l'air (21 % O_2 + 79 % N_2 , en pourcentage volumique). La température des gaz frais est de 300 K. La diffusion différentielle des espèces chimiques sera adoptée et les pertes thermiques radiatives négligées. Le code de calcul pour les flammes prémélangées est PREMIX (Lutz et al., 2000) et pour les flammes non-prémélangées OPPDIF (Lutz et al., 1997). Ces codes monodimensionnels laminaires utilisent les procédures "Chemkin" (Kee et al., 1996). Le schéma cinétique est le GRI (annexe 5). Il est composé de 49 espèces chimiques et 273 réactions élémentaires réversibles.

1.1 Les flammes de diffusion à contre-courant

La prédiction d'un front de flamme turbulent non-prémélangé peut être obtenue par une collection de flammes de diffusion laminaires à contre-courant mono-dimensionnelles (voir les figures 1.1 et 1.2). Cette formulation permet de capturer les effets de chimie non infiniment rapide dans la modélisation de la combustion turbulente. Elle est communément appelée modèle de flammelette (Peters, 1984). La fraction de mélange Z et le taux de dissipation scalaire (fréquence de mélange) $\chi_Z = D_Z |\nabla Z|^2$ (s^{-1}) sont les deux paramètres permettant d'identifier chaque flammelette.

La forme monodimensionnelle des équations de transport des espèces chimiques est obtenue en reformulant les équations de Navier Stokes en coordonnées cylindriques. Les gradients radiaux des espèces sont supposés négligeables devant les gradients axiaux ($\frac{\partial Y_i}{\partial r} \ll \frac{\partial Y_i}{\partial x}$). Ces équations ont aussi été écrites dans l'espace de la fraction de mélange en négligeant de la même manière les gradients d'espèces chimiques et de température le long des iso- Z (Peters, 1984). Par conséquent, cette méthode de tabulation est limitée aux flammes non-prémélangées loin des zones d'extinction locale (fig 1.3 a) ou d'accrochage de flamme (fig 1.3 b).

Une analyse de ces flammes calculées en chimie complexe, permet d'étudier entre autre le comportement de l'étirement local, du point de stagnation et du taux de dissipation scalaire. Les espèces chimiques sont tracées dans un chapitre ultérieur afin de les comparer au régime de combustion prémélangée. Les conditions de calculs sont regroupées dans le tableau 1.1, page 29.

1.1.1 L'étirement local

L'étude de l'étirement local $a(x) = -\frac{du}{dx}$ trouve son importance dans la résolution analytique des équations différentielles ; notamment celle de la fraction de mélange Z :

$$u \frac{\partial Z}{\partial x} = D_Z \frac{\partial^2 Z}{\partial x^2}$$

Dans ces calculs, la diffusion moléculaire de Z est obtenue pour un nombre de Lewis égal 1 ($D_Z = \frac{\lambda}{\rho C_P}$). L'étirement moyen est donné par l'expression suivante, en supposant que la vitesse du combustible est égale à celle du comburant $U_{F,o} = -U_{O,o} = U$:

$$a = \frac{2U}{L}$$

L est la distance séparant les deux conditions d'entrée (voir figure 1.2).

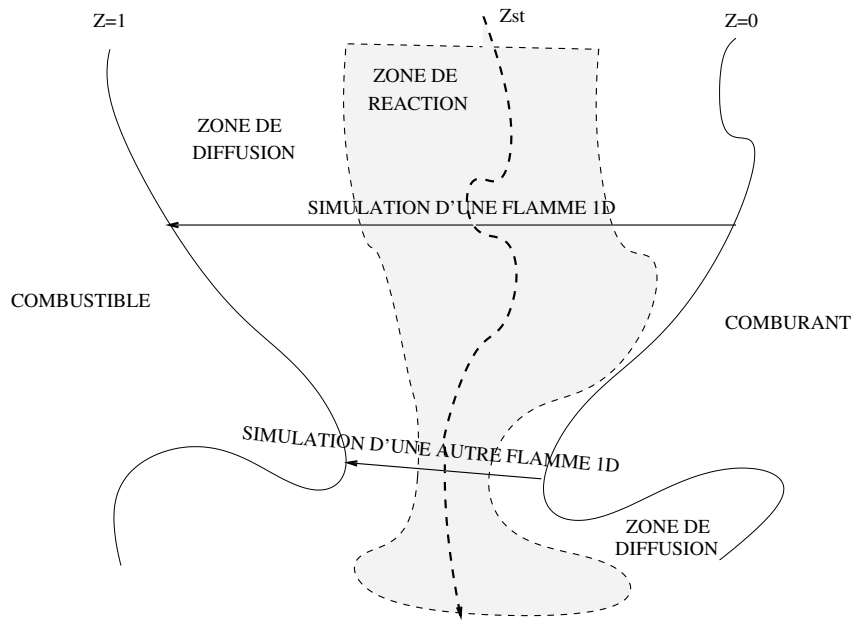


FIG. 1.1 – Représentation d'un front de flamme turbulent par une collection de flammes de diffusion laminaire à contre-courant.

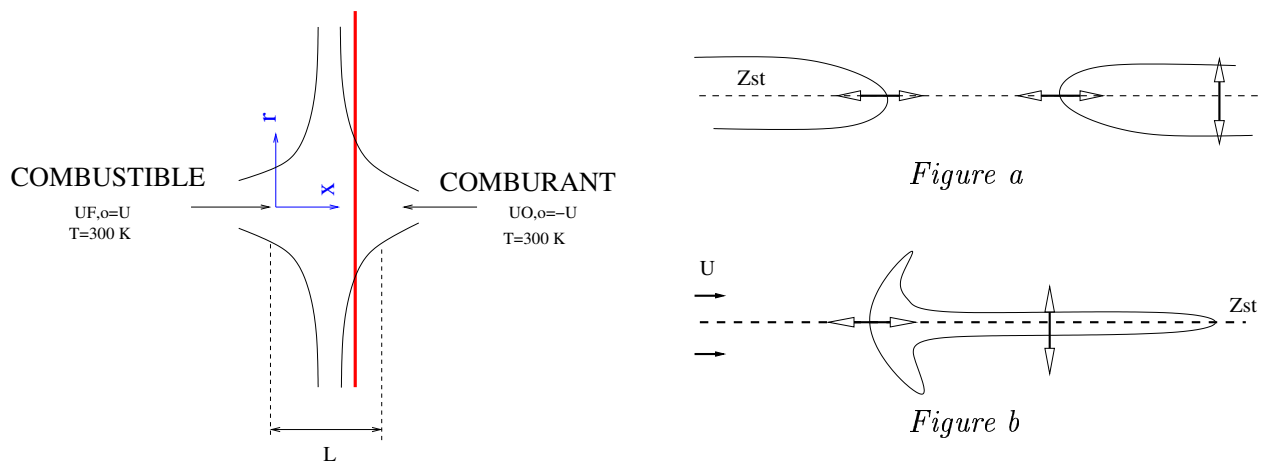


FIG. 1.2 – Flamme de diffusion à contre-courant laminaire.

FIG. 1.3 – Les gradients de température ou d'espèces chimiques le long d'une iso- Z sont négligeables sauf dans le cas d'une extinction (a) ou d'un accrochage (b).

Paramètres physiques	Noms des variables	valeur
Diffusion multi-espèces	$Le_i \neq 1, Sch_i \neq 1$	-
Diffusion de Z	D_Z	$D_Z = \frac{\lambda}{\rho C_P}$
Étirement moyen	a	de 6 à 240 s^{-1}
Distance combustible / comburant	L	10 cm
Vitesses	$U_F = -U_O = U$	$U = \frac{aL}{2}$
Combustible	méthane	-
Comburant	air	-
Température	$T_{combustible} = T_{air}$	300 K
Densité du méthane	ρ_F	0.65 kg.m^{-3}
Densité de l'air	ρ_O	1.17 kg.m^{-3}

TAB. 1.1 – Conditions des calculs des flammes laminaires à contre-courant mono-dimensionnelles.

On s'intéresse particulièrement au terme $\frac{u}{D_Z}$, normalisé par l'étirement moyen. Il est tracé en fonction de la position x (figure 1.4 a) et dans l'espace des phases ou espace de la fraction de mélange (figure 1.4 b). Pour tous les étirements, de l'extinction à l'équilibre chimique, on observe une similitude des courbes, $\frac{1}{a} \frac{u}{D_Z}$ apparaissant comme une fonction simple de Z. L'étirement local n'est pas linéaire avec la position x dans la zone diffusion / réaction.

Une étude analytique permet d'estimer a(x) en supposant la densité constante par saut autour du point de stagnation (Boulanger, 2002). La différence entre la théorie et les calculs est satisfaisante dans les zones à densité constante (figure 1.5 a) mais importante dans les zones à densité variable (figure 1.5 b). La combustion génère des gradients de température, et donc des gradients de densité, responsables de l'augmentation de l'étirement local. Un rapport 5 est observé de chaque côté de la stœchiométrie. À noter cependant, que les résultats analytiques sont obtenus dans des conditions strictes de mélange ($Z \simeq Z_{st}$) et que son extension sur l'ensemble des fractions de mélange ne peut pas totalement corrélérer avec la simulation.

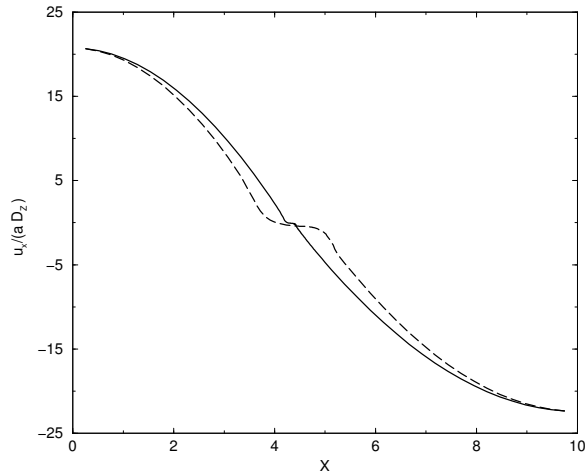


Figure a

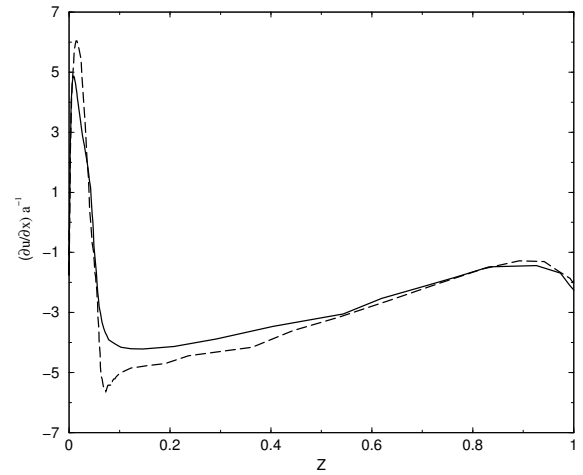


Figure b

FIG. 1.4 – Figure a : $\frac{u}{D_z} * \frac{1}{a}$ en fonction de la position x (en cm). Figure b : $\frac{\partial u}{\partial x} * \frac{1}{a}$ en fonction de la fraction de mélange Z (pointillés $a=6 \text{ s}^{-1}$ trait plein $a=230 \text{ s}^{-1}$).

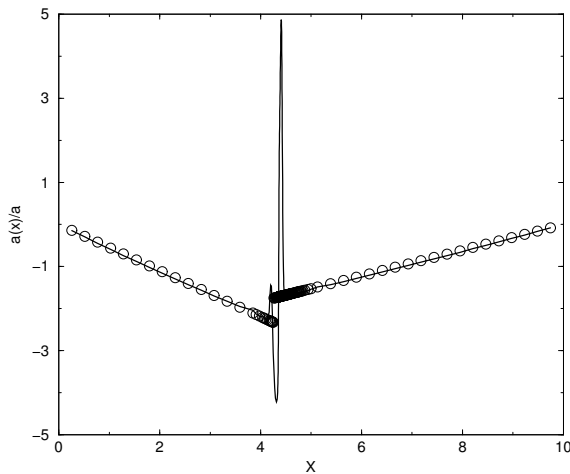


Figure a

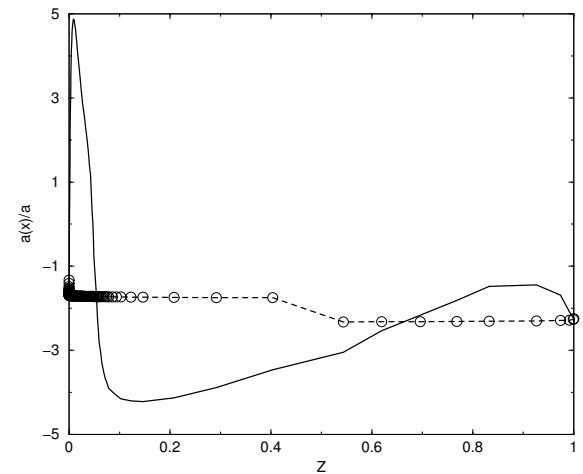


Figure b

FIG. 1.5 – Comparaison entre l'étirement local analytique (cercle) et celui obtenu par le calcul d'une flamme laminaire à contre-courant pour un étirement moyen de 230 s^{-1} (trait plein). Les courbes sont normalisées par l'étirement moyen. Figure a : en fonction de la position x (cm), Figure b : en fonction de la fraction de mélange Z .

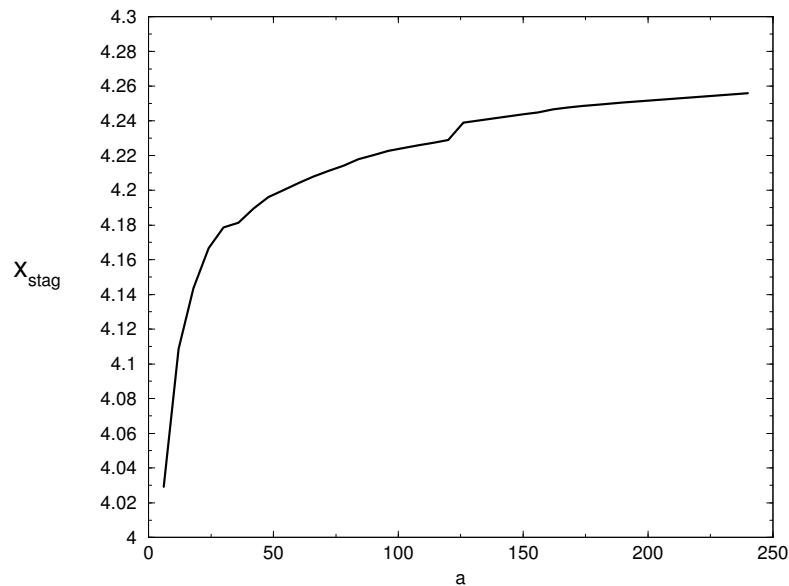


FIG. 1.6 – Position du point de stagnation (en cm) des flammes de diffusion laminaires à contre-courant en fonction de l'étirement moyen (s^{-1}).

1.1.2 Le point de stagnation

Au point de stagnation, la vitesse axiale est nulle et la fraction de mélange est égale à 0.5 quelque soit l'étirement moyen. L'équation de quantité de mouvement permet de formuler une expression du point de stagnation (Boulanger, 2002).

$$x_{stag} = \frac{L}{1 + \frac{U_{O_2,0}}{U_{F,0}} \sqrt{\frac{\rho_{O_2,0}}{\rho_{F,0}}}}$$

La position x_{stag} théorique, qui correspond au cas non réactif, est 4,27 cm. La position du point de stagnation obtenue par les calculs en combustion (chimie complexe) varie d'une flammelette à l'autre (figure 1.6). Elle tend vers la valeur théorique lorsque l'étirement moyen augmente, c'est-à-dire proche de l'extinction (front de flamme extrêmement mince).

1.1.3 Le taux de dissipation scalaire

Par définition de la dissipation scalaire à une dimension,

$$\chi = D_Z \left| \frac{dZ}{dx} \right|^2$$

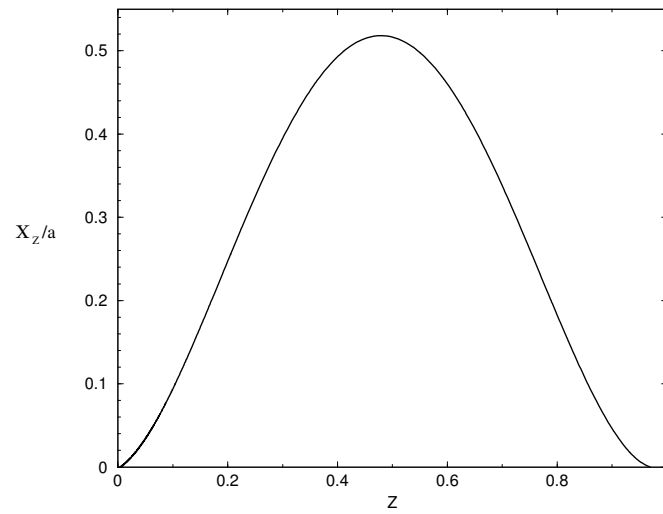


FIG. 1.7 – *Taux de dissipation scalaire normalisé par l'étirement moyen en fonction de la fraction de mélange. Calculs numériques moyennés sur tous les étirements.*

Dans les simulations, les profils du taux de dissipation scalaire normalisé par l'étirement moyen se superposent avec un maximum pour $Z=0.5$. (figure 1.7).

$$\frac{\chi}{a} = F(Z)$$

Ce résultat montre le caractère linéaire entre la dissipation scalaire de la fraction de mélange et l'étirement moyen. Par la suite, la flammelette sera caractérisée indifféremment par la dissipation scalaire ou l'étirement moyen.

1.2 Les flammes prémélangées laminaires

Les flammes utilisées sont laminaires prémélangées monodimensionnelles se propageant librement vers les gaz frais à la vitesse de flamme laminaire S_o^L (figure 1.8). Les éventuelles pertes thermiques ne sont pas prises en compte.

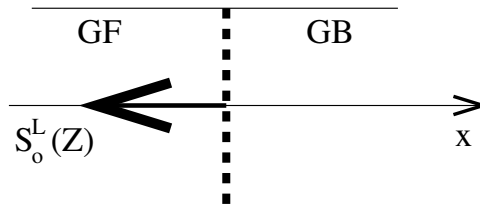


FIG. 1.8 – *Flamme laminaire se propageant librement vers les gaz frais (GF) et laissant derrière elle les gaz brûlés (GB).*

Les conditions de calculs sont similaires aux flammes non-prémélangées, notamment la cinétique chimique et les propriétés de transport restent identiques.

Les variables caractéristiques de ce régime de combustion sont la fraction de mélange, Z (ou la richesse ϕ), et la vitesse de flamme laminaire, S_o^L . Celle-ci est maximale à la stœchiométrie et nulle au-delà des limites d'inflammabilité.

On s'intéresse dans cette partie à mesurer les zones de réaction (pour différentes définitions) en fonction du mélange, à quantifier les vitesses de flammes laminaires et à présenter en détail la méthode de tabulation FPI, Flame Prolongation of ILDM (Gicquel, 1999).

1.2.1 Les zones de réaction

La définition de la zone de réaction est arbitraire, car le taux de réaction ne s'annule vraiment qu'aux conditions limites, c'est-à-dire en $x = -\infty$ ou en $x = +\infty$. Il va donc falloir se donner des limites pour lesquelles la réaction est supposée négligeable. En particulier, il sera intéressant de comparer différentes définitions que l'on retrouve dans la littérature. L'avancement de la réaction, c , est souvent utilisé pour mesurer les zones de réactions. Il est calculé avec la somme des fractions massiques de Y_{CO} et Y_{CO_2} : $c = \frac{Y_{CO} + Y_{CO_2}}{Y_{CO}^{eq} + Y_{CO_2}^{eq}}$. Ce choix est discuté dans les chapitres suivants.

Trois définitions pour l'épaisseur de flamme sont retenues :

$$\begin{aligned}\delta_r &= x(c = 0.9) - x(c = 0.1) \text{ (Veynante and Poinso, 2001)} \\ \delta_r &= \frac{T^{eq} - T_0}{\left(\frac{\partial T}{\partial x}\right)^{max}} \text{ (Veynante and Poinso, 2001)} \\ \delta_r &= x_{max} - x_{min}\end{aligned}$$

x_{max} et x_{min} sont les deux positions de la flamme prémélangée pour lesquelles $\dot{\omega}_{Y_c} = \alpha \cdot \dot{\omega}_{Y_c}^{max}$, où plusieurs valeurs de α peuvent être choisies (voir figure 1.9). Les différentes épaisseurs de flammes données par les définitions précédentes sont tracées sur la figure 1.10.

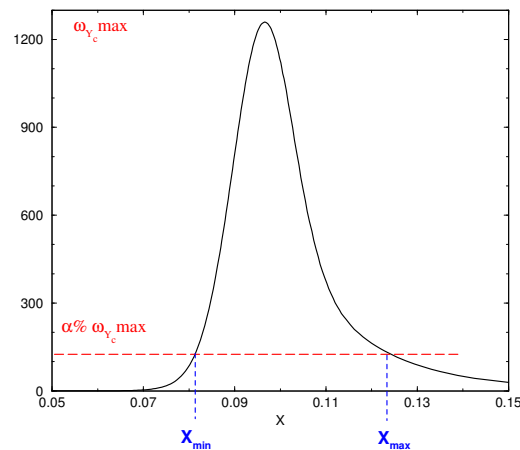


FIG. 1.9 – Taux de réaction $\dot{\omega}_{Y_c}$ en fonction de la coordonnée x (cm) d'une flamme prémélangée stœchiométrique. Définitions des positions $x_{min} \simeq 0.08$ cm et $x_{max} \simeq 0.12$ cm d'où $\delta_r \simeq 0.4$ cm.

Il a été aussi observé dans ces flammes prémélangées que les gradients de vitesse (étirement local) au maximum de la réaction (à la position x^*) est exactement la moitié de l'étirement maximum observé dans la flamme :

$$\left. \frac{du}{dx} \right|_{x^*} = \frac{1}{2} \left(\frac{du}{dx} \right)^{max}$$

Ce comportement se produit à toutes les richesses.

Dans les flammes laminaires prémélangées, l'ordre de grandeur de la zone de réaction est le millimètre (figure 1.10) (Toutefois, les espèces radicalaires évoluent sur des distances de l'ordre du μm). Elle est minimale pour des fractions de mélange comprises entre 0.04 et 0.065 du fait d'une réaction plus intense et des gradients d'espèces plus forts proche de la stœchiométrie ($Z \simeq Z_{st} \simeq 0.055$). Cette épaisseur augmente pour les mélanges riche ou pauvre.

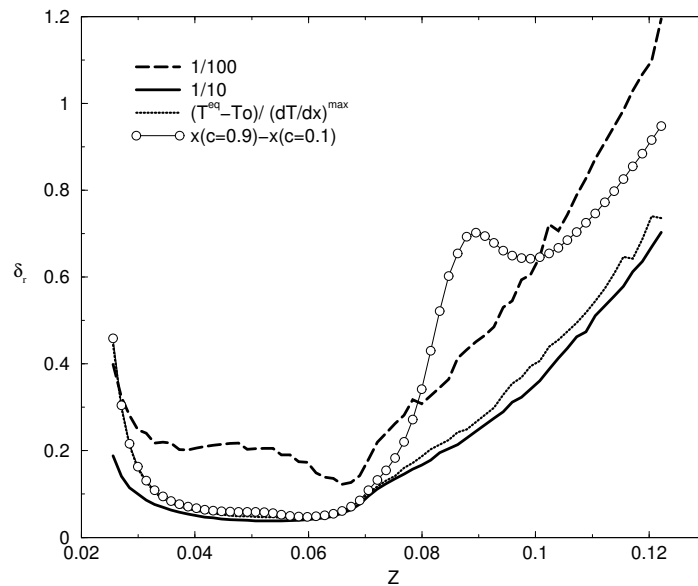


FIG. 1.10 – *Épaisseur (en cm) de la zone de réaction δ_r des flammes prémélangées laminaires méthane / air en fonction de la fraction de mélange pour différentes définitions de δ_r .*

1.2.2 La vitesse de flamme laminaire

Deux calculs analytiques des vitesses de flammes laminaires prémélangées sont comparés aux calculs en chimie complexe. La figure 1.11 est le résultat de ces comparaisons sur les vitesses de flammes en fonction de la fraction de mélange, Z .

- Une première définition est issue d’une analyse dimensionnelle : $\delta_r \simeq \frac{D_T}{S_o^L}$. Avec D_T , la diffusion thermique. L’épaisseur de la zone de réaction peut être reliée au gradient de température maximum de la flamme (Veynante and Poinso, 2001) :

$$\delta_r \simeq \frac{T^{eq} - T_o}{\left(\frac{\partial T}{\partial x}\right)^{max}}.$$

Finalement,

$$S_o^L \simeq \frac{D_T}{T^{eq} - T_o} \left(\frac{\partial T}{\partial x}\right)^{max} \quad (1.1)$$

En supposant la diffusion thermique proportionnelle à l’écart de température entre l’équilibre et le mélange, S_o^L devient proportionnelle au gradient maximal de la flamme prémélangée ($S_o^L \simeq C_1 \left(\frac{\partial T}{\partial x}\right)^{max}$). Pour la combustion méthane / air, la constante est fixée à $8.3E^{-8} m^2 / (Ks)$ afin de retrouver S_o^L à la stœchiométrie. Les résultats analytiques coïncident aux simulations pour toutes les richesses (figure 1.11).

- La deuxième définition pour la vitesse de flamme est obtenue par la relation de William ($S_o^L \simeq \sqrt{D_T \dot{\omega}_T^{max}}$) (Libby and Williams, 1994). $\dot{\omega}_T^{max}$ est le taux de réaction thermique. En supposant D_T proportionnelle à $\Delta_T = T^{eq} - T_o$ et le taux de production $\dot{\omega}_T^{max}$ proportionnel au taux de production, $\dot{\omega}_{Y_c}^{max}$, de la variable de progrès $Y_c = Y_{CO_2} + Y_{CO}$, on obtient :

$$S_o^L \simeq \sqrt{C_2 \Delta_T \dot{\omega}_{Y_c}^{max}(Z)} \quad (1.2)$$

Avec pour constante $C_2 = 0.5E^{-8}m^2/(Ks)$, fixée pour retrouver S_o^L à la stœchiométrie, les résultats se superposent aux calculs numériques.

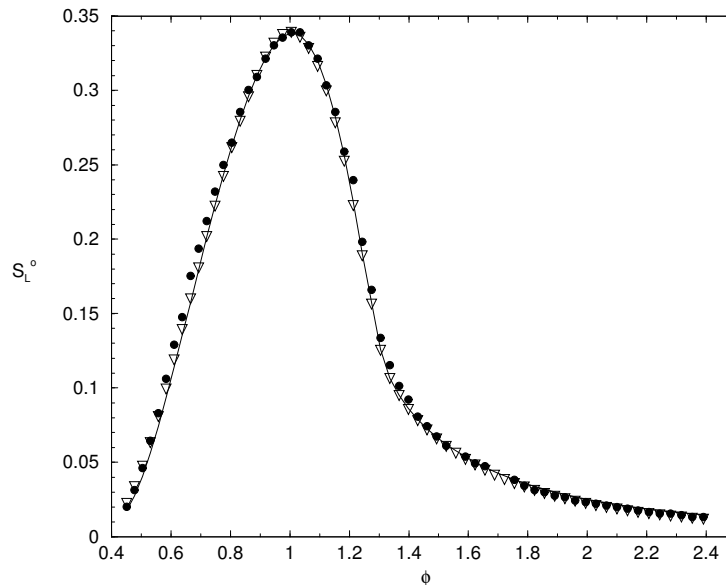


FIG. 1.11 – Vitesse de flamme laminaire méthane/air, S_o^L (en m/s) en fonction de la richesse locale (trait plein). Comparaison avec deux définitions analytiques : $\frac{dT}{dx}^{max} * C_1$ (cercles) et $\sqrt{C_2 \Delta_T * \dot{\omega}_{Y_c}^{max}}$ (triangles).

1.2.3 Méthode FPI, Flame Prolongation of ILDM (Gicquel, 1999)

Déjà en 1990, Bradley utilisa une tabulation de flammes prémélangées (Bradley et al., 1990) dans les modèles de combustion turbulente. Il retrouve notamment les hauteurs de décrochage et les soufflages de flamme méthane / air (Bradley et al., 1998). Il s'intéresse principalement aux propriétés physiques de la flamme et non à l'aspect chimique (les fractions massiques et la température ne sont pas comparées à l'expérience). Pour cela, il n'utilise pas directement les données issues de la cinétique chimique, mais une forme

analytique du taux de dégagement de chaleur.

En 1992, Mass et Pope proposent une nouvelle méthode de réduction automatique de la cinétique chimique basée sur l'étude des temps caractéristiques chimiques : ILDM (Intrinsic Low-Dimensional Manifolds) (Maas and Pope, 1992a). Cette formulation, valable dans les zones à température élevée a été complétée pour les faibles températures par des flammes prémélangées laminares se propageant librement (méthode FPI : Flame Prolongation of ILDM et FGM : Flame Generated Manifold (van Oijen et al., 2001b)). Depuis 1998, les flammes prémélangées sont utilisées dans les zones à basses et hautes températures sans la formulation ILDM (Gicquel, 1999).

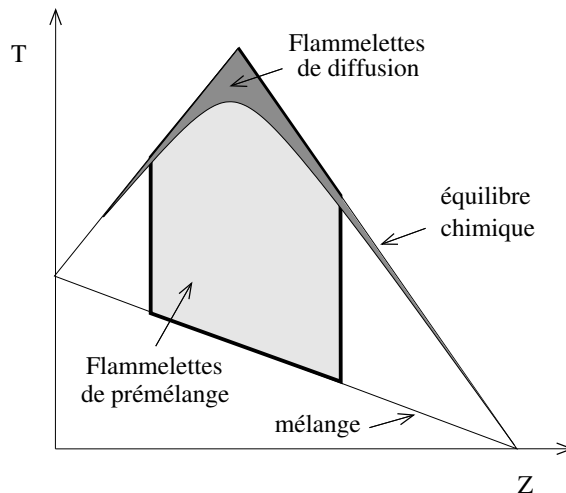


FIG. 1.12 – *Domaine de combustion dans l'espace des phases du mélange à l'équilibre chimique. Schéma représentant la température (préchauffé côté comburant) en fonction de la fraction de mélange. Domaines des flammelettes de diffusion (gris foncé) et de prémélange (gris clair).*

Le principe consiste à tabuler, dans l'espace de la fraction de mélange et d'une variable d'avancement, les fractions massiques des espèces chimiques leurs taux de production et la température. Cette méthode de tabulation permet de couvrir la totalité du domaine de combustion (figure 1.12). Au-delà des limites d'inflammabilité, les termes sources chimiques sont négligeables, la flamme ne se propage plus et une interpolation linéaire dans l'espace de Z est souvent adoptée pour les espèces chimiques, bien que la diffusion soit en théorie complexe avec des coefficients D_k différents pour chaque espèce. La température est interpolée à partir de l'équilibre chimique et de l'avancement obtenu aux limites d'inflammabilité.

Ce type de tabulation est applicable aux flammes prémélangées turbulentes, mais aussi aux flammes non-prémélangées lorsque le combustible est mélangé à l'échelle moléculaire au comburant avant de réagir. On peut citer par exemple les flammes jets liftées (Muniz and Mungal, 1997) pour lesquelles les hauteurs de décollement correspondent à une zone de mélange ou les flammes à swirl stabilisant la flamme proche des zones de recirculation et donc de mélange intense.

La prise en compte des pertes thermiques est possible en calculant des flammes prémélangées stabilisées par un brûleur (Fiorina et al., 2000).

Dans le cadre d'une hypothèse de tabulation FPI, les espèces chimiques et la température sont toutes dépendantes de la fraction de mélange, Z , et de l'avancement de la réaction, c

$$\phi_i = \phi_i(Z, c)$$

Les résultats de la tabulation FPI sont tracés sur la figure 1.13. Il s'agit de la combustion méthane / air avec une température des gaz frais de 300 K. Les courbes représentent les fractions massiques des espèces chimiques majoritaires et la température en fonction du rapport d'équivalence ϕ , pour différents avancements de la réaction c , dont la définition est choisie en accord avec les travaux de Benoît Fiorina (Fiorina et al., 2000).

$$c = \frac{Y_{CO_2} + Y_{CO}}{Y_{CO_2}^{eq} + Y_{CO}^{eq}}$$

On a mis en évidence l'importance de la fraction de mélange, Z , et de la variable d'avancement, c , dans les réponses des flammes laminaires prémélangées et de diffusion à contre-courant. Or il existe de nombreuses définitions pour quantifier numériquement et expérimentalement ces deux paramètres. La différence entre ces méthodes de calcul est maintenant discutée.

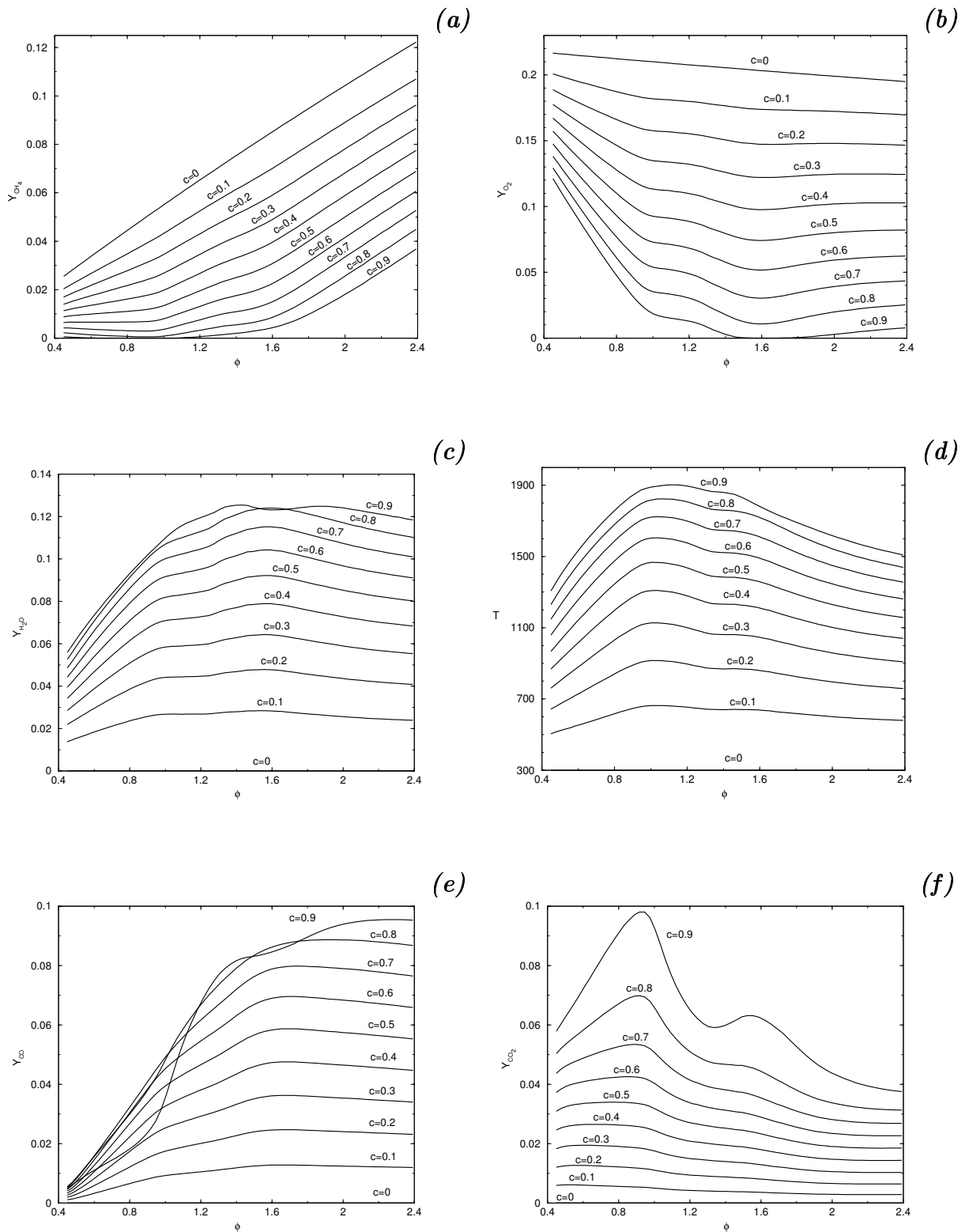


FIG. 1.13 – Tabulation FPI de la combustion méthane / air; Fractions massiques Y_{CH_4} (a), Y_{O_2} (b), Y_{H_2O} (c), Y_{CO} (e), Y_{CO_2} (f) et la température (d) en fonction de la richesse dans les flammes prémélangées pour différents avancements de la réaction ($c = \frac{Y_{CO_2} + Y_{CO}}{Y_{CO_2}^{eq} + Y_{CO}^{eq}}$).

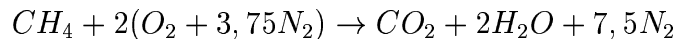
1.3 Méthodes de calcul des paramètres de contrôle

1.3.1 La fraction de mélange

Dans le cas d'une combustion d'hydrocarbure, une des méthodes expérimentales utilisée pour calculer la fraction de mélange est basée sur le calcul des fractions atomiques du carbone et de l'hydrogène, quelle que soit la molécule dans laquelle ils se trouvent (Bilger et al., 1990). Elle peut s'écrire :

$$Z = \frac{(Y_H - Y_{H,o})/(\mu_H M_H) + (Y_C - Y_{C,o})/(\mu_C M_C)}{(Y_{H,F} - Y_{H,o})/(\mu_H M_H) + (Y_{C,F} - Y_{C,o})/(\mu_C M_C)} \quad (1.3)$$

Avec μ_a le nombre d'éléments atomiques "a" contenus dans les réactifs à la stœchiométrie. Par exemple, dans la combustion méthane / air,



$\mu_C = 1$, $\mu_O = 2 * 2 = 4$, $\mu_H = 4$.

$Y_{H,o} = 0$ est la fraction massique totale des atomes d'hydrogène dans le comburant, $Y_{H,F} = 0,251$ dans le combustible. L'indice C correspond au carbone ($Y_{C,o} = 0$, $Y_{C,F} = 0,749$). M_a est la masse molaire de l'élément atomique "a". Y_H et Y_c sont les fractions massiques atomiques qui dépendent du mélange. Elles sont calculées par la relation :

$$Y_H = \sum_{i=1}^N \frac{\mu_H^i * M_H}{M_i} * Y_i$$

Avec μ_H^i le nombre d'atome d'hydrogène dans l'espèce i. Par exemple $\mu_H^{CH_4} = 4$.

Cette définition permet de conserver la valeur de la fraction de mélange à la stœchiométrie pour de nombreux réactifs, même quand la diffusion différentielle est significative. Elle est applicable à la fois dans les flammes laminaires prémélangées et à contre-courant. Cette définition peut être étendue en ajoutant les fractions atomiques de l'oxygène et de l'azote, lorsque de nombreuses espèces chimiques interviennent dans les réactifs (CO ...). Cette extension ne sera pas nécessaire dans notre étude car les hydrocarbures utilisés sont le méthane (CH_4) et le kérosène ($C_{10}H_{22}$, espèce majoritaire).

Contre toute attente, la fraction de mélange dans une flamme laminaire prémélangée peut avoir de légères variations générées par la multi-diffusion des espèces chimiques (voir figure 1.14). Sur cette figure, on compare la fraction de mélange définie par Bilger (équation 1.3) à la fraction de mélange initiale définie par les compositions des réactifs ($Y_F^{mel}/Y_{F,o}$). L'hydrogène, par sa légèreté, est une espèce ayant une grande capacité de

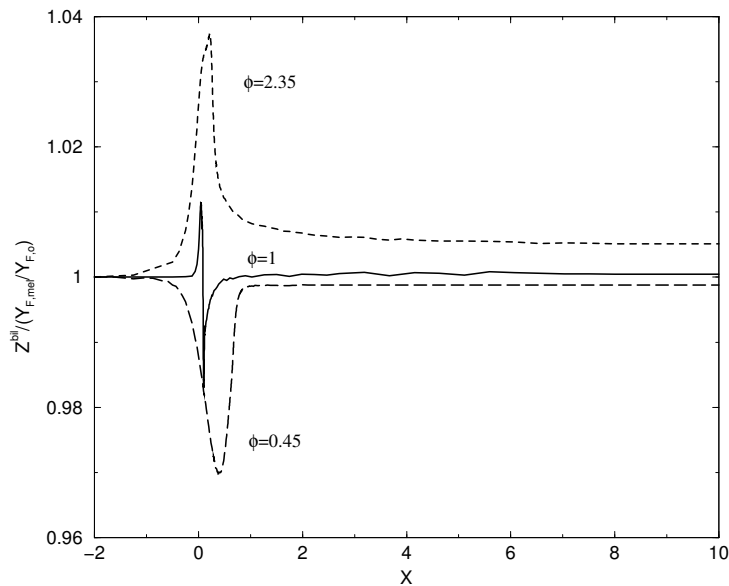


FIG. 1.14 – Fractions de mélange calculée par la relation de Bilger normalisée par la fraction de mélange dans les gaz frais ($x = -2$ cm) en fonction de la coordonnée x (en cm) des flammes prémélangées laminaires méthane / air. $\phi = 0.45$ longs pointillés, $\phi = 1$ trait plein, $\phi = 2.35$ petits pointillés.

diffusion. Elle provoque alors des zones pauvres ou riches en hydrogène. La différence entre la fraction de mélange de Bilger au point de mélange à froid ($x \rightarrow -\infty$) et celle de l'équilibre chimique ($x \rightarrow +\infty$) ne dépasse pas les 5 %. Les écarts les plus importants sont proches de la zone de réaction ($x \simeq 0$) et pour des mélanges riches ou pauvres. Dans une flamme prémélangée pauvre, Z^{Bilger} est sous-estimée alors que dans une flamme riche elle est surestimée.

On s'intéresse dans ce paragraphe à identifier si le mélange est bien soumis à des écarts le long de la flamme prémélangée ou si c'est la définition de Bilger qui crée ces différences. Un moyen de quantifier l'influence des écarts entre deux mélanges est de comparer les niveaux de température à l'équilibre chimique de ces mélanges. La figure 1.15 est le résultat de la température à l'équilibre chimique obtenue à partir du mélange de réactifs (froid, $c_{mel} = 0$) et d'un mélange à $c = Y_{H_2O}/Y_{H_2O}^{eq} = 0.5$ (qui correspond au maximum de différence observé sur la fraction de mélange) en fonction de la fraction de mélange de Bilger.

Le combustible est un mélange hydrogène dilué à 20 % (en volume) par de l'hélium. Le comburant est l'air. La fraction de mélange à la stœchiométrie est $Z_{st} = 0.036$. La température des gaz frais est 300 K.

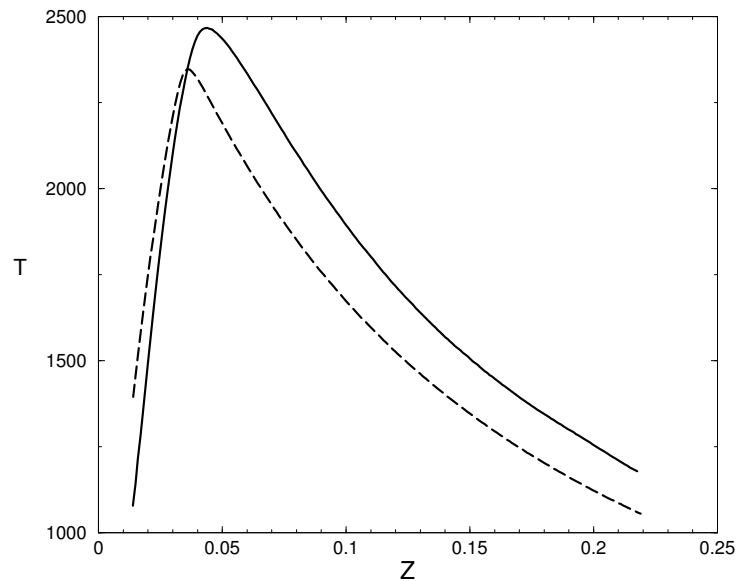


FIG. 1.15 – Température d'équilibre chimique d'une flamme ($H_2/He/air$) en fonction de la fraction de mélange Z (définition de Bilger, Eq. 1.3). Résultats obtenus à partir de deux types de mélange issus des calculs de flammes prémélangées ($c_{mel} = 0$ pointillé, $c_{mel} = 0.5$ trait plein).

Les écarts observés sur la température sont directement liés aux valeurs de fraction de mélange calculée par la relation de Bilger.

- A la stœchiométrie, la température d'équilibre est identique lorsque les mélanges initiaux ont un avancement de la réaction $c_{mel} = 0,5$ ou $c_{mel} = 0$. Ceci est en accord avec le fait que la fraction de mélange par définition de Bilger est voisine du mélange initial tout le long de la flamme prémélangée : $Z_{\text{Bilger}} \simeq Z_{mel}(c_{mel} = 0)$.
- Du côté pauvre de la flamme la température d'équilibre d'un mélange initial à $c_{mel} = 0.5$ est plus faible que pour un mélange initial à $c_{mel} = 0$. Ce résultat est aussi en accord avec le fait que $Z_{\text{Bilger}} < Z_{mel}(c_{mel} = 0)$.
- Du côté riche de la flamme, c'est identique :

$$T^{eq}(c_{mel} = 0.5) > T^{eq}(c_{mel} = 0) \text{ car } Z_{\text{Bilger}} > Z_{mel}(c_{mel} = 0)$$

- Enfin, on observe une température adiabatique de flamme légèrement supérieure et décalé du côté riche pour un calcul d'équilibre issu d'un mélange $c_{mel} = 0,5$ en comparaison avec un mélange $c_{mel} = 0$. Cette différence est de 100 K (5% d'écart). Par conséquent, la relation de Bilger permet de capturer les variations de mélange à l'intérieur d'une flamme prémélangée que l'on peut observer dans ces simulations numériques.

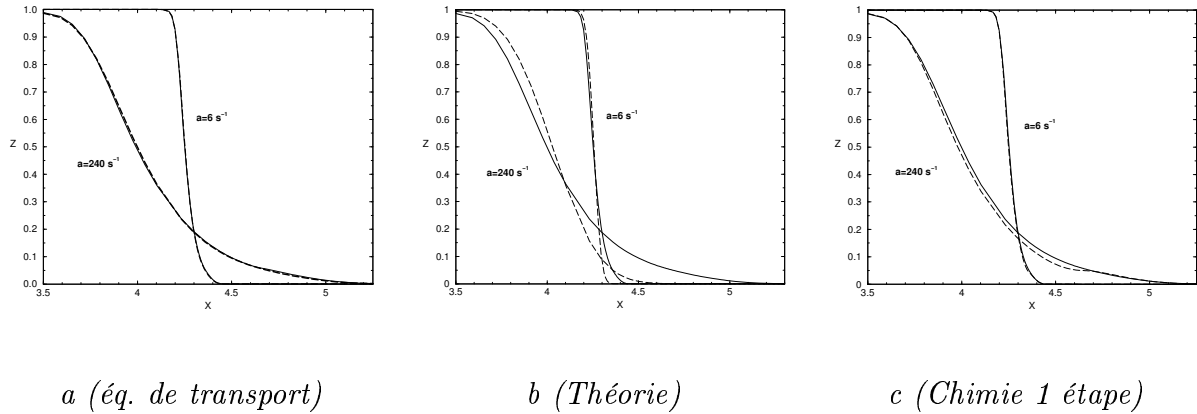


FIG. 1.16 – Fraction de mélange en fonction de la coordonnée x (en cm) des flammes laminaires à contre-courant à deux étirements moyen ($a=6 \text{ s}^{-1}$ et $a=240 \text{ s}^{-1}$). Trait plein : Relation de Bilger. Longs pointillés : Calculs par l'équation de transport (a), analytiques (b) et une hypothèse de chimie à une étape (c).

La relation de Bilger est maintenant comparée avec trois autres définitions dans les flammes laminaires de diffusion à contre-courant : une équation de transport pour Z , un calcul analytique et une hypothèse de chimie à une étape (une réaction). Le but est de définir une stratégie de calcul de la fraction de mélange qui permettra la comparaison entre l'expérience et les simulations avec une faible incertitude.

– **Equation de transport pour Z** (figures 1.16 a)

Cette équation de transport pour la fraction de mélange Z s'écrit :

$$\frac{\partial \rho Z}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho u Z) = \nabla \cdot (\rho D_Z \nabla Z) \quad (1.4)$$

Ce scalaire est passif, il n'y a donc pas de terme source chimique. Le premier terme du membre de gauche est le terme instationnaire, le second est la convection. Le membre de droite représente la diffusion moléculaire. Le coefficient de diffusion moléculaire D_Z reste un paramètre délicat à calculer. En effet, il est difficile de définir ce coefficient lorsque les molécules ne diffusent pas tous de la même manière (diffusion différentielle). Une première approximation est déterminée en supposant le nombre de Lewis de la fraction de mélange unitaire :

$$Le_Z = \frac{\lambda}{\rho C_p D_Z} = 1$$

La bonne correspondance entre ces résultats et la définition de Bilger, figure 1.16 (a), montre que cette hypothèse est applicable à la combustion méthane / air et

signifie que la diffusion différentielle a peu d'influence sur la fraction de mélange. Il faut souligner toutefois qu'elle n'est pas pour autant sans effet sur les taux de réactions, les concentrations des espèces chimiques, ou encore la température.

– **Calcul analytique (Peters, 1984)** (figures 1.16 b)

La fraction de mélange est calculée par intégration de son équation de transport stationnaire. De même que précédemment, le coefficient de diffusion laminaire D_Z doit être connu analytiquement. Il est alors supposé constant $D_Z = D_{air}(x \rightarrow \infty) = 0.17910^{-4} m^2 s^{-1}$. La vitesse reste une inconnue qui est levée en supposant l'étirement constant. Finalement, l'expression de la fraction de mélange devient (Peters, 1986) :

$$Z = \frac{1}{2} \operatorname{erfc}(\eta)$$

avec erfc la fonction erreur complémentaire ($\operatorname{erfc} = 1 - \operatorname{erf}$) et $\eta = \sqrt{\frac{a}{2D}}(x - x_{stag})$.

Toutes les flammelettes de diffusion calculées en chimie complexe ont un point commun : le point de stagnation (vitesse nulle). A cette position caractéristique, la fraction de mélange est constante quelle que soit l'étirement. Pour la définition de Bilger, Z est égale à 0.2 et pour le calcul analytique Z est égale à 0.1. De plus, le point de stagnation calculé en chimie complexe $x_{stag} = 4.295$ cm est légèrement supérieur à la valeur théorique (4.27 cm (Boulanger, 2002)). Les différences observées peuvent être expliquées par l'hypothèse d'un étirement et d'un coefficient de diffusion constants.

Finalement, les profils de fraction de mélange obtenus par cette analyse ne coïncident pas avec les calculs en chimie complexe. Cette méthode de calcul ne sera pas utilisée par la suite.

– **Calcul par l'hypothèse d'une chimie à une étape.** (figures 1.16 c)

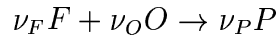
Sous les hypothèses d'une chimie simple à une étape avec des coefficients de diffusion constant et égaux pour les réactifs ($D_F = D_O = D$), un calcul basé sur les équations de transport de la fraction massique du combustible et du comburant permet d'exprimer la fraction de mélange de la manière suivante :

$$Z = \frac{\varphi \frac{Y_F}{Y_{F,o}} - \frac{Y_O}{Y_{O,o}} + 1}{\varphi + 1}$$

avec φ le rapport d'équivalence défini par :

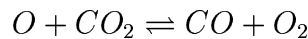
$$\varphi = \frac{\nu_O M_O Y_{F,o}}{\nu_F M_F Y_{O,o}}$$

Où les M_i sont les masses molaires de l'espèce i et les ν_i sont les coefficients stœchiométriques molaires :



A la stœchiométrie, $Y_F = Y_O = 0$ et la fraction de mélange devient $Z_{st} = \frac{1}{\varphi+1}$.

La fraction de mélange, ainsi définie, (figure 1.16 c) coïncide avec la relation de Bilger dans la zone pauvre de la flamme ($Z < Z_{st} = 0.055$). Les différences visibles sont obtenues dans la zone riche où la théorie sous estime la fraction de mélange, probablement à cause d'une réaction incomplète du CO et O_2 :



Conclusion :

- Nous avons choisi de calculer une équation de transport pour la fraction de mélange Z dans les calculs en chimie complexe des flammes à contre-courant laminares ; les résultats n'ayant montré que de faibles différences entre cette définition et la relation de Bilger.
- Le long d'une flamme prémélangée, la définition de Bilger mesure de légères variations de la fraction de mélange autour du mélange initial, n'influençant que peu les résultats. Dans les calculs, le mélange initial sera choisi pour définir le mélange le long d'une flamme prémélangée.

Ces définitions de la fraction de mélange permettent de faire des comparaisons entre les calculs en chimie complexe et l'expérience avec des incertitudes qui restent raisonnables.

1.3.2 La variable d'avancement

Couramment utilisée dans les flammes prémélangées cette variable peut aussi remplacer le taux de dissipation scalaire de la fraction de mélange χ_Z dans les flammes à contre-courant.

$$\phi_i(Z, \chi_Z) = \phi_i(Z, c)$$

Où $c = c(Z, \chi_Z)$.

Dans ce cas, la borne inférieure est limitée par l'avancement de la réaction à l'extinction de la flammelette de diffusion ($c=c_q$). Cette transformation arbitraire permet d'utiliser les mêmes paramètres de contrôle dans un régime de combustion prémélangé et non-prémélangé, et ainsi faciliter les comparaisons.

Il existe plusieurs définitions possibles pour décrire l'avancement global de la réaction. Elles peuvent être définies en fonction des réactifs et des produits de combustion, ou encore de la température. Le choix de la définition de c reste important. Une évolution homogène dans toute la flamme est nécessaire, ce qui écarte les espèces chimiques ayant des cinétiques chimiques trop rapides ou trop lentes.

On voit alors apparaître un problème lié au nombre de variables d'avancement : peut-on connaître, pour un mélange donné, le vecteur de concentration des espèces chimiques et la température avec une seule variable d'avancement ? Si cela est possible, le surcoût du temps de calcul en chimie complexe devient alors anodin, puisque les 50 (ou plus) équations de transport des espèces chimiques se résument à seulement 2 équations (Z, c).

Les fractions massiques des produits de combustion, ou la température, ont un maximum de variation à la stœchiométrie ; elles sont donc des variables privilégiées pour définir l'avancement de la réaction.

$$c = \frac{T - T_o}{T_{eq} - T_o} \text{ ou } c = \frac{Y_{CO_2}}{Y_{CO_2}^{eq}} \text{ ou encore } c = \frac{Y_{H_2O}}{Y_{H_2O}^{eq}}$$

Il est aussi possible de faire des combinaisons entre les espèces chimiques :

$$c = \frac{Y_{CO_2} + Y_{CO}}{Y_{CO_2}^{eq} + Y_{CO}^{eq}}$$

$$c = \frac{Y_{CO_2} + Y_{CO} + Y_{H_2O}}{Y_{CO_2}^{eq} + Y_{CO}^{eq} + Y_{H_2O}^{eq}}$$

Les figures 1.17 montrent l'influence de la définition de la variable d'avancement sur des flammes à contre-courant. La température est tracée en fonction de variable de progrès Y_c pour deux définitions de Y_c . Chacune des courbes correspond à une flammelette pour un étirement moyen fixé. Contrairement à la simple définition $Y_c = Y_{CO_2}$ (figure a), qui n'apporte pas une relation bi-univoque entre T et Y_c , la combinaison $Y_c = Y_{CO_2} + Y_{CO}$ (figure b) permet de différencier facilement chaque flammelette.

Une étude similaire sur les flammes laminaires prémélangées a déjà été effectuée (Fiolina et al., 2000). Cette étude réalisée à Lewis unitaire, a permis de définir une variable d'avancement par la somme $Y_c = Y_{CO_2} + Y_{CO}$. Les calculs avec multi-diffusion des espèces chimiques présentent des résultats similaires (voir figure 1.18). La température est tracée en fonction de la variable de progrès pour 3 définitions de Y_c . La figure (a) montre les limites de la définition de Y_c par la fraction massique de CO_2 . Au delà de la stœchiométrie, par exemple $\phi = 1.75$, on observe que les courbes ne sont plus bijectives et qu'il existe donc deux températures correspondant à une seule valeur de CO_2 . Ce phénomène

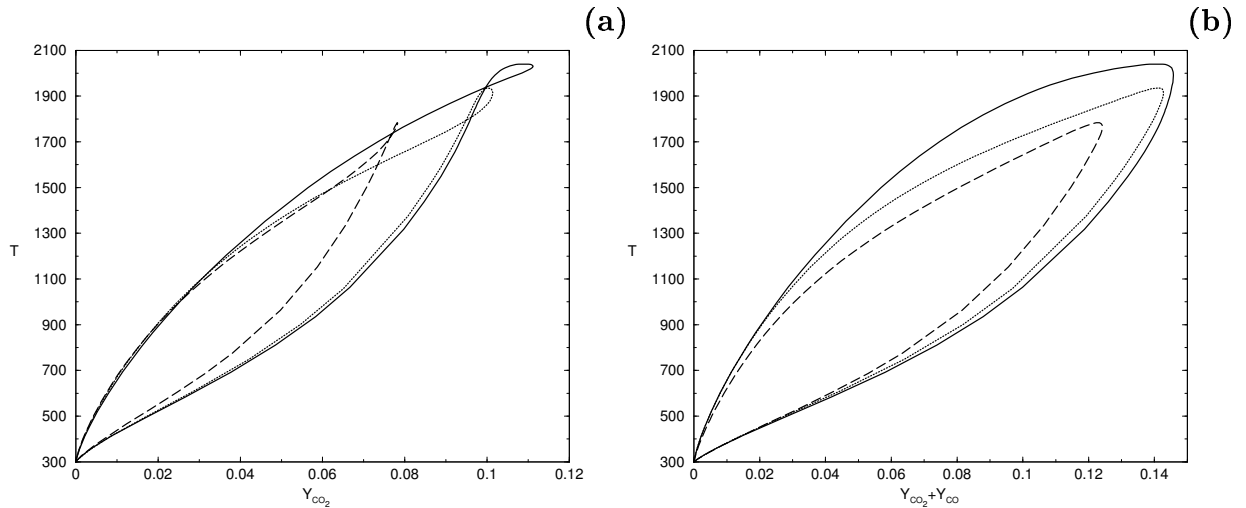


FIG. 1.17 – *Température le long des flammes laminaires à contre-courant pour trois étirements moyens (6 s^{-1} traits pleins 90 s^{-1} pointillés et 240 s^{-1} longs pointillés) en fonction d'une variable de progrès Y_c . (a) : $Y_c = Y_{CO_2}$. (b) : $Y_c = Y_{CO_2} + Y_{CO}$.*

est attribué à la décomposition du CO_2 en CO . C'est pourquoi une définition qui capture le fort couplage entre CO et CO_2 a été testée. La figure (b) montre que la somme $Y_c = Y_{CO_2} + Y_{CO}$ améliore significativement les résultats, puisque dans la majorité des richesses étudiées, la température exprimée en fonction de Y_c est bijective. Seules les richesses comprises entre 1.2 et 1.4 s'écartent de cette observation à la fois dans les calculs de Fiorina (Fiorina et al., 2000) et ceux réalisés à Lewis différents de 1. La figure (c), est le test pour la variable de progrès $Y_c = Y_{CO_2} + Y_{CO} + Y_{H_2O}$. L'ajout de l'eau dans cette définition n'améliore pas les résultats.

Des résultats similaires sont retrouvés sur l'ensemble des fractions massiques des espèces chimiques. Les résultats pour les produits de combustion sont tracés sur les figures 1.19 dans le cas où $Y_c = Y_{CO_2} + Y_{CO}$.

Conclusion :

Plusieurs dénitions de la variable d'avancement ont été testées. L'objectif est de capturer le vecteur de concentration d'espèces chimiques et la température, lorsque la fraction de mélange, Z , et l'avancement de la réaction, c , sont fixés. A la lumière des résultats obtenus, la somme des fractions massiques de CO_2 et CO a été retenue, à la fois pour les

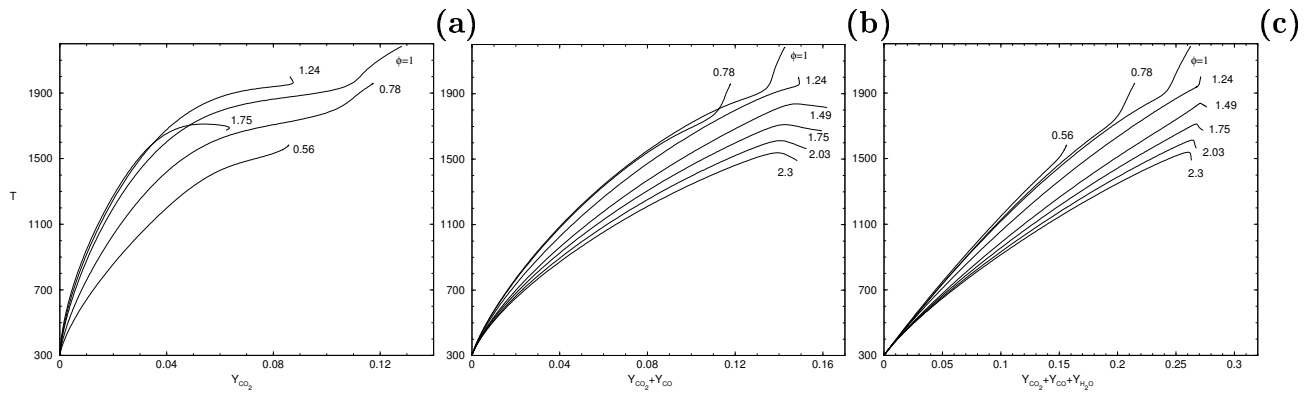


FIG. 1.18 – Température en fonction de la variable de progrès Y_c pour différentes richesses ϕ . (a) : $Y_c = Y_{CO_2}$, (b) : $Y_c = Y_{CO_2} + Y_{CO}$, (c) : $Y_c = Y_{CO_2} + Y_{CO} + Y_{H_2O}$

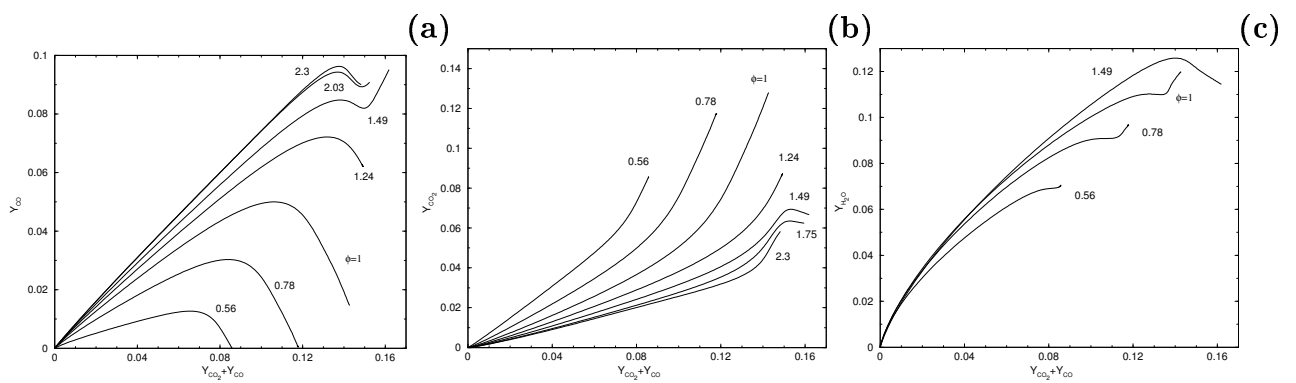


FIG. 1.19 – Fractions massiques des espèces chimiques en fonction de la variable de progrès $Y_c = Y_{CO_2} + Y_{CO}$ pour différentes richesses. (a) : Y_{CO} , (b) : Y_{CO_2} , (c) : Y_{H_2O} .

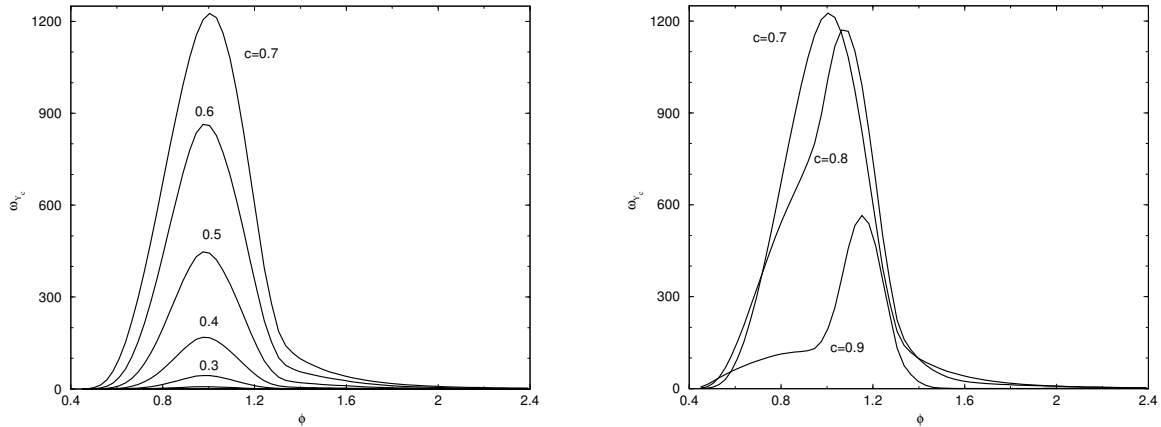


FIG. 1.20 – Termes sources chimiques $\dot{\omega}_{Y_c} = \dot{\omega}_{CO_2} + \dot{\omega}_{CO}$ (s^{-1}) des bibliothèques de flammes prémélangées en fonction de la richesse locale pour différents avancements de la réaction.

flammes prémélangées et non-prémélangées.

$$c = \frac{Y_C}{Y_C^{eq}} = \frac{Y_{CO} + Y_{CO_2}}{Y_{CO}^{eq} + Y_{CO_2}^{eq}} \quad (1.5)$$

$$(1.6)$$

Le taux de réaction de la variable de progrès Y_c est tracé dans les flammes prémélangées sur les figures 1.20 en fonction de la richesse locale et pour plusieurs niveaux d'avancement. Le maximum du taux de réaction est localisé à $c=0,7$ pour la combustion méthane / air et s'annule pour les richesses trop faibles ou fortes (au-delà des limites d'inflammabilité). Pour les avancements de la réaction c inférieurs à 0.7, les variations de $\dot{\omega}_{Y_c}$ sont quasi-linéaires avec c , quelle que soit la fraction de mélange. Pour les avancements supérieurs (figure de droite), la réaction est moins intense à la stœchiométrie pour un avancement fixé. Par exemple, $\dot{\omega}_{Y_c}$ est maximum pour les richesses voisines de 1.2 lorsque $c=0.9$.

Ces trois premiers sous-chapitres nous ont permis de présenter les résultats des calculs en chimie complexe des flammes laminares prémélangées et de diffusion. Les variables de contrôle de ces régimes ont été mises en évidence et une définition pour la fraction de mélange Z , et la variable d'avancement de la réaction c , a été déduite de cette analyse. Il reste à comparer l'évolution des espèces chimiques (réactifs, produits de combustion, polluants, ...) à travers le front de flamme dans ces deux régimes de combustion.

1.4 Différences entre les flammes laminaires prémélangées et de diffusion

Les particules fluides dans les régimes de combustion prémélangé et de diffusion n'ont pas la même historique et peuvent influencer les niveaux des variables chimiques à l'intérieur de la zone de réaction. Cette partie a pour objectifs de visualiser l'évolution des réactifs, des produits de combustion, des polluants (NO , CO) des hydrocarbures (CH_4 , CH_3 , CH_2 , CH) et de la température à travers le front de flamme dans ces deux configurations. Les résultats sont présentés dans l'espace physique et simultanément dans les deux régimes.

1.4.1 Les réactifs

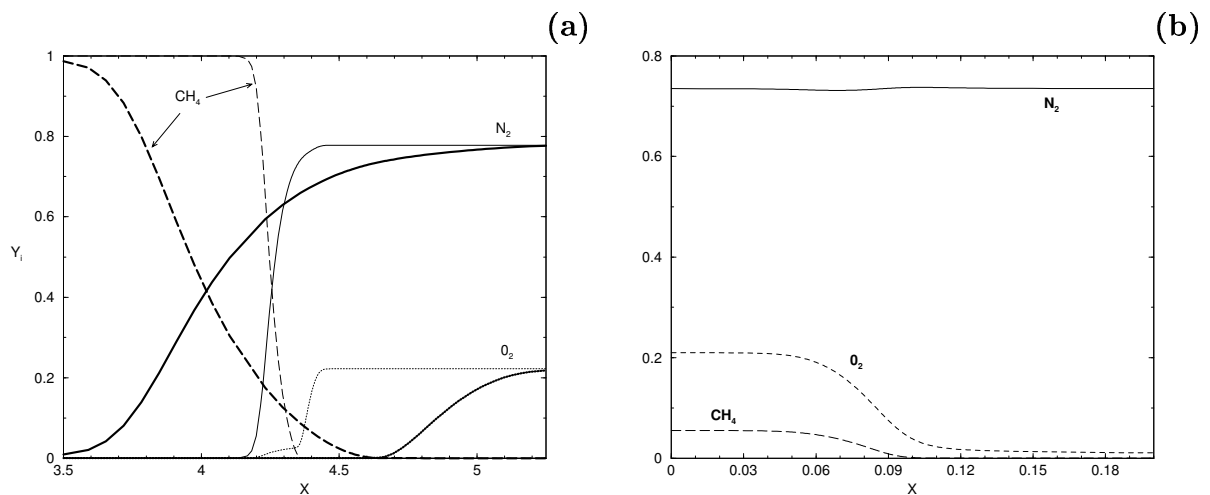


FIG. 1.21 – Fractions massiques des réactifs en fonction de la coordonnée x (en cm). Y_{CH_4} (longs pointillés), Y_{O_2} (pointillés) et Y_{N_2} (traits). (a) : Flammes à contre-courant, $a=6 \text{ s}^{-1}$ traits épais et 240 s^{-1} traits fins. (b) : Flamme prémélangée stœchiométrique.

L'évolution spatiale des fractions massiques des réactifs est présentée sur la figure 1.21 dans le cas des flammes de diffusion à contre-courant (figure a) et d'une flamme prémélangée stœchiométrique (figure b). Ces résultats montrent bien que l'évolution des fractions massiques des réactifs est propre au régime de combustion.

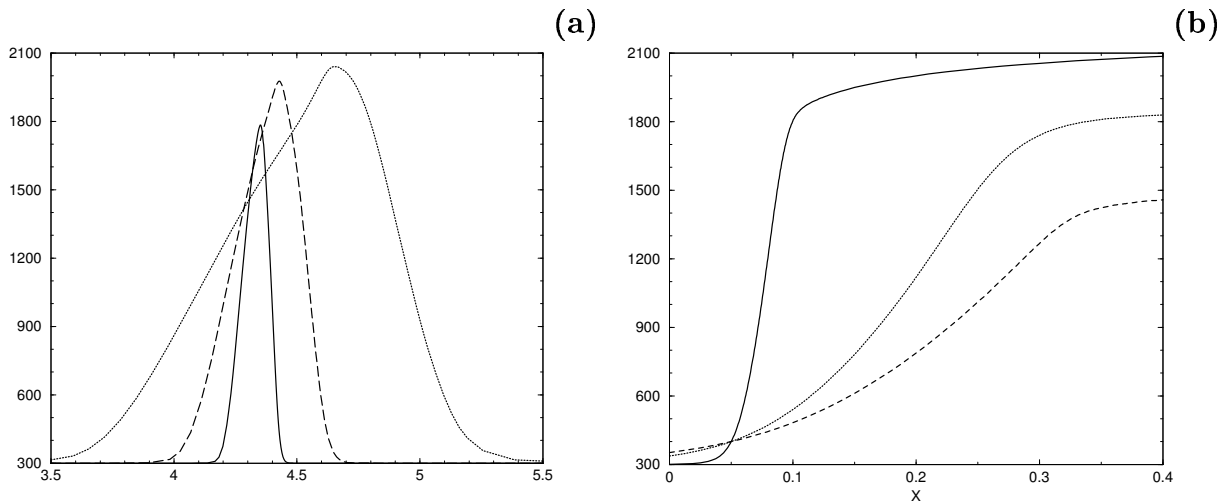


FIG. 1.22 – Température en fonction de la coordonnée x (cm). (a) : Flammes à contre-courant pour trois étirements moyens ($6, 90$ et 240 s^{-1}). (b) : Flammes prémélangées, trait plein : $\phi = 1$ longs pointillés : $\phi = 1.5$ pointillés : $\phi = 0.5$.

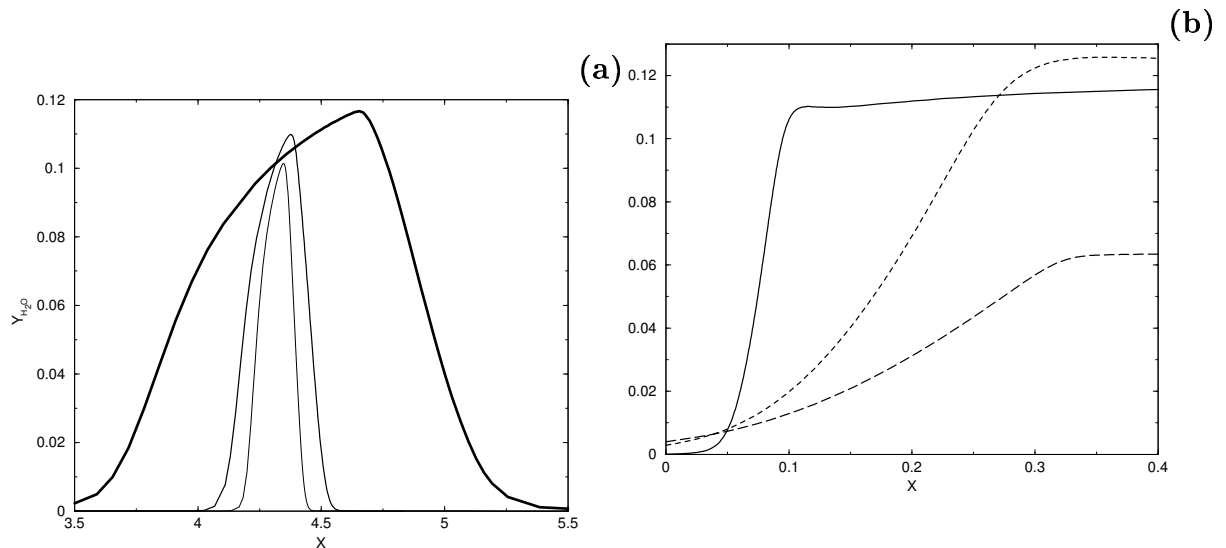


FIG. 1.23 – Fractions massiques de l'eau (a) : Flammes à contre-courant (6 s^{-1} traits épais 90 s^{-1} traits intermédiaires et 240 s^{-1} traits fins). (b) : Flammes prémélangées. trait plein : $\phi = 1$ longs pointillés : $\phi = 1.5$ pointillés : $\phi = 0.5$.

1.4.2 Les produits de combustion et la température

Les niveaux atteints par la fraction massique de l'eau, Y_{H_2O} (figure 1.23), et la température, T (figure 1.22), dans les deux régimes de combustion sont du même ordre de grandeur. Là encore, les conditions limites des flammes prémélangées et à contre-courant sont différentes avec pour conséquence des gradients différents dans les zones de réaction.

1.4.3 Les polluants

NO

La formation du monoxyde d'azote utilisée dans le schéma cinétique GRI (annexe 5, (Bowman et al., 1997)), comprend les mécanismes présentés sur la figure 1.24 (Soete, 1997) :

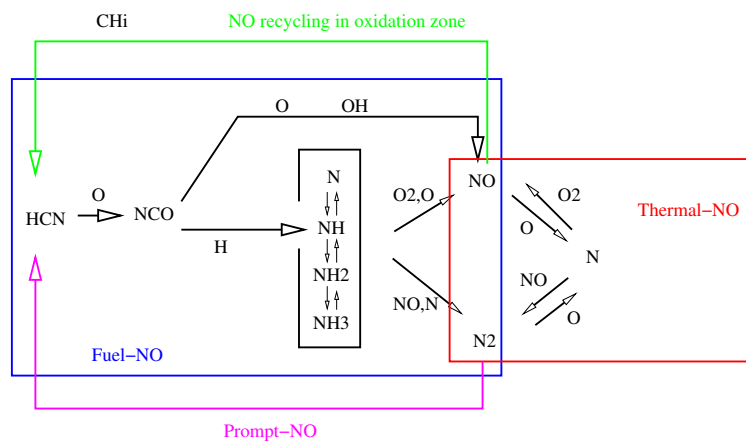
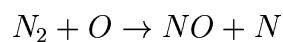


FIG. 1.24 – Mécanisme réactionnel de la formation de NO (Soete, 1997).

– Thermal-NO :

Le NO est majoritairement produit par ce mécanisme c'est-à-dire à partir des molécules d'azote. L'énergie d'activation de la réaction suivante est très grande ($E=38000$ K) ce qui rend la production de NO très sensible aux températures élevées.



De plus, les temps de formation (ms) par ce mécanisme sont supérieurs au temps de séjour dans le front de flamme.

Le NO est donc principalement formé dans les zones de produits de combustion ayant des temps de résidence suffisamment grands (par exemple dans les zones de recirculation).

– **Prompt-NO :**

La formation de NO par ce mécanisme est comme son nom l'indique une production rapide localisé dans le front de flamme ou sa proximité.

– **Fuel-NO :**

Elle est présente lorsque le combustible contient des atomes d'azote.

Dans les flammes à contre-courant, la fraction massique de NO est très sensible aux variations d'étirement (figure 1.25). Un rapport 100 est obtenu entre les maxima de Y_{NO} pour les étirement limites ($6 s^{-1}$ et $240 s^{-1}$). Ces résultats se retrouvent dans les flammes prémélangées pour lesquelles les variations importantes du NO sont essentiellement rencontrées pour des niveaux élevés de l'avancement. A noter, le maximum de fraction massique est similaire dans les flammes prémélangées et les flammes de diffusion.

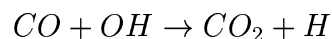
Cependant, en s'éloignant de la stœchiométrie, le NO des flammes de diffusion est nettement plus élevé que celui formé dans les flammes prémélangées.

La formation du monoxyde d'azote est très lente et difficile à obtenir dans les flammes prémélangées. En effet, la longueur nécessaire pour former le monoxyde d'azote à l'équilibre est de l'ordre d'une centaine de mètres. La variable d'avancement atteint son équilibre beaucoup plus rapidement que Y_{NO} et par conséquent les variations de NO lorsque $c \simeq 1$ ($T \simeq T^{eq}$) ne sont pas capturées (figure 1.26). On peut donc conclure que les tabulations proposées ne pourront capturer les NOx.

CO

Mécanisme de formation du CO

L'hydrocarbure est dans un premier temps oxydé et les produits H_2O et CO sont majoritairement formés. La deuxième étape dans le processus de formation du CO est son oxydation, principalement par la réaction :



Cette réaction est lente et elle est observée pour des fortes températures, avec une concentration importante du radical OH. Elle est donc située dans la zone pauvre de la flamme.

Ce processus chimique est observé à la fois dans les flammes prémélangées et de diffusion :

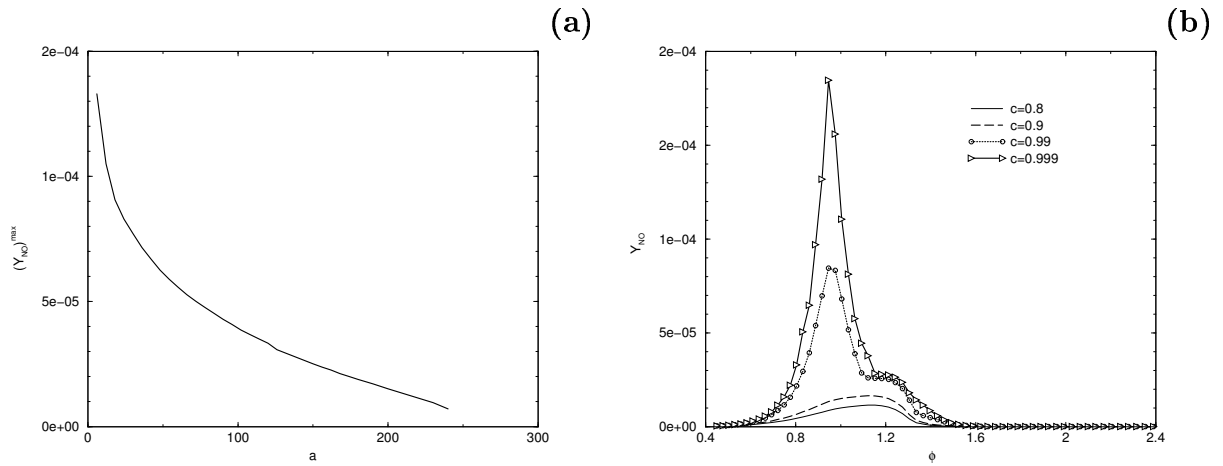


FIG. 1.25 – (a) : Fraction massique maximale de NO, Y_{NO}^{max} , atteinte dans les flammes à contre-courant en fonction de l'étirement moyen (s^{-1}). (b) : Fraction massique de NO en fonction de la richesse pour différentes valeurs de la variable d'avancement, des flammes prémélangées.

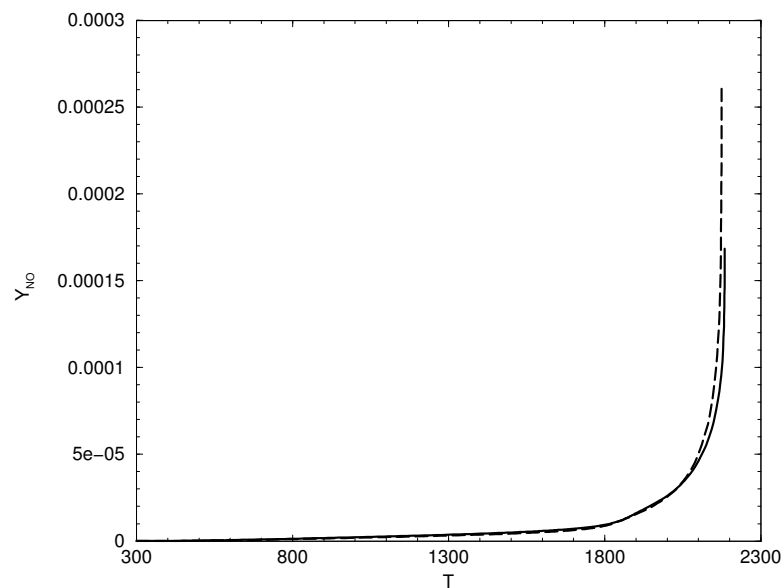


FIG. 1.26 – Fraction massique du monoxyde d'azote NO en fonction de la température dans les flammes prémélangées aux richesses 1 (trait) et 0.9 (pointillés)

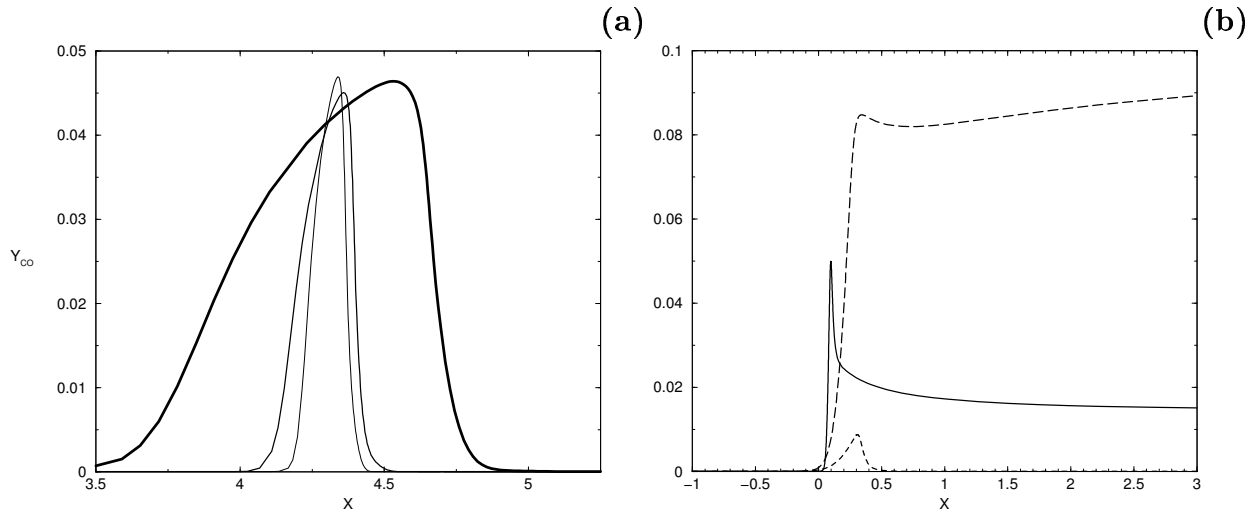


FIG. 1.27 – Fraction massique de CO en fonction de la coordonnée x (en cm) à travers les flammes laminaires. (a) : Flammes à contre-courant ($a=6 \text{ s}^{-1}$ traits épais, $a=90 \text{ s}^{-1}$ traits intermédiaires et $a=240 \text{ s}^{-1}$ traits fins). (b) : Flammes prémélangées ; trait plein : $\phi = 1$, longs pointillés : $\phi = 1.5$, pointillés : $\phi = 0.5$.

- Pour les mélanges pauvres, le CO est produit à la base de la flamme prémélangée, puis oxydé lorsque la température est plus importante (figure 1.27 b).
- Les réactions lentes sont mises en évidence dans les flammes prémélangées riches par une évolution de la concentration de CO loin derrière le front de flamme.
- Le CO atteint son maximum pour les fractions de mélange voisines de 0,5 ($\phi = 17$) dans les flammes de diffusion. Ce niveau de mélange ne peut être atteint dans les flammes prémélangées car la limite d’inflammabilité riche est de l’ordre de $Z=0.12$ ($\phi = 2.3$). La fraction massique de CO ne peut donc pas être estimée linéaire au-delà des limites d’inflammabilité comme la majorité des espèces chimiques et la méthode FPI ne peut pas prédire cette fraction massique dans la zone riche.

Bien que les limites d’inflammabilité n’excèdent pas les richesses $\phi = 2.3$ dans cette configuration, les niveaux atteints du CO dans les flammes prémélangées sont nettement plus élevés que dans les flammes de diffusion. Un rapport 2 est observé dans les zones riches.

De plus, un sur équilibre important est observé pour des mélanges proches ou infé-

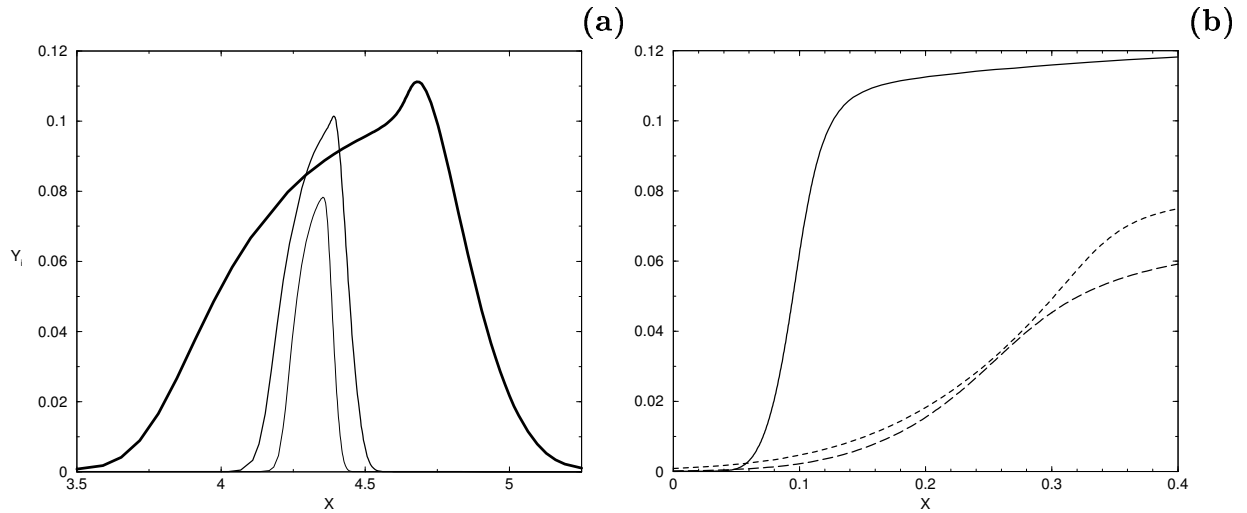


FIG. 1.28 – Fraction massique du CO_2 en fonction de la coordonnée x (en cm) à travers les flammes laminaires. (a) Flammes à contre-courant; $a=6\text{ s}^{-1}$ traits épais, $a=90\text{ s}^{-1}$ traits intermédiaires et $a=240\text{ s}^{-1}$ traits fins. (b) Flammes prémélangées; trait plein : $\phi = 1$ long pointillés : $\phi = 1.5$ pointillés : $\phi = 0.5$.

rieurs à la stœchiométrie (figure 1.27 b) : comportement qui ne peut pas être capturé par les flammes de diffusion limitées par l’extinction ($c > c_q$).

CO_2

La formation du CO_2 est fortement liée à celle du CO . Cependant, les différences entre les deux régimes de combustion sont moins marquées. Le CO_2 reste légèrement plus élevé dans les flammes de prémélange (figure 1.28 b) que dans les flammes de diffusion (figure 1.28 a).

Hydrocarbures

L’hydrocarbure initial, ici le CH_4 , perd successivement ses atomes d’hydrogène en se rapprochant de la zone de réaction. Ainsi, quelque soit le régime de combustion, le méthane est tout d’abord décomposé en CH_3 puis en CH_2 et enfin en CH proche de la zone de réaction (figures 1.29 a et b). Les fractions massiques des espèces chimiques sont tracées en fonction de la coordonnée x (en cm) dans un graphique linéaire-logarithmique.

En tous points de la flamme et pour les deux régimes de combustion on retrouve :

$$Y_{CH_4} > Y_{CH_3} > Y_{CH_2} > Y_{CH}$$

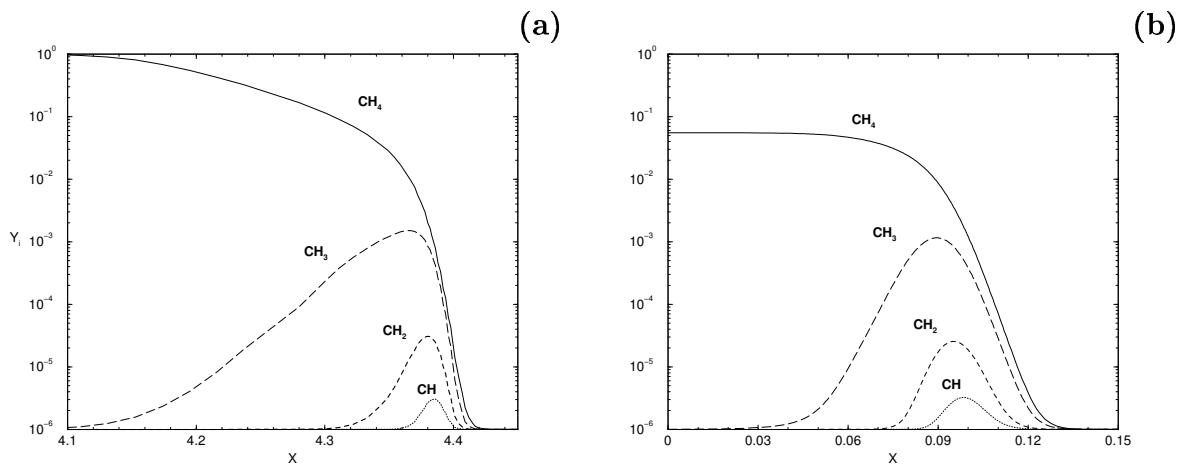


FIG. 1.29 – Fractions massiques des espèces chimiques issues de la décomposition du méthane en fonction de la coordonnée (en cm), échelle linéaire-logarithmique. Y_{CH_4} (trait plein), Y_{CH_3} (longs pointillés), Y_{CH_2} (pointillés), Y_{CH} (petits pointillés). (a) Dans une flamme à contre-courant; l'étirement moyen est de 90 s^{-1} . (b) : dans une flamme prémélangée stœchiométrique.

Conclusion

Les différences entre les régimes de combustion prémélangé et de diffusion non-prémélangé ne sont pas fortement marquées pour la majorité des paramètres étudiés (température, Y_{H_2O} , Y_{CO_2} , hydrocarbures issus de la décomposition du méthane). Le choix de la méthode de tabulation semble alors indifférent pour ces paramètres. Une tabulation utilisant des flammes de prémélange, qui apporte des informations supplémentaires lorsque l'avancement de la réaction est faible, est alors privilégiée. En effet, dans la mesure où, pour ces niveaux d'avancement, les flammes à contre-courant sont éteintes, les flammes prémélangées sont une alternative appropriée.

Cependant, certaines espèces chimiques à cinétique lente, telles que le monoxyde d'azote (NO) et le monoxyde de carbone (CO), ont une évolution propre au régime de combustion. Pour capturer ces polluants, le choix des méthodes de tabulation est crucial.

1.5 Conclusion

En conclusion de ce chapitre, les points suivants seront retenus :

- La définition judicieuse de la fraction de mélange et d'une variable d'avancement permet de caractériser tous les états chimiques des flammes de prémélange (dans cette étude, non étirées) et de diffusion à contre courant.
- Les niveaux de concentration des espèces majoritaires observés dans les flammes de diffusion sont accessibles via la réponse des flammes de prémélange, pour la même richesse et le même avancement.
- La flamme de diffusion est très rapidement éteinte quand l'étirement est augmenté. Les flammes de diffusion ne pourront donc pas être utilisées pour la tabulation de la chimie quand l'avancement est faible.
- La tabulation du CO implique un traitement particulier, car sa réponse dans une flamme de diffusion est très différente de celle observée dans une flamme de prémélange.

Ces résultats, plus qualitatifs que quantitatifs, ne suffisent pas à déterminer clairement si le choix de la méthode de tabulation est primordial dans la modélisation de la combustion turbulente. Nous allons maintenant procéder à une étude systématique, qui consiste à mesurer les possibilités de prédiction de la structure des flammes de diffusion à partir d'une tabulation prémélangée.

Chapitre 2

Flammes prémélangées utilisées pour tabuler les flammes de diffusion

L'objectif de cette partie est de quantifier la possibilité de prolonger les méthodes FPI (Gicquel, 1999) et FGM (van Oijen et al., 2001a) (tabulation à partir de flammes de prémélange) vers les flammes non-prémélangées. En particulier, les résultats des flammes laminaires à contre-courant vont être comparés à la tabulation des flammes prémélangées laminaires.

Trois cas tests sont réalisés :

- Hydrogène / air avec $Le = 1$. La chimie détaillée est simplifiée par l'utilisation de l'hydrogène comme combustible (19 espèces et 68 réactions élémentaires réversibles, annexe 5). La diffusion des espèces chimiques est supposée constante et égale à la diffusion thermique.
- Méthane / air avec $Le=1$. On augmente la difficulté en utilisant un hydrocarbure comme combustible (49 espèces et 279 réactions, annexe 5).
- Méthane / air avec multi-diffusion des espèces chimiques. La totalité des phénomènes physiques en jeu, sauf le rayonnement, est alors pris en compte.

2.1 Méthode de comparaison

Les fractions massiques des espèces chimiques, la température et les taux de réaction en un point d'une flamme de diffusion laminaire, donc pour un couple de valeurs (richesse, Z^* et l'étirement) ou (richesse, Z^* et avancement de la réaction), sont comparés à l'ensemble des points d'une flamme de prémélange laminaire à la même richesse, Z^* . On note "a" le taux d'étirement moyen dans la flamme de diffusion à contre courant. Si U est la vitesse initiale du combustible égale à celle du comburant, et L la distance entre ces deux injections, alors $a = \frac{2U}{L}$ (s^{-1}).

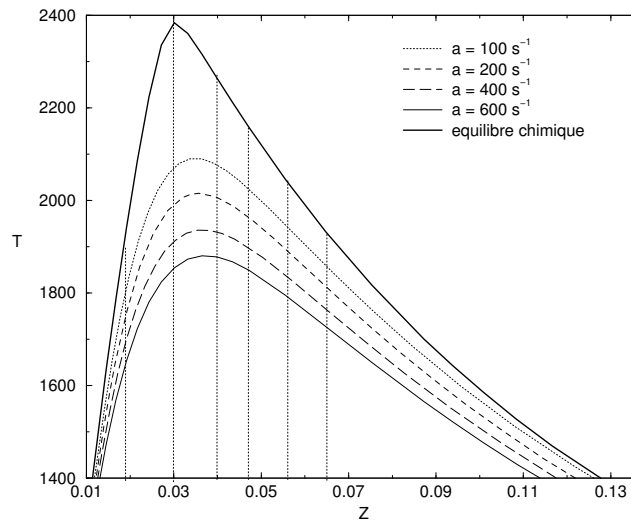


FIG. 2.1 – Température (K) en fonction de la fraction de mélange Z pour différents étirements d'une flamme laminaire à contre-courant H_2 /air ($Le=1$). Les pointillés marquent la richesse des flammes prémélangées calculées.

La figure 2.1 (température en fonction de la fraction de mélange) résume les calculs réalisés dans le cas H_2 /air ($Le = Sch = 1$). Six richesses, comprises dans le domaine d'inflammabilité, sont utilisées pour comparer une flamme laminaire à contre-courant aux 6 flammes prémélangées. Cette étude est réalisée sur 5 flammes de diffusion à contre-courant en variant l'étirement moyen (voir figure 2.1).

Deux formalismes sont adoptés :

- $Y_i^P(Z^*; x_P)$ est la fraction massique de l'espèce i à travers une flamme prémélangée (P) à la richesse $\phi = \frac{Z^*}{1-Z^*} \frac{1-Z_{st}}{Z_{st}}$. x_P étant la position à travers la flamme prémélangée non étirée.
- $Y_i^d(Z^*, a^*)$ est la fraction massique de l'espèce i à travers une flamme de diffusion à contre-courant soumise au taux d'étirement moyen, a^* . Z^* est la fraction de mélange qui permet de localiser le point à travers la flamme.

Le pourcentage d'écart relatif entre les fractions massiques d'une flamme de diffusion et de prémélange en chacune des positions de la flamme prémélangée a pour expression :

$$E_i(Z^*, a^*; x_P) = \frac{Y_i^P(Z^*; x_P) - Y_i^d(Z^*, a^*)}{Y_i^d(Z^*, a^*)} * 100$$

E_i tend vers 0, cela signifie que le point x_P de la flamme de prémélange représente

parfaitement le point (Z^*, a^*) de la flamme de diffusion. Ces écarts relatifs sont tracés sur un même graphe en fonction de la position x_p de la flamme de prémélange (voir figure 2.2; $Z = Z_{st}$ et $a = 400s^{-1}$). Si l'écart est minimum pour toutes les espèces chimiques et la température, c'est-à-dire si les écarts E^i , fonctions de x_p se croisent toutes en 0 et en un seul point x_p^* , alors une variable d'avancement globale (représentative de toute la chimie) pourra être définie. Dans ces calculs, on peut déterminer une variable d'avancement en fonction de la fraction massique de l'eau.

Si toutes ces espèces et la température sont identiques dans les flammes de diffusion et prémélangées, alors les taux de réaction sont automatiquement déterminés :

$$\left. \begin{array}{l} \phi_i^P(Z, c) = \phi_i^D(Z, \chi_Z) \\ T^P(Z, c) = T^D(Z, \chi_Z) \end{array} \right\} \dot{\omega}_i^P(Z, c) = \dot{\omega}_i^D(Z, \chi_Z)$$

2.2 Dihydrogène/air (Le=1)

Les résultats obtenus pour un étirement de $400 s^{-1}$, et pour une richesse $Z = Z_{st} = 0.03$ sont présentés sur la figure 2.2. Le pourcentage d'écart entre la flamme de diffusion et la flamme de prémélange dans ces conditions est inférieur à 1 % pour la température et le produit de combustion (H_2O). Bien que les réactifs soient en faible quantité (à la stœchiométrie), l'écart reste négligeable (7 %). Les radicaux libres, espèces minoritaires, sont également bien calculés par les flammes prémélangées à 7 % près.

Il n'existe qu'une seule exception pour la fraction massique du monoxyde d'azote (Y_{NO}). Le pourcentage d'écart calculé dépasse les 30 % alors que les conditions sont favorables (richesse 1 et par conséquent fraction massique de NO maximale). Comme discuté précédemment, ce résultat était attendu en raison des cinétiques lentes pour la formation du NO.

Les résultats du côté riche ou pauvre de la flamme de diffusion sont similaires (voir figure 2.3 pour un étirement moyen de $400 s^{-1}$). Il en est de même sur l'ensemble des étirements moyens utilisés pour le calcul des flammes à contre-courant ($a = 100, 200, 400$ et $600 s^{-1}$).

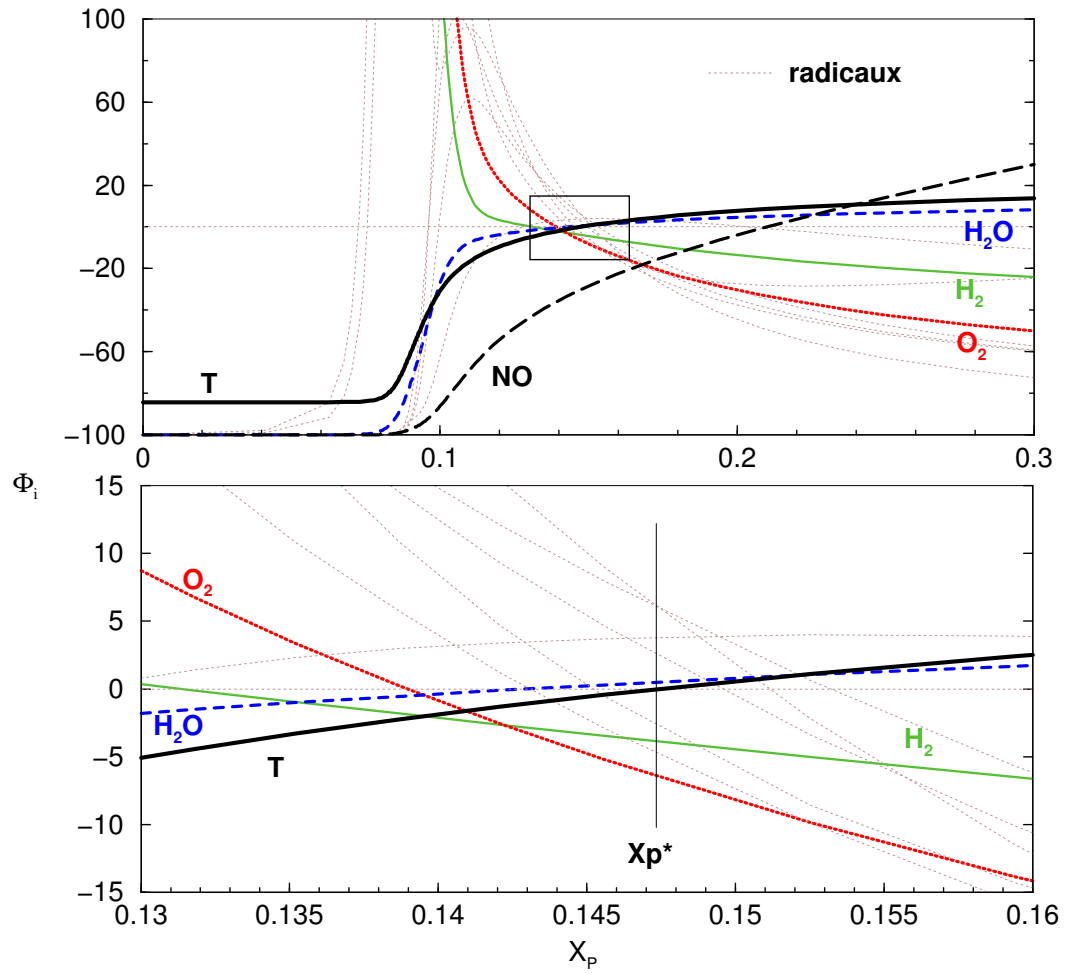


FIG. 2.2 – Le pourcentage d'écart E_i entre un point d'une flamme de diffusion ($a = 400\text{s}^{-1}$, $Z=0.03$) et une flamme de prémélange en fonction de la position (en cm) de la flamme prémélangée ($Z=0.03$).

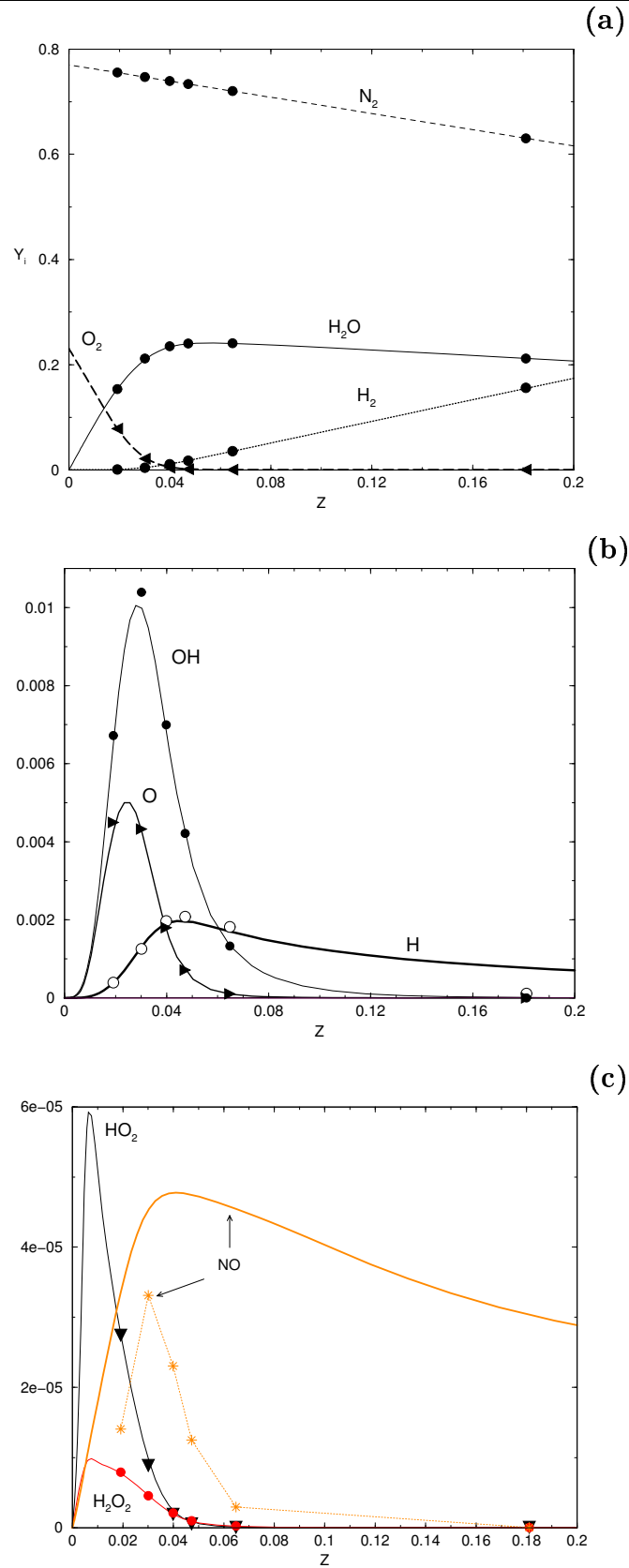


FIG. 2.3 – Fractions massiques des espèces chimiques en fonction de la fraction de mélange, d'une flamme de diffusion laminaire à contre-courant H_2 /air, $a=400 \text{ s}^{-1}$ (traits). Grandeurs tabulées à partir des flammes de prémélange (symboles). Les conditions de calculs sont : $Le=1$ et $Sc=1$. (a) : espèces majoritaires. (b) : espèces radicalaires. (c) : espèces minoritaires.

2.3 Méthane/air (Le=1)

Dans ces calculs, le combustible est remplacé par du méthane. La fraction de mélange à la stœchiométrie est $Z_{st} = 0.055$. Le nombre de Lewis et le nombre de Schmidt sont toujours égaux et fixés à l'unité.

Les résultats à la stœchiométrie (cas favorable) montrent que l'écart entre la tabulation FPI et les flammes de diffusion à contre-courant ne dépassent pas les 15 % sur les fractions massiques et la température. Cependant, on voit apparaître deux points de rencontre distincts : l'un regroupant les réactifs et les radicaux, l'autre regroupant les produits de combustion et la température. Par conséquent, les fractions massiques des espèces chimiques d'une flamme de diffusion peuvent être calculées par des flammes prémélangées en augmentant le nombre de variable d'avancement (l'une calée sur les produits, l'autre sur les réactifs). Cette nécessité d'augmenter le nombre de paramètres de contrôle a déjà été observée par d'autres méthodes de tabulation (ILDm).

Les résultats obtenus avec deux variables d'avancement sont tracés dans l'espace de la fraction de mélange pour un étirement de 200 s^{-1} (figure 2.4).

On observe sur la figure a que les pourcentages d'écarts sur les fractions massiques des espèces majoritaires (CO_2 , CO et O_2) augmentent pour les mélanges riches ($Z > 0.065$). Les écarts des espèces radicalaires augmentent de chaque côté de la stœchiométrie (figure b).

Cependant, le fait qu'il soit impossible de représenter la chimie d'une flamme de diffusion par un seul point de la flamme prémélangée entraîne une discordance pour les termes sources chimiques (figure 2.5). En effet, si :

$$\begin{cases} Y_i^D(x_D) \neq Y_i^P(x_P) \text{ pour } i = 1, N_{esp} \\ T^D(x_D) \neq T^P(x_P) \end{cases}$$

Alors,

$$\dot{\omega}_k^D \begin{pmatrix} Y_i^D(i = 1, N_{esp}) \\ T^D \\ x_D \end{pmatrix} \neq \dot{\omega}_k^P \begin{pmatrix} Y_i^P(i = 1, N_{esp}) \\ T^P \\ x_P \end{pmatrix}$$

Avec N_{esp} , le nombre total d'espèces chimiques, l'indice D pour diffusion et l'indice P pour prémélange.

Ceci montre qu'une étude supplémentaire est nécessaire en prenant en compte les effets de diffusion différentielle et en définissant qu'une seule variable d'avancement.

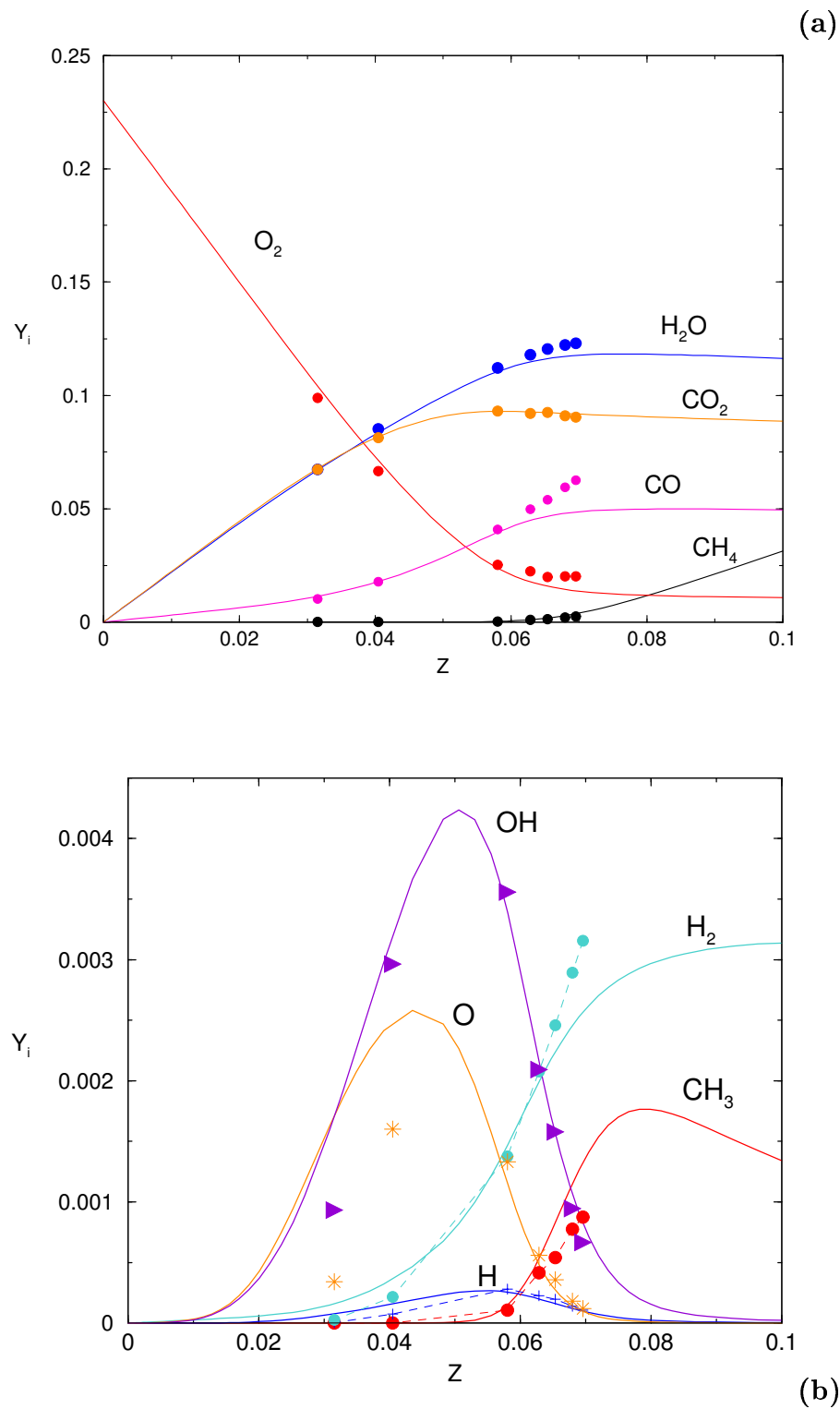


FIG. 2.4 – Fractions massiques des espèces chimiques en fonction de la fraction de mélange, d'une flamme de diffusion laminaire à contre-courant CH_4/air , $a=200 \text{ s}^{-1}$ (trait plein). Tabulation FPI (flammes prémélangées) (symboles). (a) espèces majoritaires, (b) espèces minoritaires

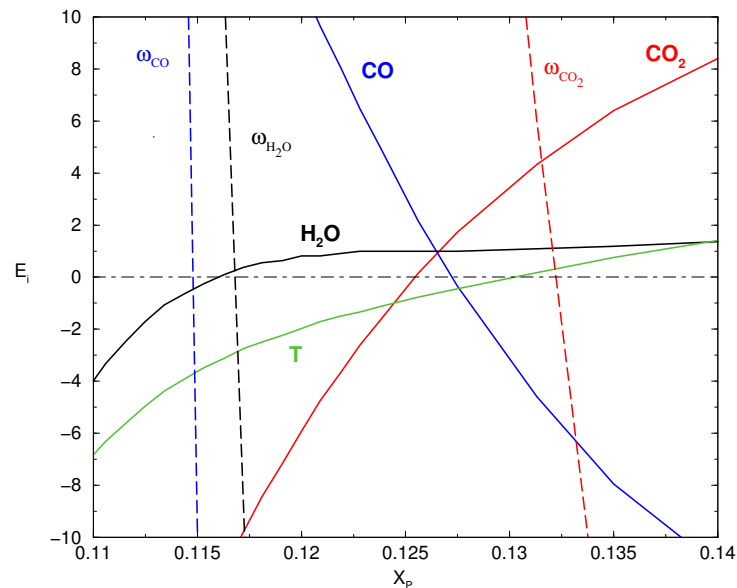


FIG. 2.5 – Pourcentage d'écart sur les produits de combustion et leur termes sources chimiques en fonction de la position de la flamme prémélangée (en cm) (la configuration est : $a = 160s^{-1}$, $Z = Z_{st}$).

2.4 Méthane/air ($Le \neq 1$)

La méthode FPI est maintenant testée sur les flammes à contre-courant, dans le cas d'une combustion d'hydrocarbures (méthane /air) avec la diffusion différentielle des espèces chimiques. En vue des résultats précédents, une seule variable d'avancement de la réaction est choisie afin de reproduire les flammes laminaires de diffusion.

$$c = \frac{Y_{CO_2} + Y_{CO}}{Y_{CO_2}^{eq} + Y_{CO}^{eq}}$$

- A la stœchiométrie, la méthode de tabulation des flammes prémélangées permet de prédire qualitativement et quantitativement les produits de combustion et la température des flammes de diffusion laminaires à contre-courant (voir figure 2.6). Les résultats sont tracés en fonction de la variable de progrès $Y_c = Y_{CO_2} + Y_{CO}$. La méthode va jusqu'à prédire avec des différences acceptables la fraction massique de NO.
- Dans la zone riche de la flamme, le CO est 2 fois plus fort dans les flammes prémélangées que dans les flammes de diffusion (figure 2.7 b ; Les variables sont tracées en fonction de la fraction mélange. L'étirement moyen est de $200 s^{-1}$). Ces résultats rejoignent les observations des flammes laminaires du premier chapitre.

- Bien qu’il existe un fort couplage entre les fractions massiques de CO et OH, une bonne prédiction d’une de ces variables n’implique pas systématiquement la bonne estimation de l’autre. En effet, la méthode FPI surestime OH pour les fractions de mélange comprises entre 0.045 et 0.075 (figure 2.7 d), alors que la fraction massique de CO est sous-estimée entre 0.045 et 0.06 puis surestimée (figure 2.7 b).
- La fraction massique de NO est, comme dans les flammes hydrogène / air, difficile à capturer par la tabulation FPI (figure 2.7 d).

En s’éloignant de la condition de mélange stœchiométrique, les résultats sont nettement moins précis. Les flux à travers les iso-surfaces de fraction de mélange deviennent prépondérants devant la réaction (figure 2.7).

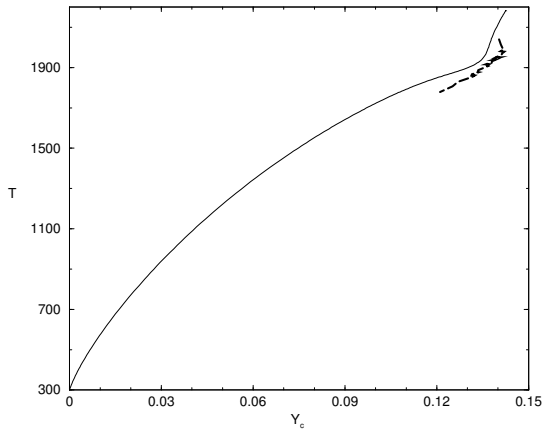
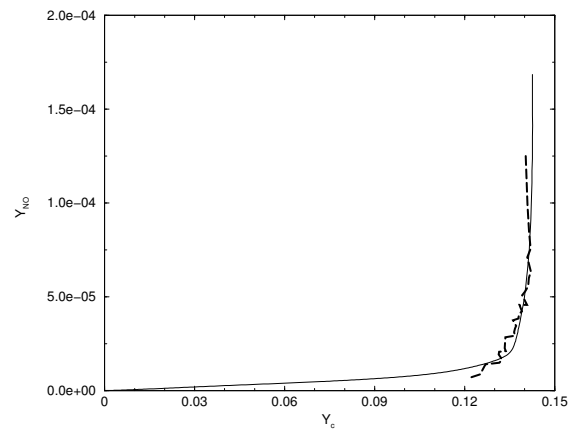
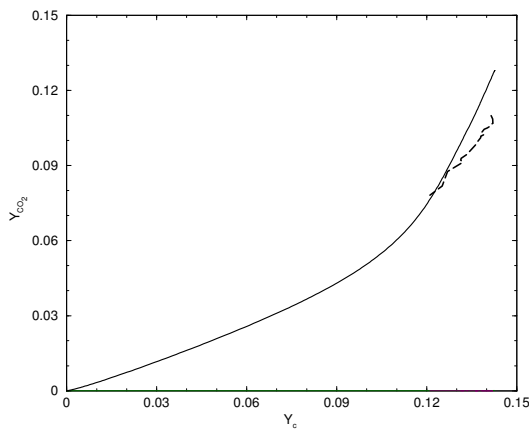
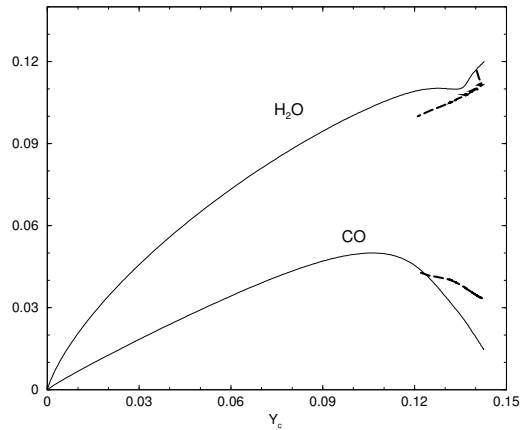
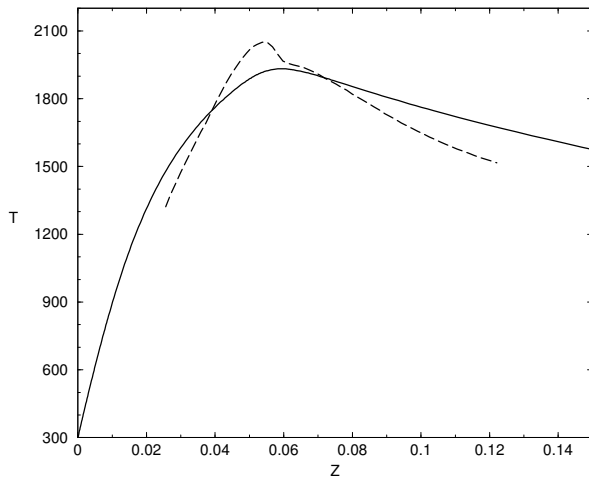
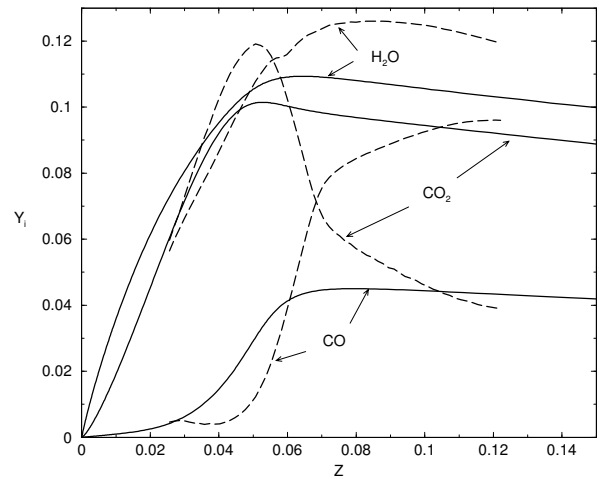
(a) *Température (K)*(b) *Fraction massique de NO*(c) *Fraction massique du CO₂*(d) *Fractions massiques du CO et H₂O*

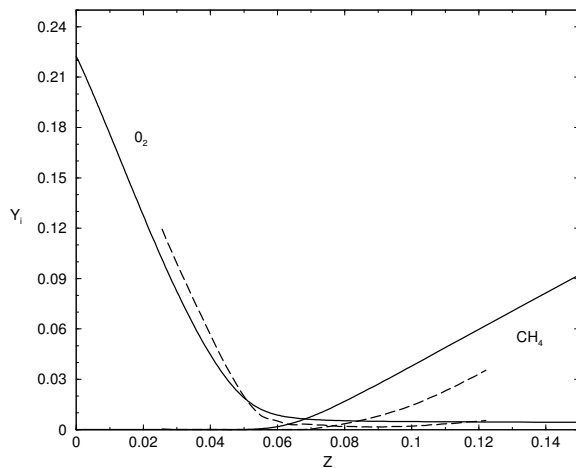
FIG. 2.6 – *Température et fractions massiques des espèces chimiques (NO, CO₂, CO, H₂O) en fonction de la variable de progrès Y_c . $\phi = 1$. Trait plein : une flamme prémélangée, pointillés : collection de flammes de diffusion.*



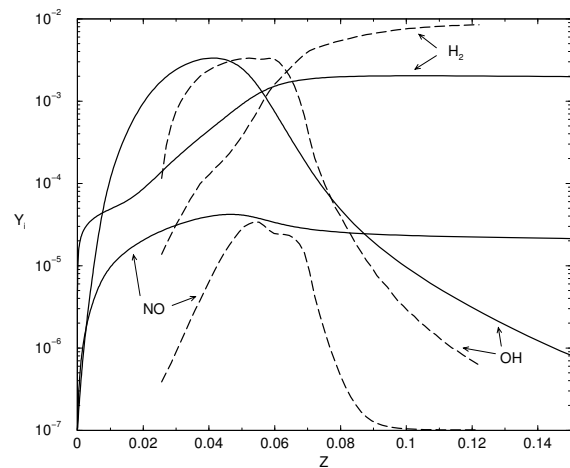
(a) Température (K)



(b) Produits de combustion



(c) Réactifs



(d) Espèces intermédiaires (log)

FIG. 2.7 – Application de la méthode FPI (pointillés) à une flamme de diffusion laminaire, $a=200 \text{ s}^{-1}$ (traits pleins) dans le cas d'une combustion méthane / air avec la diffusion différentielle des espèces chimiques. Température et fractions massiques des espèces chimiques en fonction de la fraction de mélange.

Conclusion

L'extension des méthodes de tabulation à partir de flammes laminaires prémélangées (FPI, FGM) à la combustion non-prémélangée a été étudiée. Nous avons tenté de reproduire des flammes de diffusion à contre-courant à partir de flammes prémélangées.

- Les premiers résultats sur une cinétique chimique complexe hydrogène / air avec des coefficients de diffusion égaux à la diffusion thermique ($Le = Sch = 1$), ont montré qu'il est possible d'envisager une telle méthode. Seul le monoxyde d'azote (NO) n'est pas correctement reproduit.
- Pour la combustion du méthane ($Le = Sch = 1$), de bons résultats sont observés proches de la stœchiométrie sur l'ensemble des espèces chimiques. En revanche, en s'éloignant de ce mélange, la prédiction des espèces chimiques par la méthode FPI nécessite d'augmenter le nombre de variables d'avancement. On retrouve un comportement déjà observé par la tabulation ILDM.
- Lorsque la diffusion différentielle est prise en compte, seules les tendances dans l'espace de la fraction de mélange sont respectées, ainsi que les niveaux à la stœchiométrie. Dans les régions pauvre et riche, les radicaux ne sont plus produits dans les mêmes proportions pour les flammes de diffusion et de prémélange et sont donc souvent mal capturés.

Ces résultats sont à pondérer par le fait qu'il s'agit de tests laminaires ne permettant pas de statuer complètement sur la validité de la méthode FPI (Flame Prolongation of ILDM) ou FGM (Flame Generated Manifold) pour la combustion turbulente non-prémélangée.

Les foyers aéronautiques comme la plupart des chambres de combustion industrielles ne brûlent pas dans un régime de diffusion ou de prémélange pur. Les phénomènes de prémélange partiel sont omniprésents. Leurs influences sur les résultats des flammes laminaires sont maintenant détaillées.

Chapitre 3

Analyse de la structure interne des flammes partiellement prémélangées

Les flammes de diffusion laminaires sont couramment utilisées pour modéliser la cinétique chimique complexe en combustion turbulente (Peters, 2000). D'autres auteurs utilisent la méthode de tabulation à partir des flammes prémélangées (Bradley et al., 1990). Ces deux méthodes sont parfois utilisées au-delà de leurs limites de validité, c'est-à-dire dans les chambres de combustion complexes où le prémélange partiel riche est dominant.

Il existe deux types de prémélange :

- **La dilution par les produits de combustion.**

Les réactifs sont mélangés aux produits de combustion à l'échelle moléculaire avant de réagir. Ce type de combustion est présente dans les enceintes fermées avec recirculation des gaz brûlés (foyers aéronautiques, fours industriels).

- **Le prémélange partiel froid.**

Les réactifs se mettent en contact avant de réagir. Ce type de combustion est par exemple rencontré dans les flammes jets liftées (Muniz and Mungal, 1997).

Des flammes de diffusion à contre-courant partiellement prémélangées ont été calculées dans le but de quantifier l'influence du prémélange dans les flammes de diffusion. L'aspect chimique de ces flammes est maintenant détaillé.

3.1 Configuration

Les conditions limites (côtés combustible et comburant) dans les modèles de flammelettes de diffusion (Peters, 2000) sont remplacées par différents mélanges d'espèces

chimiques (combustible, comburant, produits et radicaux). Afin d'avoir des mélanges cohérents (susceptible de se produire), la condition limite est alors calculée par des flammes prémélangées laminaires, pour une richesse et un niveau d'avancement fixés.

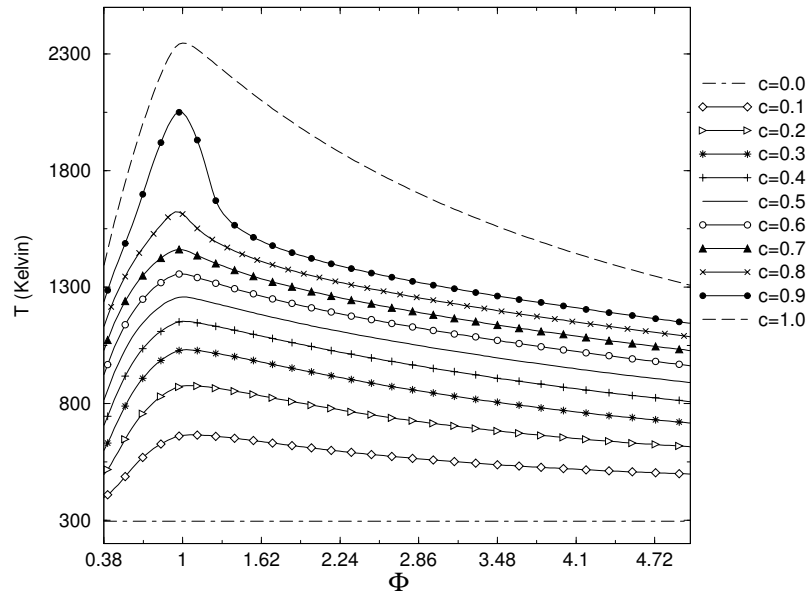


FIG. 3.1 – Température (en K) en fonction de la richesse locale Φ pour différents avancements de la réaction pour la combustion $H_2/He/air$ (Barlow and Frank, 2003a) (méthodes FPI, FGM).

- La première étape consiste à calculer ces flammes prémélangées pour toutes les richesses dans les limites d'inflammabilité. Elles constituent les conditions initiales des flammes de diffusion (fractions massiques de toutes les espèces chimiques et température). Ces mélanges sont définis avec la fraction de mélange Z et la variable d'avancement c (voir figure 3.1).
- La deuxième étape est le calcul des flammes de diffusion laminaires partiellement prémélangées.

L'analyse présentée ici correspond à la combustion dihydrogène/hélium/air et méthane / air avec la prise en compte de la diffusion différentielle. La cinétique chimique est identique aux flammes précédemment calculées (GRI_{mech} II). Les codes de calculs sont PREMIX (Lutz et al., 2000) pour les flammes prémélangées et OPPDIF (Lutz et al., 1997) pour les flammes de diffusion.

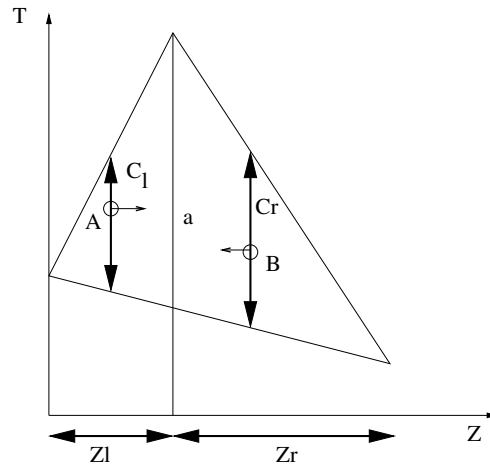


FIG. 3.2 – Température en fonction de Z . Définitions des prémélanges.

- Les conditions de calculs des flammes méthane / air sont identiques au chapitre 1.
- Pour la combustion hydrogène / hélium / air, la définition de la variable d'avancement est :

$$c = \frac{Y_{H_2O}}{Y_{H_2O}^{eq}}$$

Les conditions initiales des flammes prémélangées sont :

$$Y_{H_2}(Z) = Y_{H_2,o} * Z$$

$$Y_{He}(Z) = Y_{He,o} * Z$$

$$Y_{O_2}(Z) = Y_{O_2,o} * (1 - Z)$$

$$Y_{N_2}(Z) = Y_{N_2,o} * (1 - Z)$$

$$Y_{H_2O}(Z) = Y_{H_2O,o} * (1 - Z) \text{ (Taux d'humidité dans l'air)}$$

Avec $Y_{H_2,o} = 0.818$, $Y_{He,o} = 0.182$, $Y_{O_2,o} = 0.231$, $Y_{N_2,o} = 0.7608$ et $Y_{H_2O,o} = 8.210^{-3}$. La stœchiométrie est $Z = 0.036$. La première flamme prémélangée calculée a une richesse de $\Phi = 0.38$ et la dernière $\Phi = 6.7$. Le pas en Z pour les conditions initiales des flammes prémélangées est $\Delta Z = 0.001$.

Les conditions générales de cette combustion sont sur le site de SANDIA (Barlow and Frank, 2003a).

Les paramètres de contrôle des flammes de diffusion (voir figure 3.2) sont les fractions massiques des espèces chimiques en conditions limites, l'étiement moyen a , et la température de mélange. Les variables définissant ces conditions sont :

- $0 < Z_l < Z_{st}$ et $0 < c_l < 1$ du côté pauvre (point A),
- $Z_{st} < Z_r < 1$ et $0 < c_r < 1$ du côté riche (point B),
- a , l'étiement moyen.

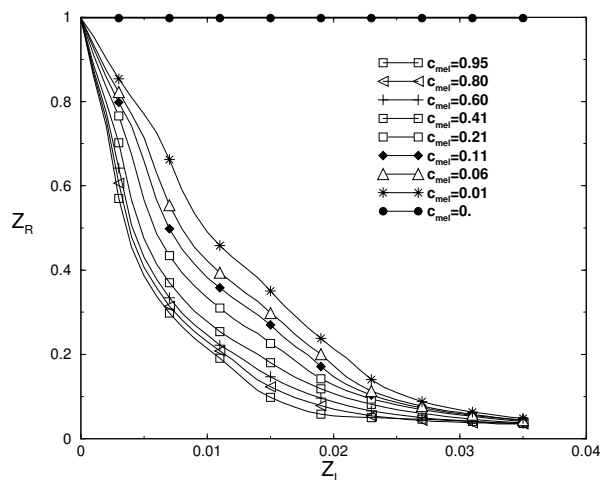


FIG. 3.3 – Correspondance entre la fraction de mélange Z_l et Z_R en fonction de l'avancement de la réaction du mélange c_{mel} . (Graphique réalisé à partir de la table FPI de la combustion $H_2/He/air$.)

Avec Z_l et Z_r les fractions de mélange correspondant aux mélanges pauvre et riche de la flamme de diffusion partiellement prémélangée. c_l et c_r sont les avancements de ces mélanges des côtés pauvre et riche respectivement. Ils sont notés dans le cas général, c_{mel} . Ils ne correspondent pas à l'avancement d'une flamme de diffusion.

$$\begin{cases} c_{mel} = 1 & \text{mélange de produit de combustion} \\ c_{mel} = 0 & \text{mélange à froid} \end{cases}$$

Le nombre de variable (Z_L, Z_R, c_l, c_r) qui permet de définir les mélanges d'une flamme à contre-courant est limité à deux paramètres pour faciliter l'étude des flammes partiellement prémélangées :

- Dû au brassage turbulent, le prémélange est supposé se produire à un avancement c_{mel}^* constant, identique de chaque côté de la zone de réaction. Les espèces et la température dans la zone prémélangée sont donc déterminées par une flamme prémélangée à un avancement $c_{mel}^* = c_l = c_r$.
- L'allumage se produit à la même température $T^*(Z_l, c_{mel}^*)$, du côté riche comme du côté pauvre de la flamme. La richesse locale Z_r est déterminée telle que :

$$T(Z_r) = T(Z_l) \text{ et } Z_r > Z_{st} \quad (3.1)$$

Ces 2 hypothèses ainsi formulées conduisent à une relation directe entre Z_r et Z_l (figure 3.3). Lorsque Z_l est proche de la stœchiométrie, Z_r l'est aussi, et inversement, lorsque

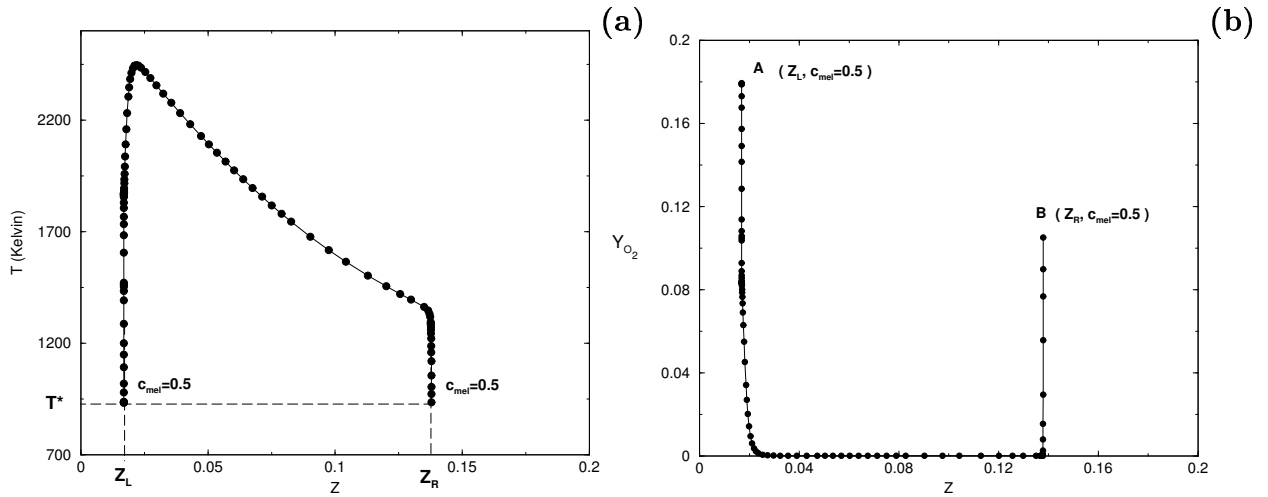


FIG. 3.4 – Résultats d'une combustion $H_2/He/air$ sur la température (figure a) et la fraction massique du dioxygène (figure b) en fonction de la fraction de mélange Z , pour un niveau de prémélange fixé. ($c_{mel} = 0.5$, $Z_L = 0.017$).

$Z_l=0$, $Z_r=1$. Les conditions limites deviennent alors seulement des fonctions de Z_l et c_{mel}^* .

- De plus, l'étirement est fixé à $1 s^{-1}$ pour toutes les flammes de diffusion. Son influence est étudiée sur des flammes de diffusion non prémélangées et partiellement prémélangées dans le chapitre 3.2, p 83.

Finalement, tous les types de prémélange sont déterminés en variant c_{mel} de $[0 \text{ à } 1]$ et Z_l de $[0 \text{ à } Z_{st}]$. Ainsi, 756 flammes de diffusion partiellement prémélangées sont calculées. Sur la figure 3.4, la température et la fraction massique du comburant sont tracées en fonction de Z pour un niveau de prémélange fixé ($c_{mel} = 0.5$ et $Z_l = 0.017$). Par définition de Z_r , les températures à la richesse Z_r et Z_l sont identiques. En revanche, les fractions massiques des autres espèces ne correspondent pas toujours.

$$T(Z_r) = T(Z_l) = T^* \quad (\text{figure a})$$

$$Y_{O_2}(Z_r) \neq Y_{O_2}(Z_l) \quad (\text{figure b})$$

3.2 Combustion Hydrogène / Hélium / air

Le terme source chimique $\dot{\omega}_{H_2O}$

Sur la figure 3.5 on visualise le taux de réaction de l'eau (en s^{-1}) en fonction de la position x (en cm) d'une flamme à contre-courant partiellement prémélangée de méthane / air. On distingue alors 3 zones de réaction distinctes :

- $x \simeq 0$: réaction prémélangée pauvre.
- $x \simeq 4cm$: réaction de diffusion.
- $x \simeq 10cm$: réaction prémélangée riche.

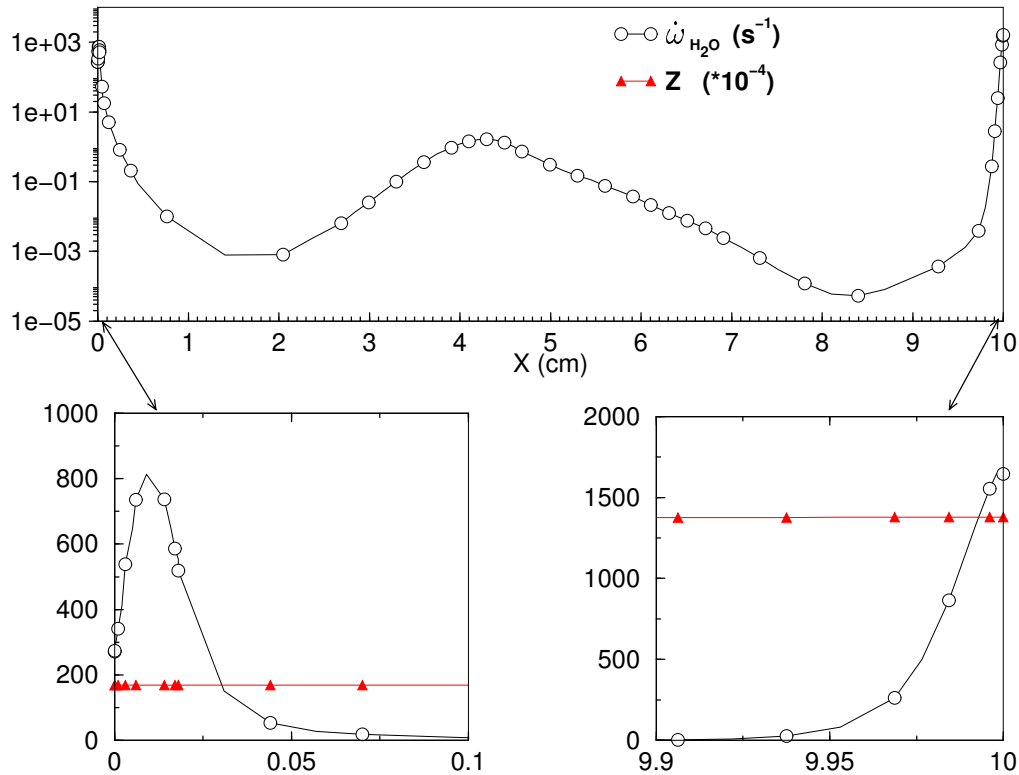


FIG. 3.5 – Cercles : Terme source $\dot{\omega}_{H_2O}$ (en s^{-1}) d'une flamme à contre-courant partiellement prémélangée laminaire $H_2/He/air$ ($c_{mel} = 0.48$ $Z_l = 0.015$) en fonction de sa position (en cm). $x=0$: prémélange pauvre et $x=10$ cm prémélange riche. Haut : échelle logarithmique. Bas : Zoom sur les extrémités de la flamme (échelle linéaire). Triangles : Fraction de mélange Z ($\cdot 10^{-4}$).

L'ordre de grandeur de la réponse de la flamme de diffusion, pour cet étirement, est $10 s^{-1}$, contrairement à la flamme prémélangée qui est de l'ordre de $10000 s^{-1}$. Par consé-

quent, lorsque l'étirement est faible, le taux de réaction de la flamme de diffusion est négligeable. L'évolution du terme source chimique aux extrémités de la flamme de diffusion partiellement prémélangée s'organise à une richesse locale constante. A la richesse Z_L , celui-ci augmente avant de s'annuler et du côté riche, il diminue instantanément.

Le régime de combustion est identifié par le signe du produit des dérivés : $\frac{dY_{O_2}}{dZ} \frac{dY_{H_2}}{dZ}$ (Favier and Vervisch, 2001). En effet, lorsque ce produit est négatif, le régime de combustion est de diffusion et lorsqu'il est positif le régime est prémélangé (voir figure 3.6).

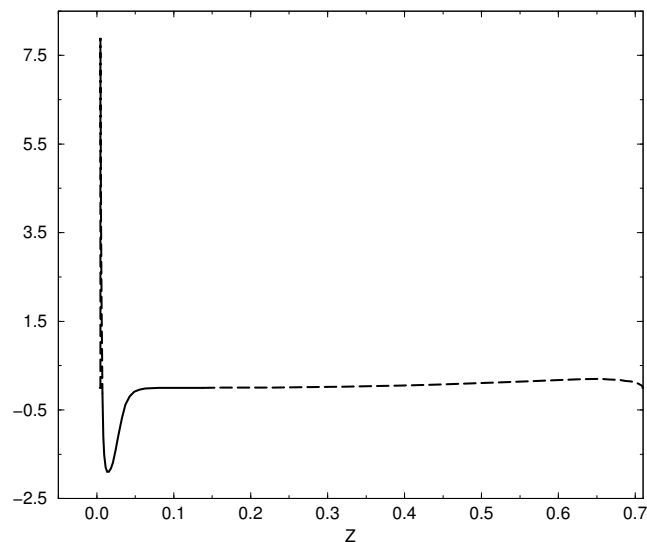


FIG. 3.6 – Produit $\frac{dY_{O_2}}{dZ} \frac{dY_{H_2}}{dZ}$ en fonction de la fraction de mélange Z le long d'une flamme partiellement prémélangée ($c_{mel} = 0.19$, $Z_L = 0.05$). Trait plein : partie négative (diffusion), pointillés : partie positive (prémélange).

Le champ de température T

Dans une flamme partiellement prémélangée, lorsque l'étirement est faible, la température maximale (2678 K) dépasse l'équilibre thermodynamique d'environ 300 K. Elle est obtenue pour un avancement de 0.81, une richesse d'allumage Z_l de 0.026 et une richesse locale (Z) de 0.044. Ce niveau de suréquilibre est quantifié sur la figure 3.7 (b et c). Ce phénomène est dû aux radicaux présents en fortes quantités dans le prémélange. Ils permettent ainsi l'allumage spontané de la réaction (la diffusion différentielle est ici prise en compte ; $Le \neq 1$ et $Sc \neq 1$).

On observe sur cette planche des gradients de température élevés aux conditions limites de la flamme partiellement prémélangée (Z_l et Z_r) lorsque les mélanges sont proches de la stœchiométrie (la réaction y est plus intense).

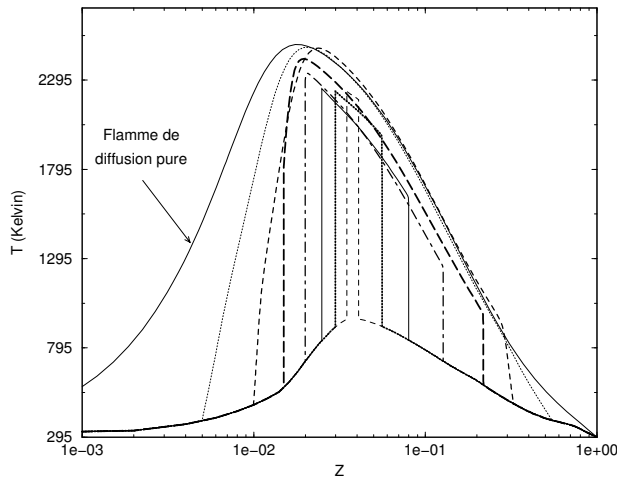
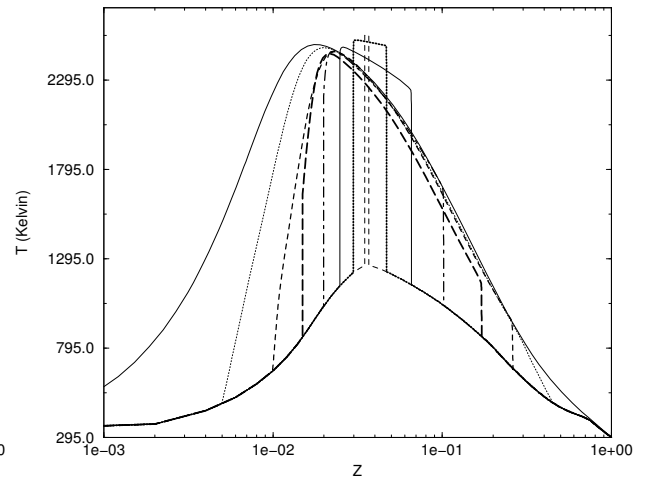
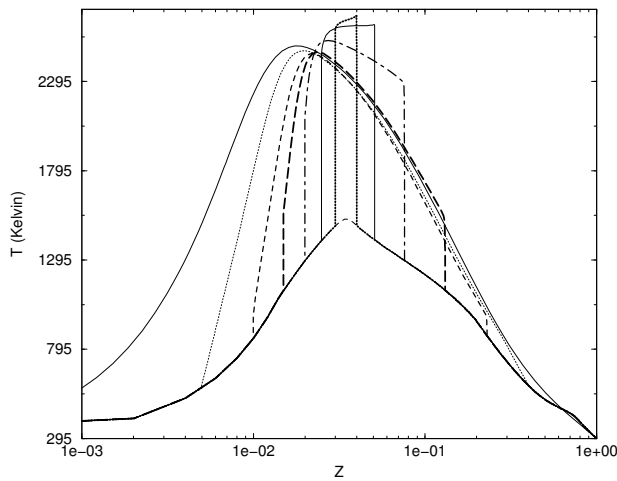
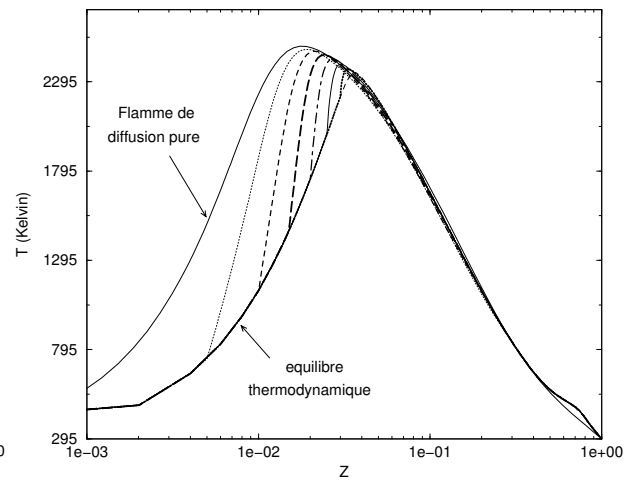
(a) $c_{mel} = 0.24$ (b) $c_{mel} = 0.5$ (c) $c_{mel} = 0.71$ (d) $c_{mel} = 1$

FIG. 3.7 – Température (en K) en fonction de la fraction de mélange Z pour différents prémélanges (échelle log/linéaire) le long des flammes partiellement prémélangées $H_2/He/air$.

$$(0 < Z_l < Z_{st}, \Delta Z_l = 0.005)$$

Le champ de polluant : Y_{NO}

La valeur maximale du monoxyde d'azote (Y_{NO}) est $7,0610^{-03}$. Elle est obtenue pour un avancement de 0.81 et $Z_l = 0.025$, soit proche des valeurs obtenues pour la température maximale ($c_{mel} = 0.81$, $Z_l = 0.026$). Ce résultat montre la forte dépendance aux hautes températures de la fraction massique de NO.

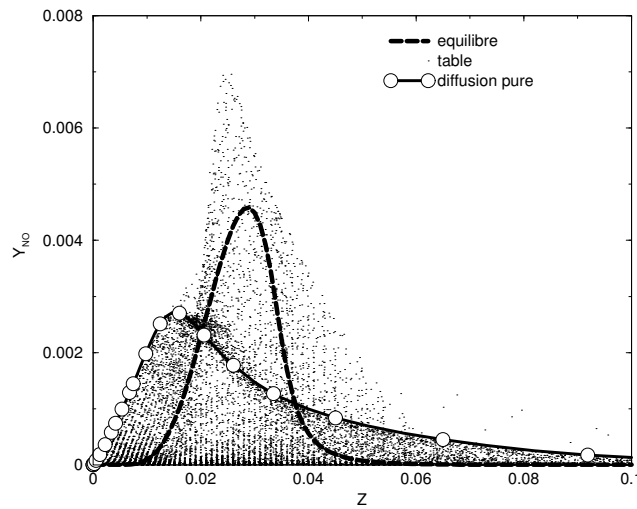


FIG. 3.8 – Fraction massique du monoxyde d'azote Y_{NO} en fonction de la fraction de mélange Z pour les flammes laminaires $H_2/He/air$ prémélangées, partiellement prémélangées et de diffusion non-prémélangée.

Dans la partie précédente, on a observé que la température des flammes partiellement prémélangées dépasse la température d'équilibre. Par conséquent, un suréquilibre de la fraction massique Y_{NO} est aussi observé (voir figure 3.8). Le léger décalage du maximum de NO vers les fractions de mélange pauvres ($Z \simeq 0.017$) des flammes de diffusion faiblement prémélangées est attribué à la diffusion différentielle.

Les espèces chimiques (Y_{H_2O} , Y_{OH} , Y_{O_2})

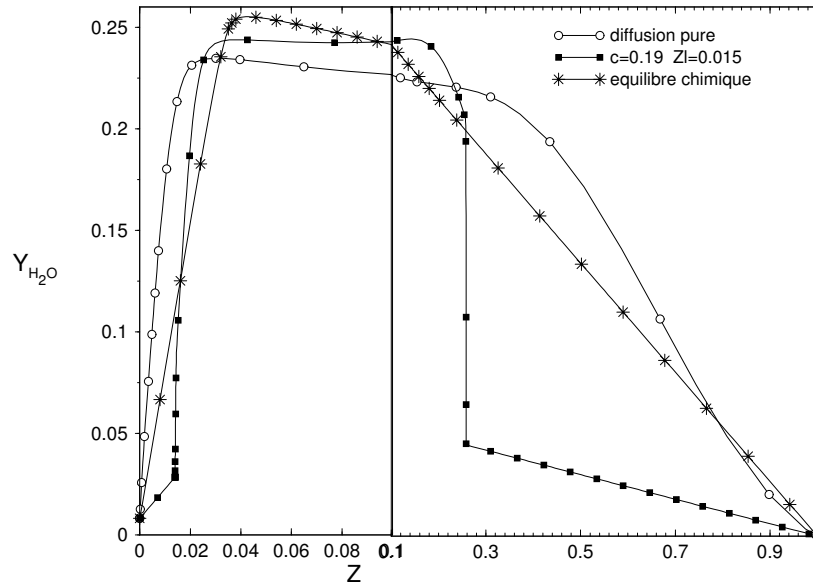


FIG. 3.9 – Fraction massique d' H_2O en fonction de la fraction de mélange Z d'une flamme laminaire à contre-courant partiellement prémélangé, de diffusion pure et de l'équilibre chimique.

- La présence de l'eau (produit de combustion) est fortement similaire au champ de température (figure 3.9). Par conséquent, un suréquilibre est observé proche des prémélanges partiels et les niveaux sont souvent supérieurs à la flamme de diffusion.
- Les profils de la fraction massique du radical OH sont similaires à la fraction massique de NO (figure 3.10). Ces radicaux activent les réactions chimiques puis sont produits car la température augmente et dépasse l'équilibre thermodynamique. Les niveaux atteints dans la majorité des flammes partiellement prémélangées sont supérieurs à l'équilibre chimique.
- La fraction massique d' O_2 (Y_{O_2}) (figure 3.11), suit la trajectoire de mélange à un avancement constant dans l'espace de Z avant de réagir. La réaction est plus rapide et importante, proche de la stœchiométrie et par conséquent, les gradients d' O_2 sont plus forts proche de Z_{st} .

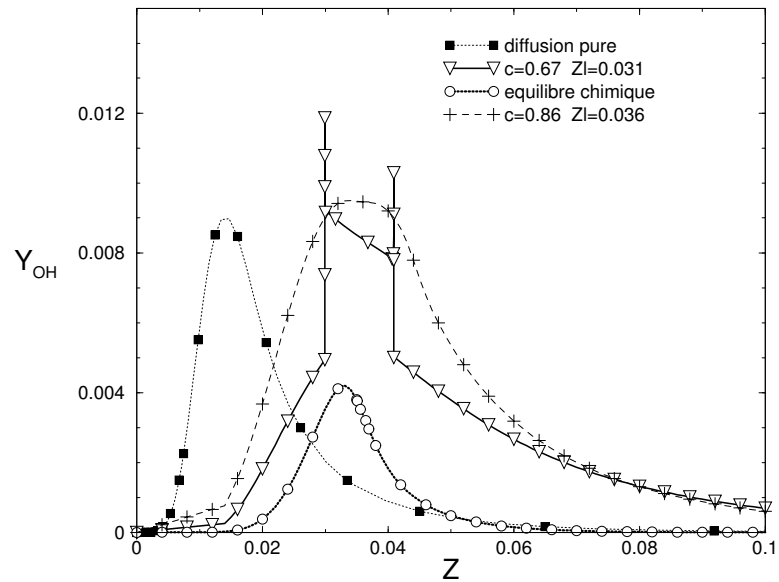


FIG. 3.10 – Fraction massique du radical OH en fonction de la fraction de mélange Z dans deux flammes laminaires à contre-courant partiellement prémélangées, de diffusion pure et de l'équilibre chimique.

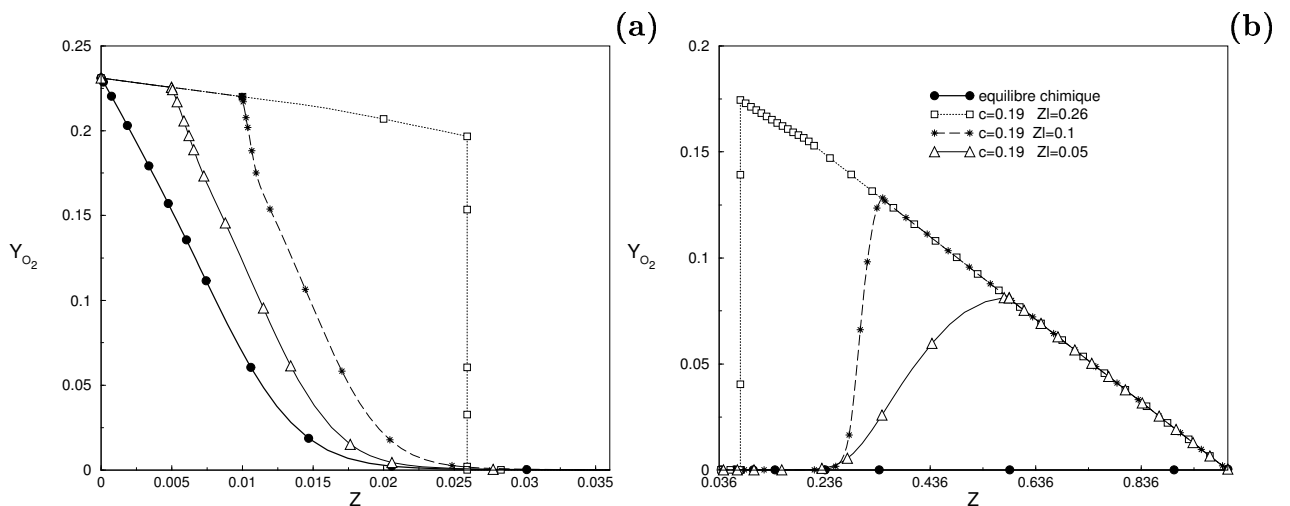


FIG. 3.11 – Fraction massique du comburant (Y_{O_2}) en fonction de la fraction de mélange Z dans trois flammes laminaires à contre-courant partiellement prémélangées et de diffusion pure. (a) zone pauvre, (b) zone riche.

Influence de l'étirement sur les flammes non-prémélangées et partiellement prémélangées

L'influence de l'étirement sur la température maximale est séparée en deux zones distinctes (voir figure 3.12).

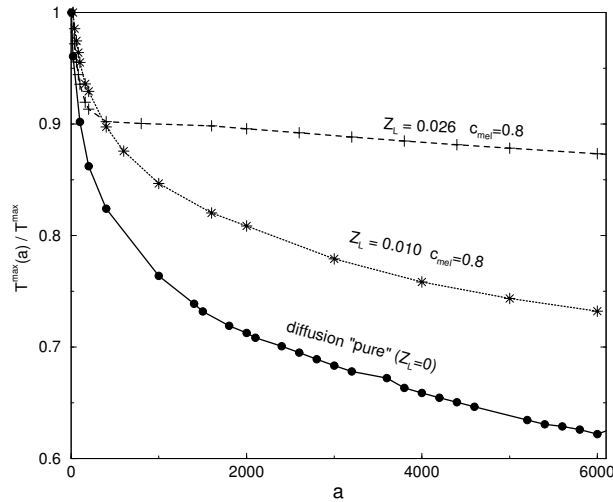


FIG. 3.12 – Température maximale normalisée, des flammes partiellement prémélangées laminaires $H_2/He/air$, en fonction de l'étirement moyen (en s^{-1}).

Lorsque l'étirement passe de $2.2 s^{-1}$ à $400 s^{-1}$, toutes les flammes, qu'elles soient partiellement prémélangées ou de diffusion non-prémélangées, ont leur température maximale qui décroît de 10 à 15 %. Pour des étirements plus forts la température maximale des flammes de diffusion "pure" diminue plus rapidement que dans les flammes partiellement prémélangées qui de ce fait sont plus robustes. Plus les prémélanges sont réactifs ($Z \simeq Z_{st}$ et $c \simeq 0.8$), plus il est difficile d'éteindre la flamme.

Le même comportement est observé pour les fractions massiques Y_{OH} et Y_{NO} (voir figures 3.13 a et b). Cependant, la fraction massique de NO est l'espèce qui présente la plus grande diminution lorsque l'étirement augmente. Il existe un rapport 100 entre les maxima des fractions massiques de Y_{NO} pour un étirement faible (équilibre chimique) et un étirement fort (extinction). Cette chute de NO est principalement localisée pour les faibles étirements, ensuite Y_{NO}^{max} est faible, mais constant.

Dans le cas d'une flamme de diffusion non-prémélangée, le terme source chimique $\dot{\omega}_{H_2O}^{max}$ est continuellement influencé par l'étirement (figure 3.13 a). En effet, le taux de production

d' H_2O maximal augmente linéairement en fonction de l'étirement contrairement à une flamme partiellement prémélangée où $\dot{\omega}_{H_2O}^{max}$ augmente seulement de 10 % (voir figure 3.13 b).

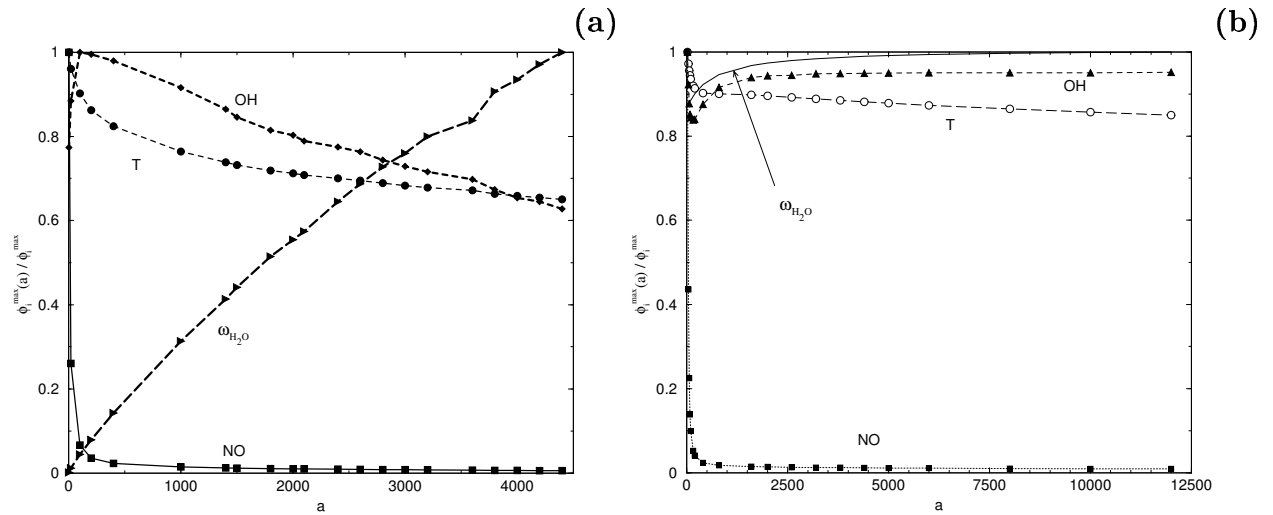


FIG. 3.13 – Valeurs maximales normalisées de la température, des fractions massiques (NO , OH) et du taux de production d' H_2O en fonction de l'étirement moyen. (a) flamme de diffusion laminaire non-prémélangée à contre-courant. (b) flamme de diffusion laminaire à contre-courant partiellement prémélangée ($c=0.8$ $Z_1=0.026$).

3.3 Combustion Méthane / air

Configuration

Les flammes partiellement prémélangées laminaires ont des mélanges pauvres qui sont reliés aux mélanges riches par la condition de température (voir condition 3.1, page 75). Le comportement de Z_L (Z_{mel}) en fonction de Z_R (figure 3.14) est identique à la combustion hydrogène / air. Ainsi Z_R et Z_L se rapprochent de la stœchiométrie avec un profil directement lié à la température dans l'espace de Z . La cartographie 3.15 représente les conditions initiales de température (des flammes partiellement prémélangées) en fonction du mélange pauvre et de l'avancement des mélanges.

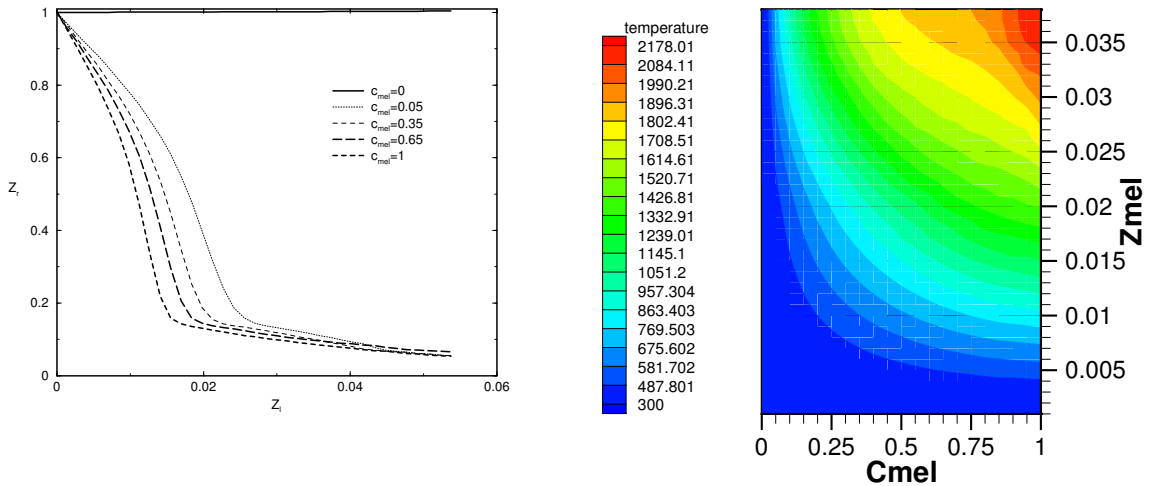


FIG. 3.14 – Z_L en fonction de Z_R .

FIG. 3.15 – Température de mélange (K).

Les profils d'espèces chimiques majoritaires et la température d'une flamme laminaire à contre-courant partiellement prémélangée sont tracés sur la figure 3.16 en fonction de la fraction de mélange. L'étirement dans cet étude est fixé à 1 s^{-1} . On remarque une consommation des réactifs au profit des produits de combustion conduisant à une élévation de température de chaque côté de la flamme. Ces réactions sont caractéristiques des flammes partiellement prémélangées avec un taux de consommation non nul dans les zones riche, pauvre et stœchiométrique. Les radicaux OH et les polluants NO sont toujours maxima à la stœchiométrie et négligeables dans les mélanges initiaux (conditions limites des flammes partiellement prémélangées). Le monoxyde de carbone (CO) est toujours produit dans les régions riches de la flamme. Enfin, H_2 provient de l'oxydation du méthane dans les zones riches.

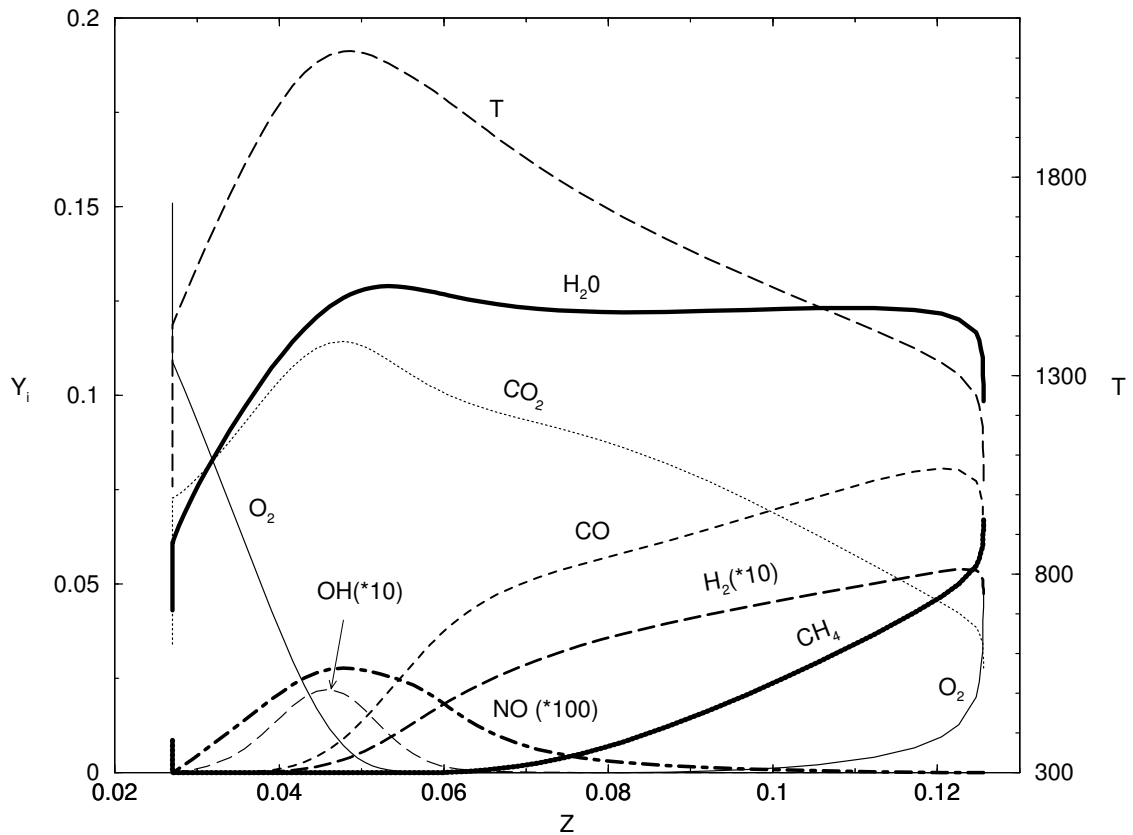


FIG. 3.16 – Fractions massiques et température d'une flamme laminaire à contre-courant partiellement prémélangée ($a=1s^{-1}$) en fonction de la fraction de mélange Z .

Champ de vitesse

La vitesse axiale est fortement influencée par la densité et donc par la température. Si le mélange est suffisamment énergétique et que la réaction est instantanée, la température augmente entraînant les particules fluides (figure 3.17 a). Le point de stagnation (vitesse axiale nulle) ne se situe pas à une position constante (figure 3.17 a et b). Il est contrôlé par les réactions en amont (combustion dans les zones riche et pauvre de la flamme). Sur la figure 3.17 b, les changements brusques de vitesse sont caractéristiques de l'auto-allumage (positions $x=8.5$ et 3 cm).

Termes sources chimiques

Les résultats sont présentés sous la forme $\dot{\omega}_{Y_c} = \dot{\omega}_{CO_2} + \dot{\omega}_{CO}$ qui est le taux de production de la variable de progrès $Y_c = Y_{CO_2} + Y_{CO}$. La figure 3.18 représente le terme source chimique borné entre 1 et $5 s^{-1}$ (le maximum étant $1201 s^{-1}$). Cette visualisation permet d'observer une réaction chimique dans un régime de diffusion à la position $x \simeq 5$

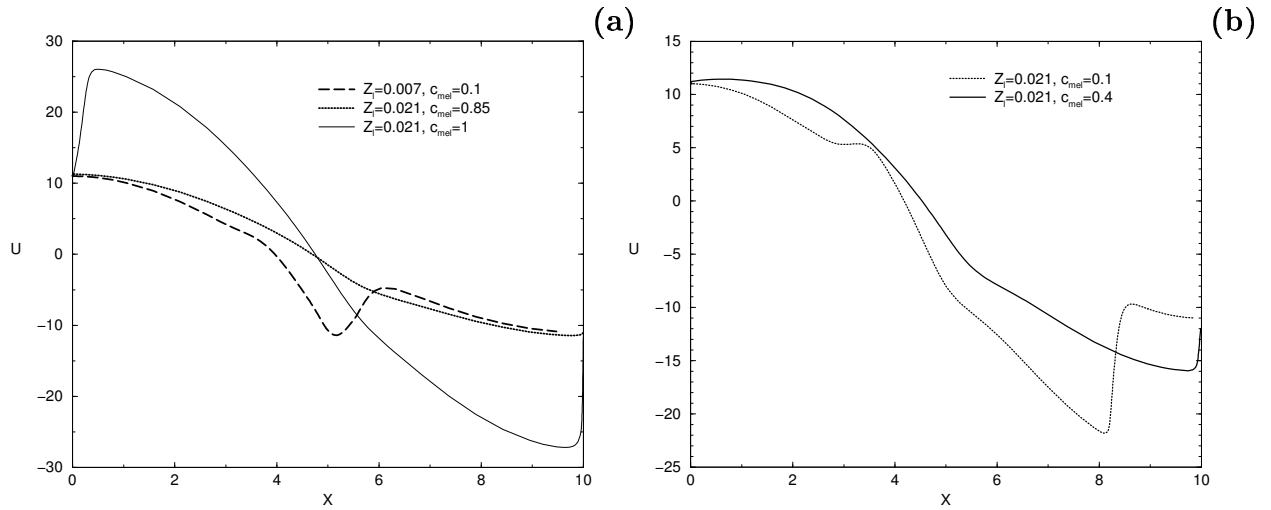


FIG. 3.17 – Vitesse (en cm/s) en fonction de la position x (en cm) de la flamme partiellement prémélangée pour plusieurs niveaux de mélange.

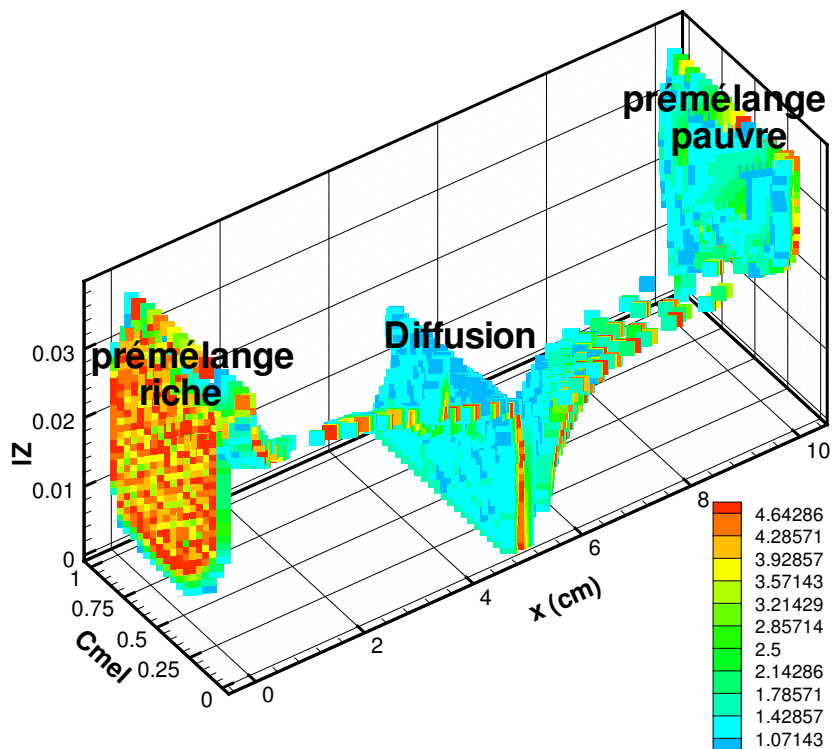


FIG. 3.18 – Terme source chimique ($\dot{\omega}_{CO_2} + \dot{\omega}_{CO}$), borné entre 1 et 5 s⁻¹ en fonction de la position x (en cm), l'avancement (c_{mel}) et la richesse de mélange pauvre (Z_1).

cm, tant que les richesses des prémélanges sont inférieures à 0.019 mais quelque soit c_{mel} . Deux zones réactives sont situées aux extrémités des flammes laminaires à contre-courant : ce sont les régimes de combustion partiellement prémélangées riche ($x=0$ cm) et pauvre ($x=10$ cm). Enfin, des réactions très localisées entre $x = 0$ et $x = 10$ cm, représentatives d'un auto-allumage sont observées pour des avancements de mélange faibles ($c_{mel} < 0.25$).

Les réactions partiellement prémélangées sont mises en évidence sur la planche 3.19 dans la zone pauvre (Z_l) et la planche 3.20 dans la zone riche (Z_r). Le taux de réaction est tracé en fonction de la position x (en cm) et de l'avancement du mélange pour différentes richesses Z_L . Les tendances sont identiques de chaque côté de la flamme laminaire. Quand le mélange s'éloigne de la condition stœchiométrique (figure d), les réactions sont moins importantes ; les flammes partiellement prémélangées tendent vers une flamme de diffusion non-prémélangée. Pour les mélanges réactifs ($Z_l \simeq Z_r$), figure a et b, le taux de production est maximum entre $c_{mel} = 0.25$ et 0.6 et la réaction est retardée lorsque c_{mel} est inférieur à 0.25, c'est-à-dire que le maximum de la réaction n'est plus observé aux conditions limites de la flamme mais légèrement décalé ($x \neq 0$ et $x \neq 10$ cm).

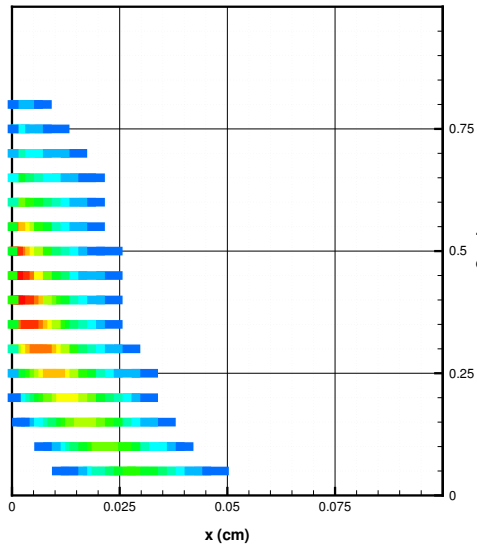
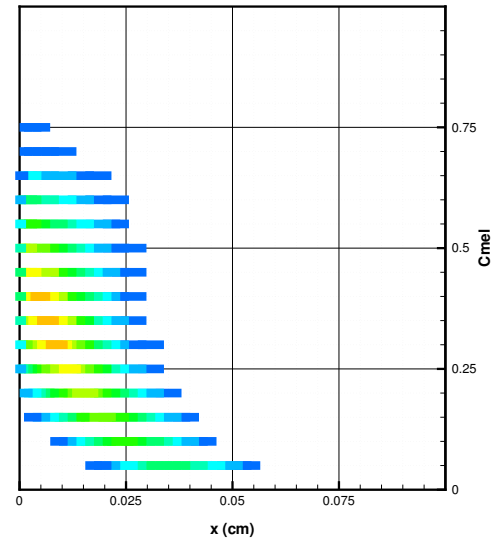
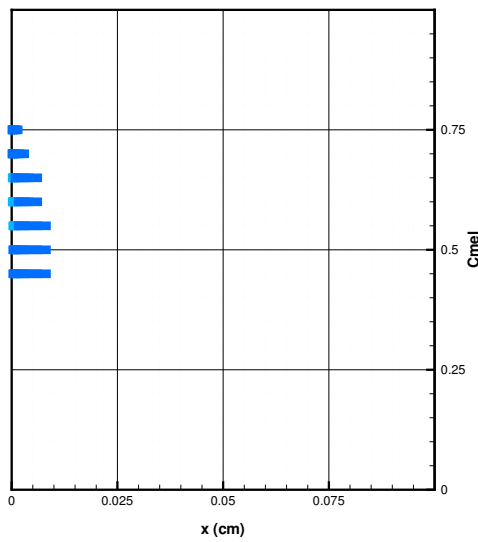
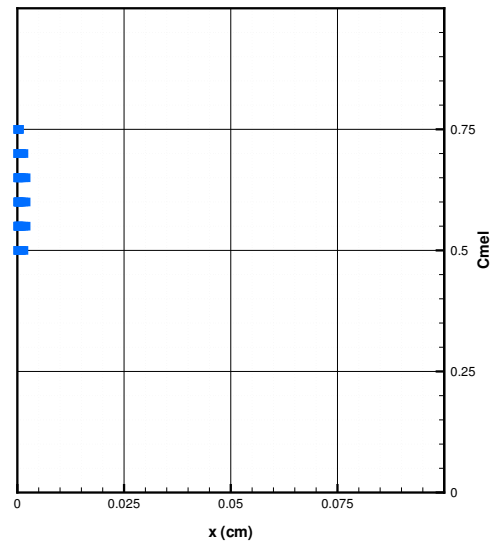
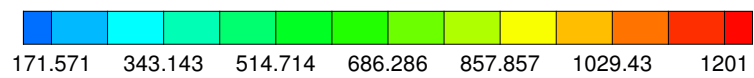
(a) $Z_l = 5.37E^{-2}$ (b) $Z_l = 5.07E^{-2}$ (c) $Z_l = 4.17E^{-2}$ (d) $Z_l = 3.43E^{-2}$ 

FIG. 3.19 – Terme source chimique de la branche riche (Z_r) ($\dot{\omega}_{CO_2} + \dot{\omega}_{CO}$) en s^{-1} en fonction de l'avancement du mélange et de la position x (en cm).

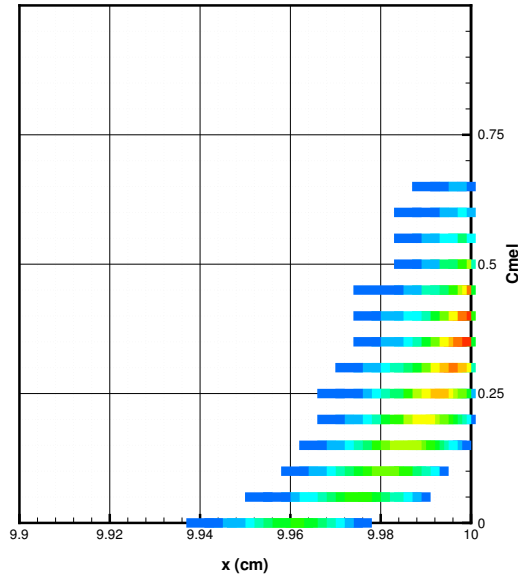
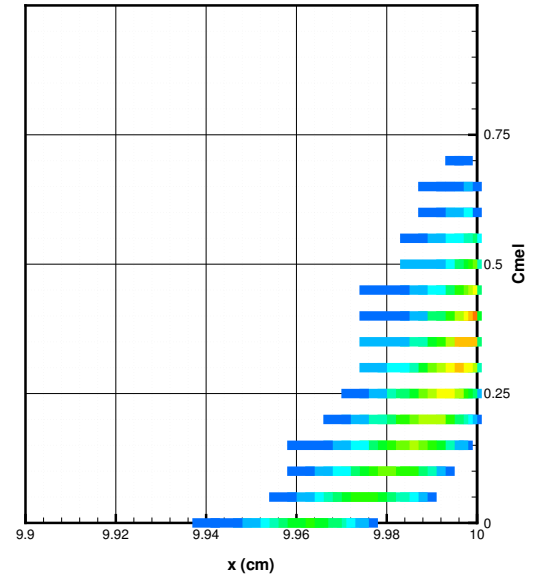
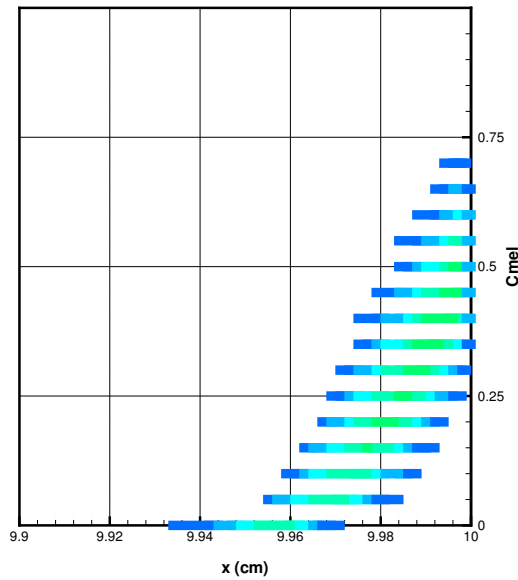
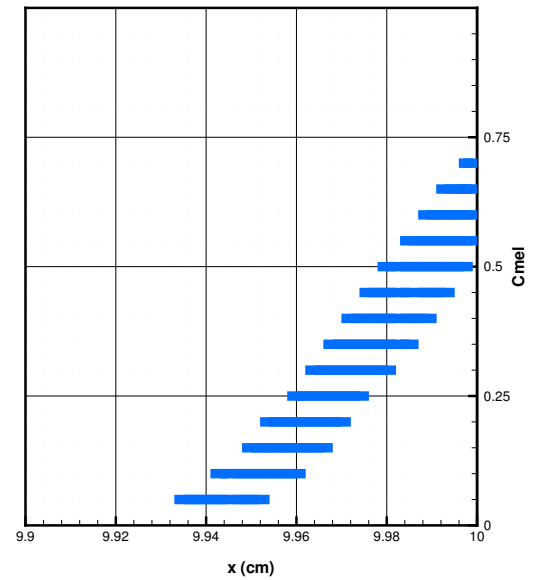
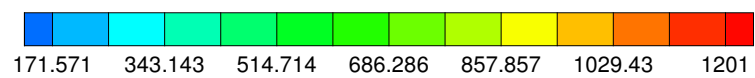
(a) $Z_l = 5.37E^{-2}$ (b) $Z_l = 5.07E^{-2}$ (c) $Z_l = 4.17E^{-2}$ (d) $Z_l = 3.43E^{-2}$ 

FIG. 3.20 – Terme source chimique de la branche pauvre (Z_l) ($\dot{\omega}_{CO_2} + \dot{\omega}_{CO}$) en s^{-1} en fonction de l'avancement du mélange et de la position x (en cm).

La température

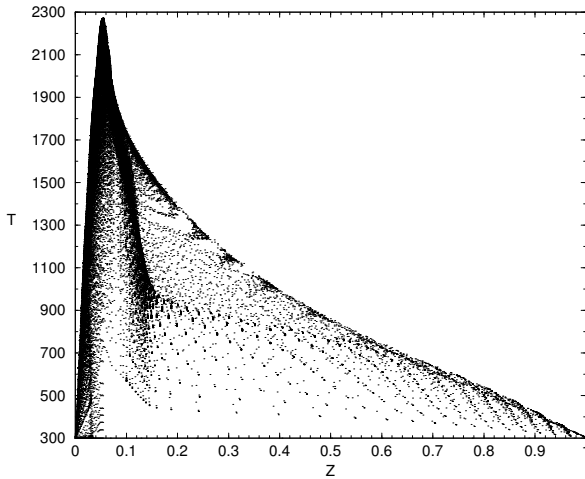


FIG. 3.21 – *Température (en K) en fonction de la fraction de mélange Z pour tous les points des flammes laminaires partiellement prémélangées méthane / air.*

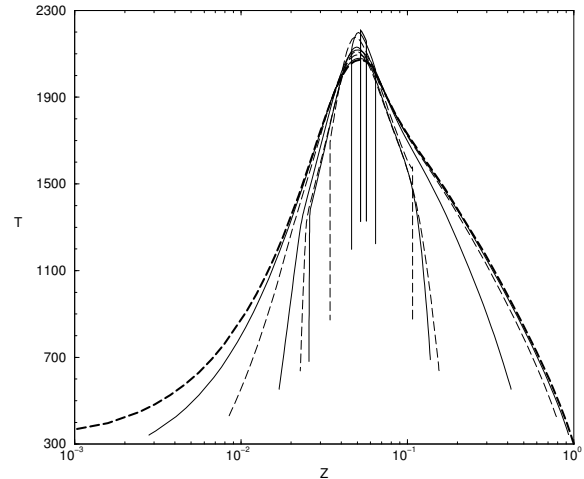


FIG. 3.22 – *Température en fonction de la fraction de mélange Z des flammes laminaire à contre-courant partiellement prémélangées ($c_{mel} = 0.2$).*

À partir d'une condition de mélange comprise entre l'équilibre chimique et le mélange sans réaction, la température évolue vers une condition voisine d'une flamme de diffusion non-prémélangée. Sur la figure 3.21, une concentration importante de point se situe proche de cette flamme de diffusion "pure". La fraction de mélange $Z=0.12$ représente la richesse supérieure riche pour laquelle la réaction se déclenche instantanément (deuxième concentration de point). Elle peut être assimilée à la limite d'inflammabilité riche. Cette observation est confirmée par les courbes 3.22. La température est tracée en fonction de la fraction de mélange (échelle log-linéaire). Les prémélanges varient par leurs richesses (l'avancement est fixé à 0.2). Loin de la stœchiométrie, la température augmente progressivement en fonction de Z . En revanche, lorsque Z_{mel} est comprise entre 0.02 et 0.12, un saut de température à richesse constante est observé, caractéristique d'une réaction intense.

L'influence de l'avancement du mélange c_{mel} est mise en évidence en comparant plusieurs flammes partiellement prémélangées à richesse de mélange constante (figures 3.23 a et b). Lorsque c_{mel} est proche de 0.6 la réaction est souvent très rapide (Z constant). Si $c_{mel} = 1$, il n'y a plus de réaction ni d'élévation de température à cette richesse (équilibre chimique). Enfin si c_{mel} est trop faible et que le mélange est éloigné des conditions d'in-

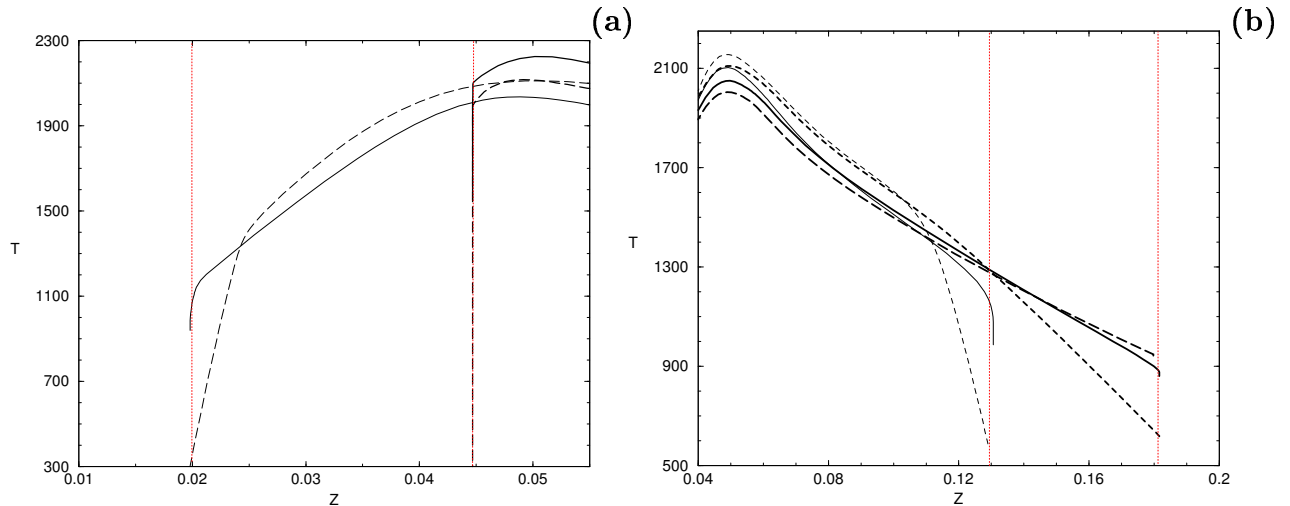


FIG. 3.23 – Température (en K) en fonction de la fraction de mélange Z pour différents avancements du mélange (c_{mel}) et richesses de prémélange constantes ((a) pauvre et (b) riche).

flammabilité, la réaction se produit plus lentement.

Les cartographies de température sont tracées sur la planche 3.24. Lorsque les prémélanges ont une richesse voisine de la stœchiométrie, les niveaux de température dans la flamme sont toujours élevés (figure a). Si les prémélanges sont très éloignés de cette condition, on retrouve les flammes de diffusion non-prémélangées (figure d). Pour des prémélanges à des richesses intermédiaires, l'épaisseur de la zone thermique est plus grande et les gradients de température plus faibles que dans les flammes de diffusion non-prémélangées (figures b et c).

Un comportement particulier est observé sur la figure 3.25. L'avancement du prémélange est fixé à une faible valeur ($c=0.05$). On observe un étalement brusque du champ de température pour une fraction de prémélange supérieure à 0.02, caractéristique de l'auto-inflammation.

La planche 3.26 permet de quantifier l'importance du prémélange sur le champ de température. Sur la figure a, à la limite des flammes de diffusion non-prémélangée, la température maximale est constante bien que la température initiale augmente. De plus, aucune réaction du côté riche ou pauvre ($x \simeq 10$ cm, $x \simeq 0$) n'est visible.

Sur la figure b, les fractions de mélange initiales se rapprochent de la stœchiométrie,

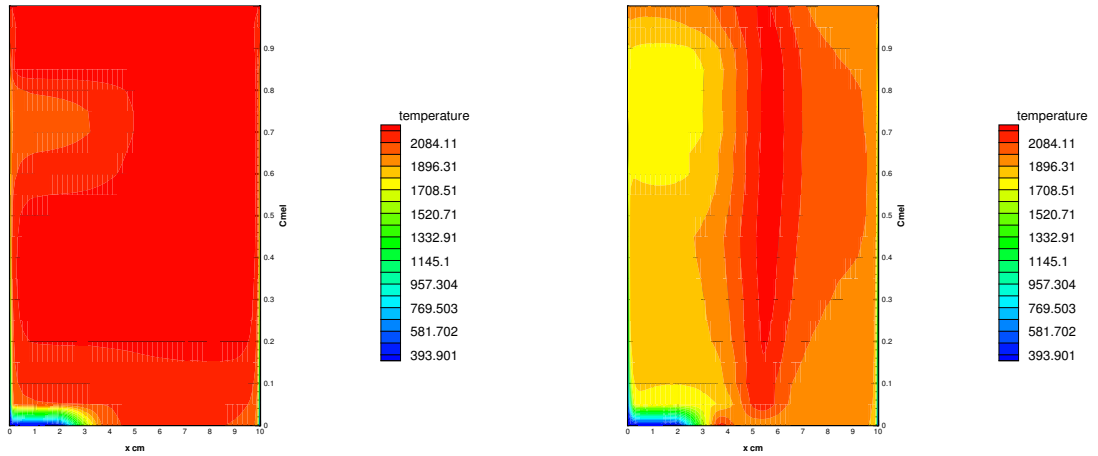
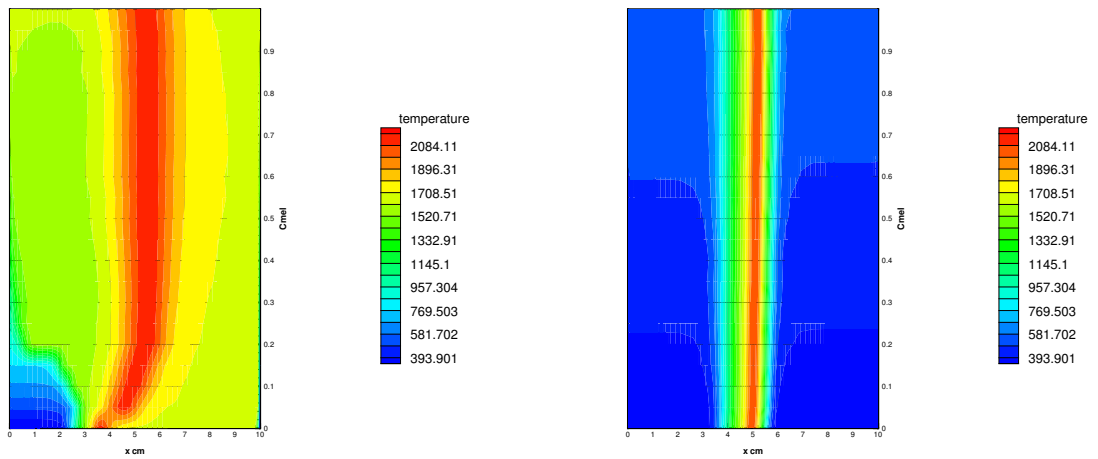
(a) $Z_l = 5.37E^{-2}$ (b) $Z_l = 4.17E^{-2}$ (c) $Z_l = 3.43E^{-2}$ (d) $Z_l = 0.005$

FIG. 3.24 – Température (en K) en fonction de l'avancement du mélange (c_{mel}) et de la position x (en cm) pour différentes richesses de mélange.

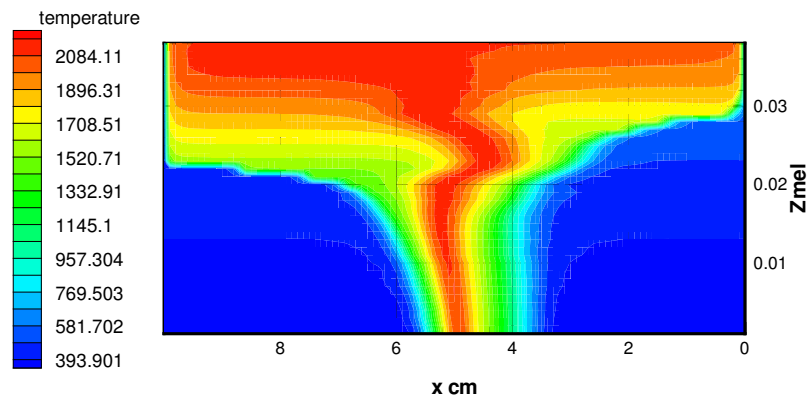


FIG. 3.25 – Température (en K) en fonction de la richesse de mélange (Z_l) et de la position x (en cm) pour un avancement $c_{mel} = 0.05$

et la température de mélange augmente mais la température maximale reste inchangée. La réaction du côté pauvre devient rapide ($x \simeq L = 10$ cm), et une réaction du côté riche est présente mais plus lente. Ce comportement s'accroît lorsque les mélanges deviennent de plus en plus favorables à la combustion (figures c puis d).

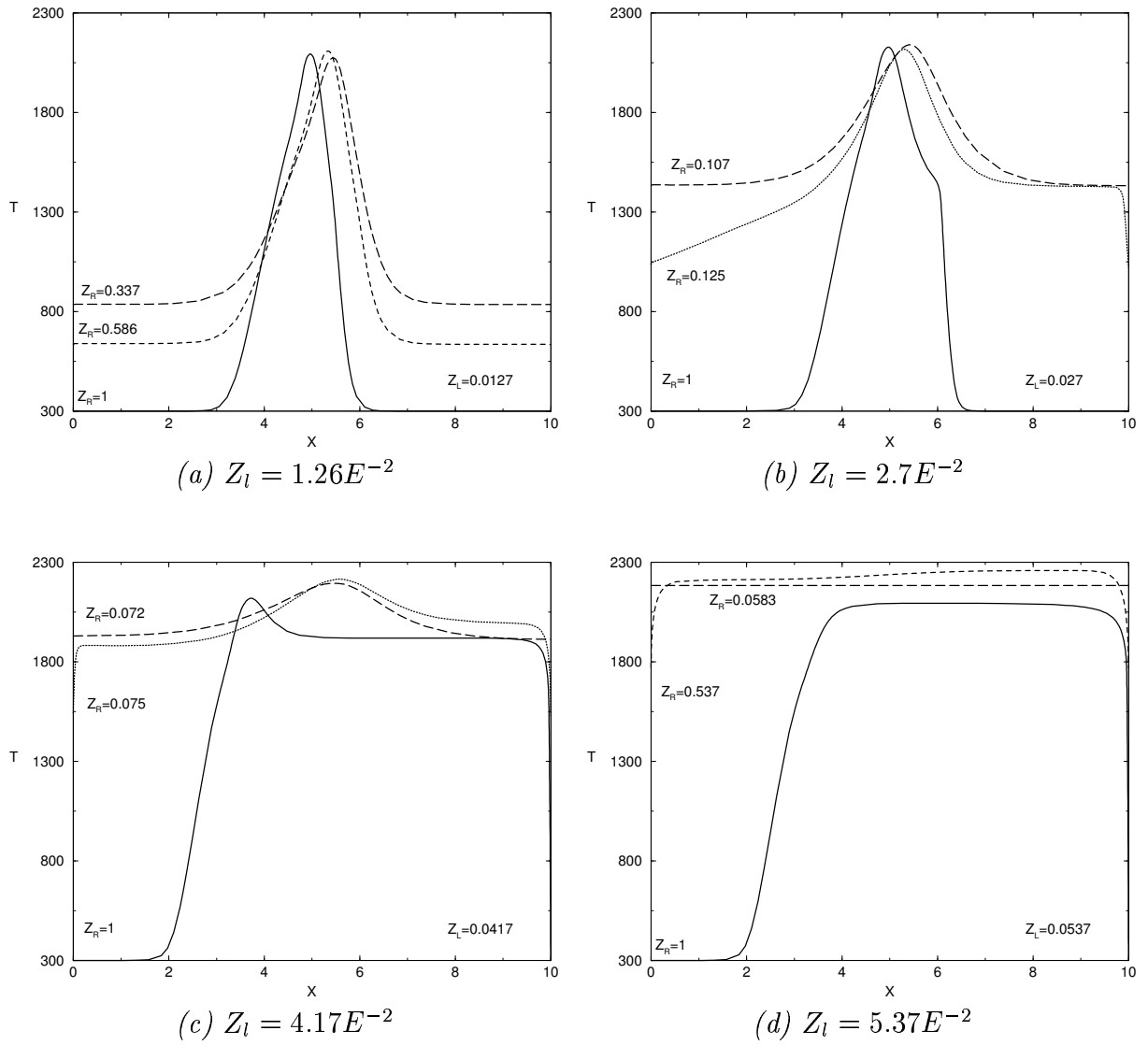


FIG. 3.26 – Température (en K) en fonction de la position de la flamme partiellement prémélangée (en cm). $c_{mel} = 0$ (trait plein), $c_{mel} = 0.5$ (pointillés), $c_{mel} = 1$ (longs pointillés). (a) Z_l éloigné de Z_{st} , (d) $Z_l \simeq Z_{st}$ et (b, c) mélanges intermédiaires.

Produits de combustion CO , CO_2 et H_2O

De même que les flammes prémélangées ou non-prémélangées, la formation du CO est toujours localisée dans les zones riches de la flamme (figure 3.27). La planche 3.28 résume les résultats obtenus sur le monoxyde de carbone dans les flammes partiellement prémélangées. Les fractions massiques sont tracées en fonction de la position x (en cm) dans les flammes de diffusion laminaire à contre-courant partiellement prémélangées. Le monoxyde de carbone est présent majoritairement dans la zone riche de la flamme ($x < 5$) cm. L'influence du prémélange est important sur les niveaux de CO atteints dans la flamme. Sur la figure a, on remarque que le CO est produit dans la zone riche pour les richesses de prémélange $Z_R = 1$ et 0.586 . En revanche, pour $Z_R = 0.337$, on observe une consommation du CO à travers la flamme. Finalement, les niveaux de CO dans les flammes partiellement prémélangées convergent vers le maximum de la flamme de diffusion pure, $Z_R = 1$ (ici en $x \simeq 5$ cm). Des résultats similaires sont observés sur les figures b et c pour des prémélanges différents.

Ceci montre que les niveaux de CO dans les flammes prémélangées sont plus forts que dans les flammes de diffusion non (ou partiellement) prémélangées.

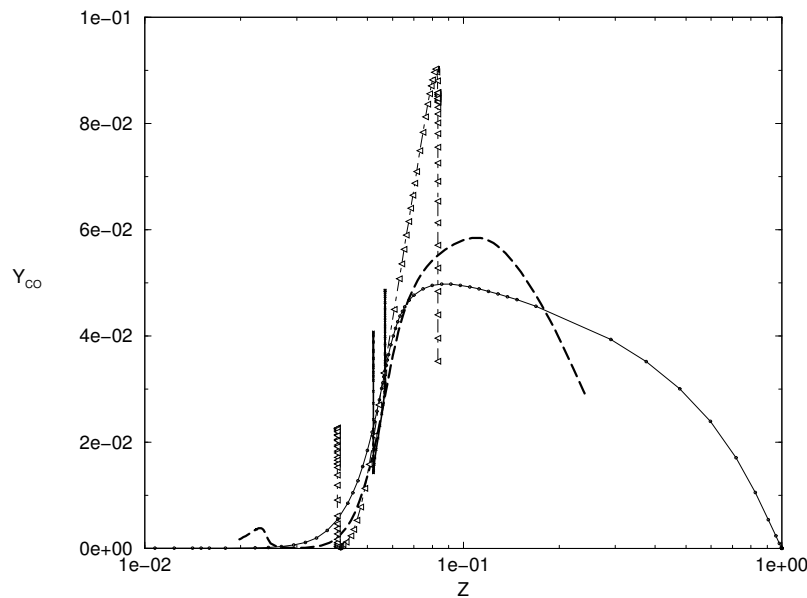


FIG. 3.27 – Fraction massique du CO en fonction de la fraction de mélange Z ($c_{mel} = 0.2$), pour différentes richesses de prémélange.

Les comportements de CO_2 (planche 3.29) et de H_2O (planche 3.30) sont directement liés à la température et par conséquent très similaires.

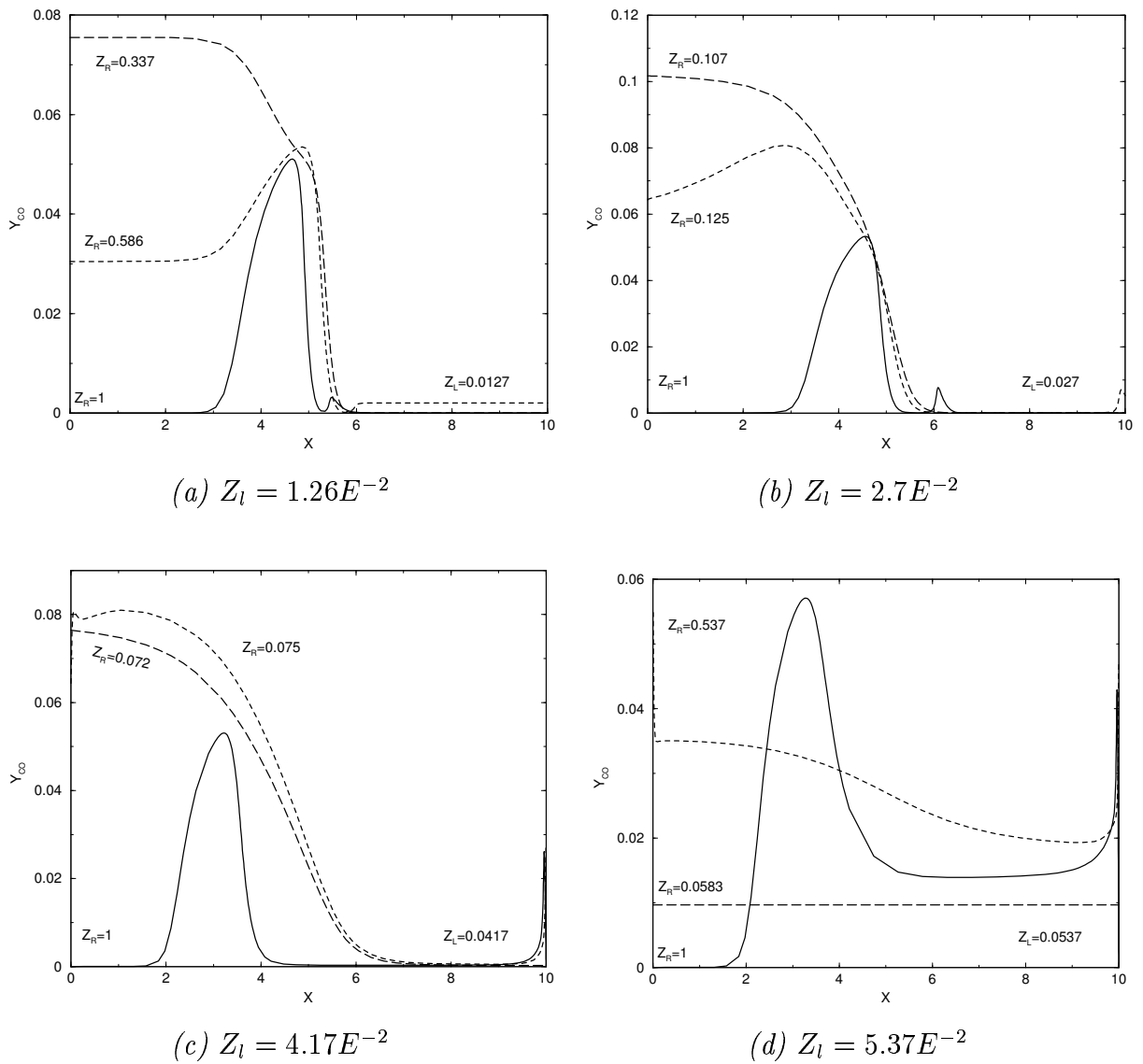


FIG. 3.28 – Fraction massique du CO en fonction de la position de la flamme partiellement prémélangée (en cm). $c_{mel} = 0$ (trait plein), $c_{mel} = 0.5$ (pointillés), $c_{mel} = 1$ (longs pointillés). (a) Z_l éloigné de Z_{st} , (d) $Z_l \simeq Z_{st}$ et (b, c) mélanges intermédiaires.

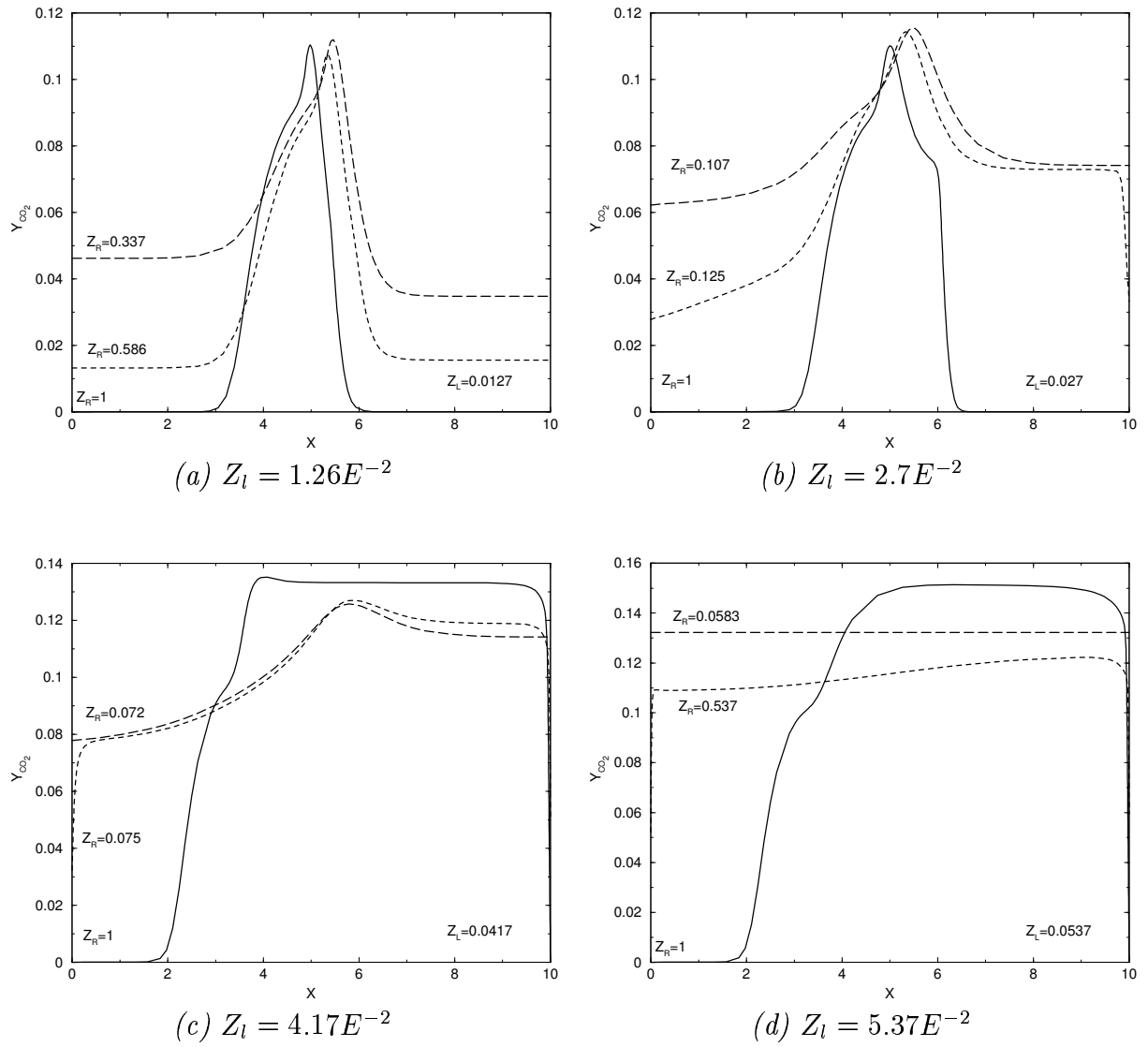


FIG. 3.29 – Fraction massique du CO_2 en fonction de la position de la flamme partiellement prémélangée (en cm). $c_{mel} = 0$ (trait plein), $c_{mel} = 0.5$ (pointillés), $c_{mel} = 1$ (longs pointillés). (a) Z_l éloigné de Z_{st} , (d) $Z_l \simeq Z_{st}$ et (b, c) mélanges intermédiaires.

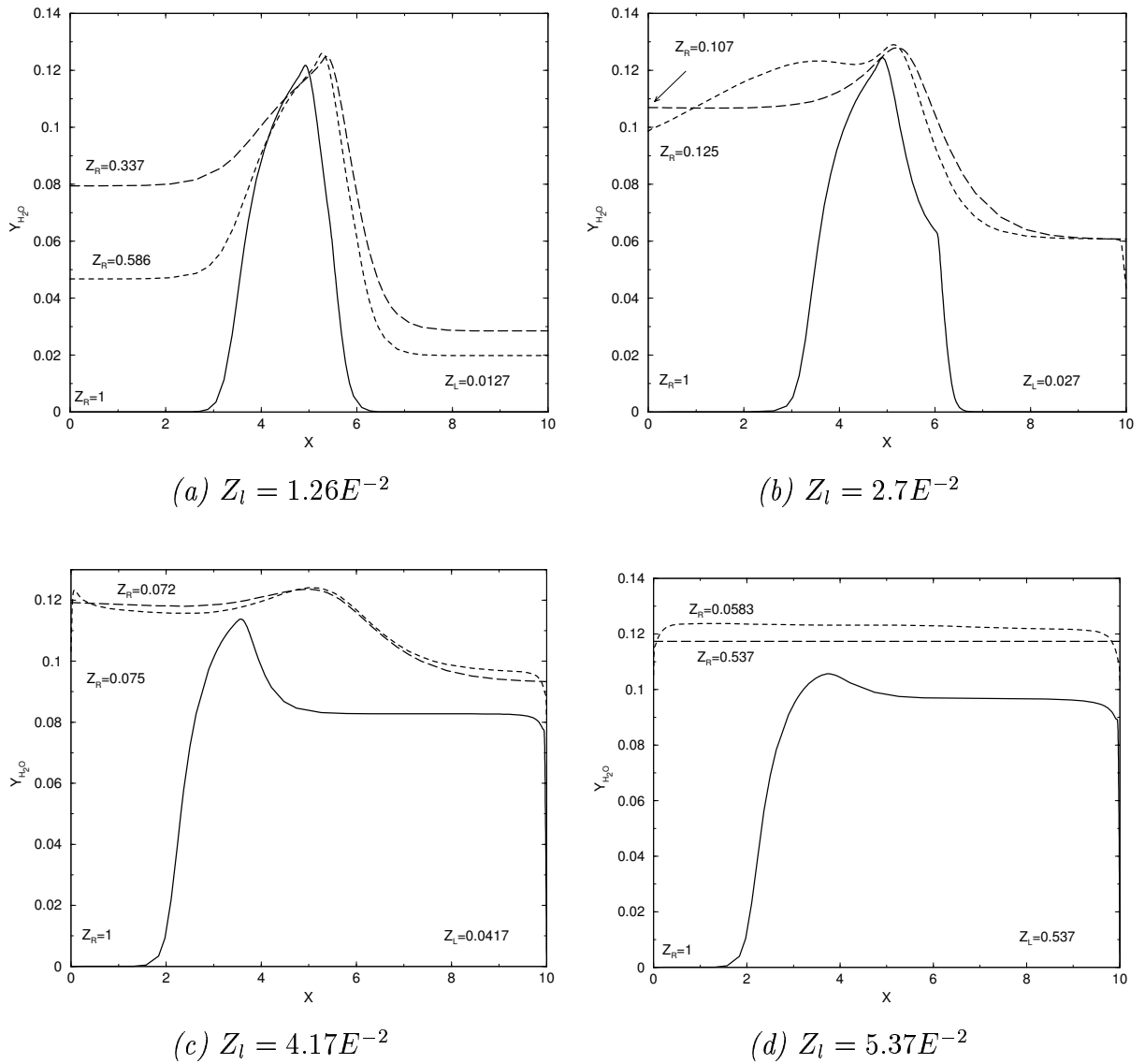


FIG. 3.30 – Fraction massique de H_2O en fonction de la position de la flamme partiellement prémélangée (en cm). $c_{mel} = 0$ (trait plein), $c_{mel} = 0.5$ (pointillés), $c_{mel} = 1$ (longs pointillés). (a) Z_l éloigné de Z_{st} , (d) $Z_l \simeq Z_{st}$ et (b, c) mélanges intermédiaires.

Fractions massiques des réactifs

Le comburant (figure 3.31) et le combustible sont consommés dans les zones de prémélange dans les mêmes proportions que les produits sont formés. Par conséquent, la réaction étant plus rapide lorsque les mélanges sont proches de la stœchiométrie, les gradients d' O_2 (ainsi que CH_4) sont plus forts.

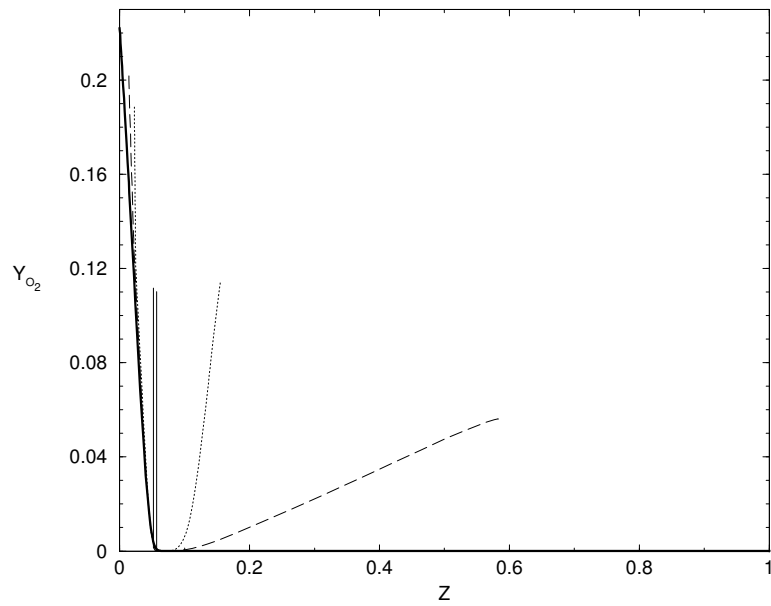


FIG. 3.31 – Fraction massique de O_2 en fonction de la fraction de mélange ($c_{mel} = 0.2$), pour différentes richesses de prémélange ($Z_L \simeq 0., 0.02, 0.03, 0.05$).

Les résultats des fractions massiques de CH_4 et O_2 en fonction de la position x (en cm) des flammes partiellement prémélangées sont regroupés respectivement dans les planches (3.32 et 3.33).

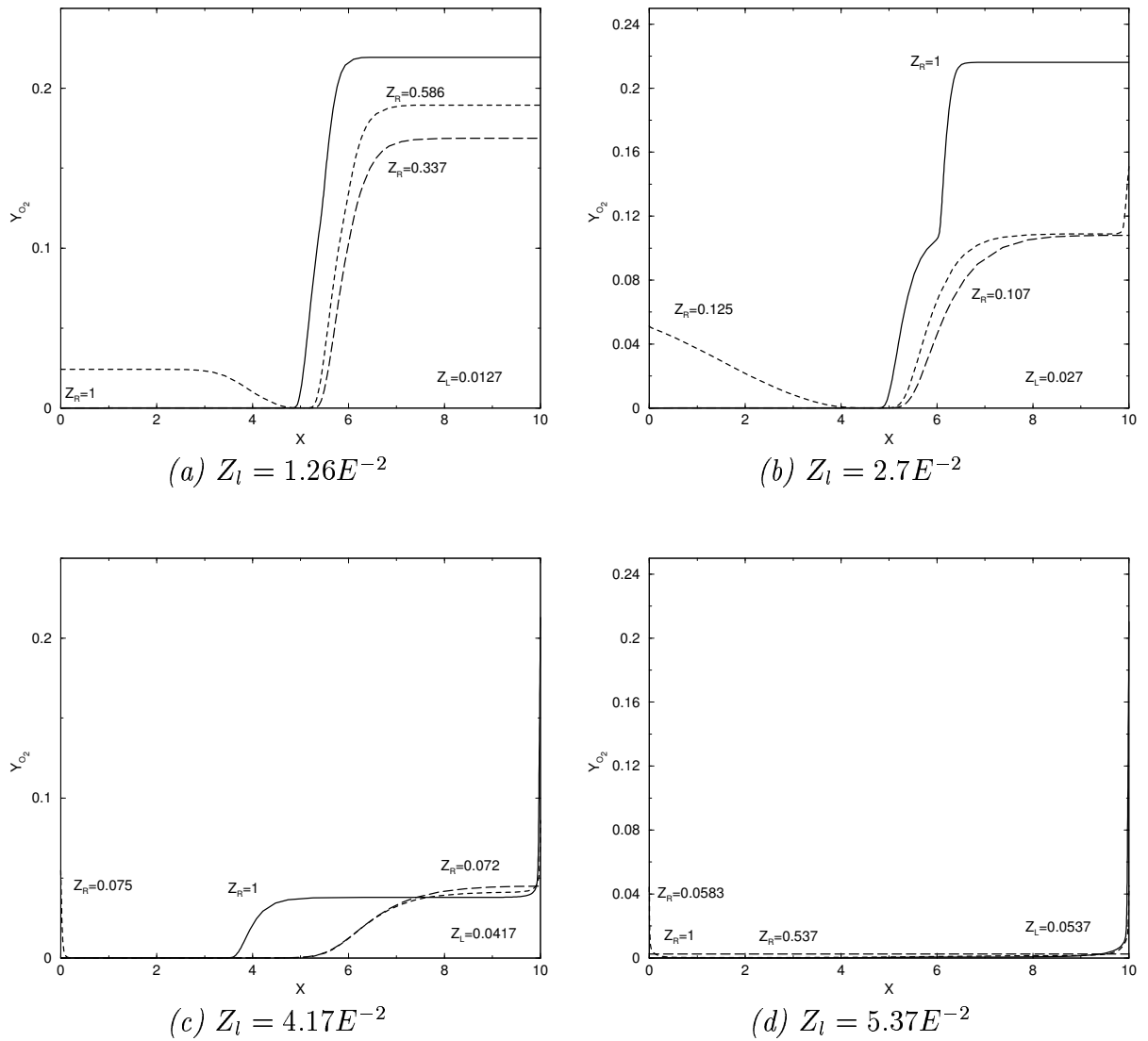


FIG. 3.32 – Fraction massique de O_2 en fonction de la position de la flamme partiellement prémélangée (en cm). $c_{mel} = 0$ (trait plein), $c_{mel} = 0.5$ (pointillés), $c_{mel} = 1$ (longs pointillés). (a) Z_l éloigné de Z_{st} , (d) $Z_l \simeq Z_{st}$ et (b, c) mélanges intermédiaires.

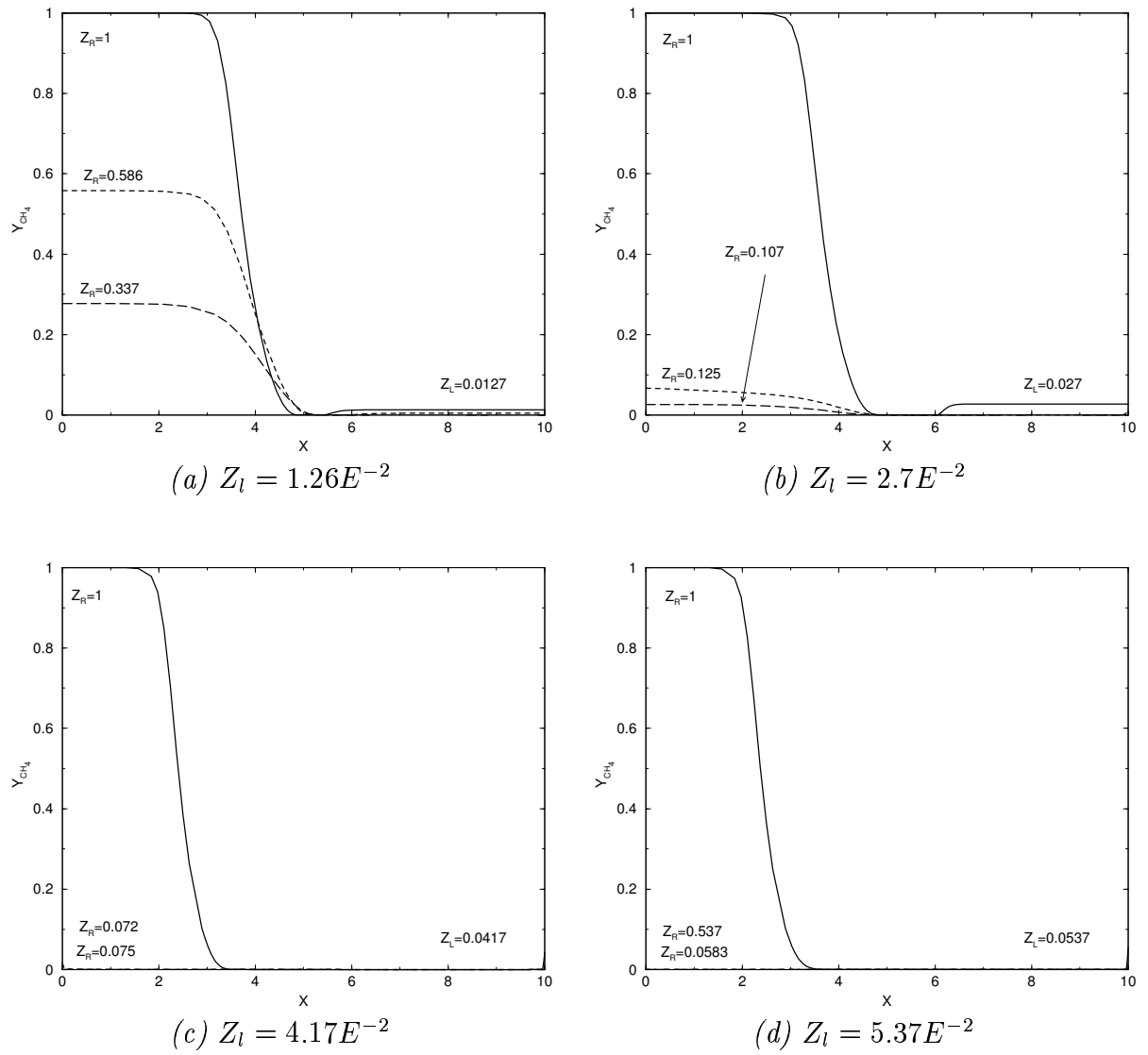


FIG. 3.33 – Fraction massique du CH_4 en fonction de la position de la flamme partiellement prémélangée (en cm). $c_{mel} = 0$ (trait plein), $c_{mel} = 0.5$ (pointillés), $c_{mel} = 1$ (longs pointillés). (a) Z_l éloigné de Z_{st} , (d) $Z_l \simeq Z_{st}$ et (b, c) mélanges intermédiaires.

Fractions massiques des espèces minoritaires (OH , H_2)

La fraction massique de OH est une espèce radicalaire sensible aux conditions de mélange des flammes partiellement prémélangées (figure 3.34 a et b). Sur la figure a, on observe que les maxima de OH diminuent lorsque les mélanges se rapprochent de la stœchiométrie et que sa formation et destruction dans les régions prémélangées pauvres (Z_l) sont d'autant plus rapides que le mélange est réactif. Sur la figure b, un comportement similaire est observé avec un maximum de OH (dans la zone de diffusion, $Z \simeq Z_{st}$) qui diminue. Cependant, OH subit de fortes variations dans les régimes prémélangés pauvre et riche avant de retomber sur un profil gaussien.

De même, sur la planche 3.35, on remarque une augmentation de OH dans les régimes prémélangés pour des mélanges de plus en plus réactifs ($a \rightarrow d$) et une diminution de ce radical dans le régime de diffusion.

Les profils de la molécule H_2 (planche 3.36) sont liés à la décomposition du combustible. Elle est donc fortement présente du côté riche. Les profils sont extrêmement voisins du monoxyde de carbone avec en moyenne un rapport 10 entre ces deux espèces ($Y_{H_2} \simeq Y_{CO}/10$).

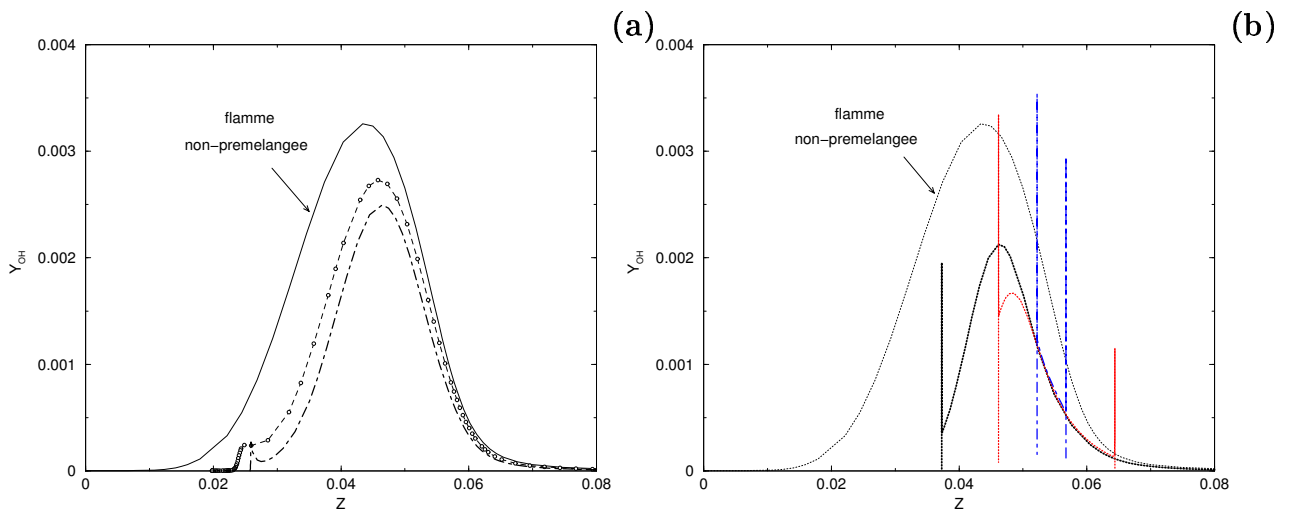


FIG. 3.34 – Fraction massique de OH en fonction de la fraction de mélange Z ($c_{mel} = 0.2$), d'une flamme de diffusion pure et pour différentes conditions de prémélange. (a) $Z_L = 0.024$ et 0.025 . (b) $Z_L = 0.036$; 0.045 et 0.051 .

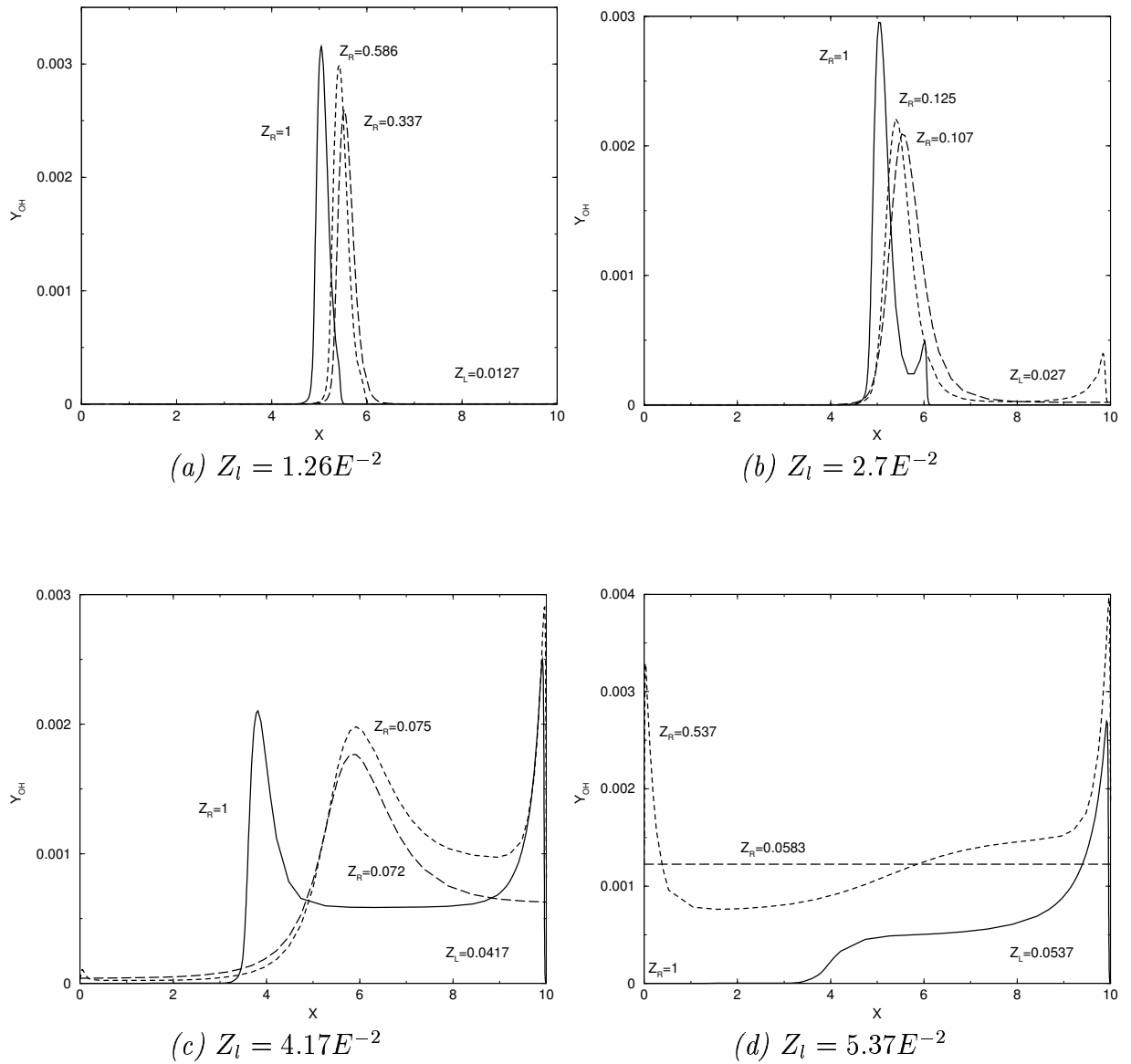


FIG. 3.35 – Fraction massique du OH en fonction de la position de la flamme partiellement prémélangée (en cm). $c_{mel} = 0$ (trait plein), $c_{mel} = 0.5$ (pointillés), $c_{mel} = 1$ (longs pointillés). (a) Z_l éloigné de Z_{st} , (d) $Z_l \simeq Z_{st}$ et (b, c) mélanges intermédiaires.

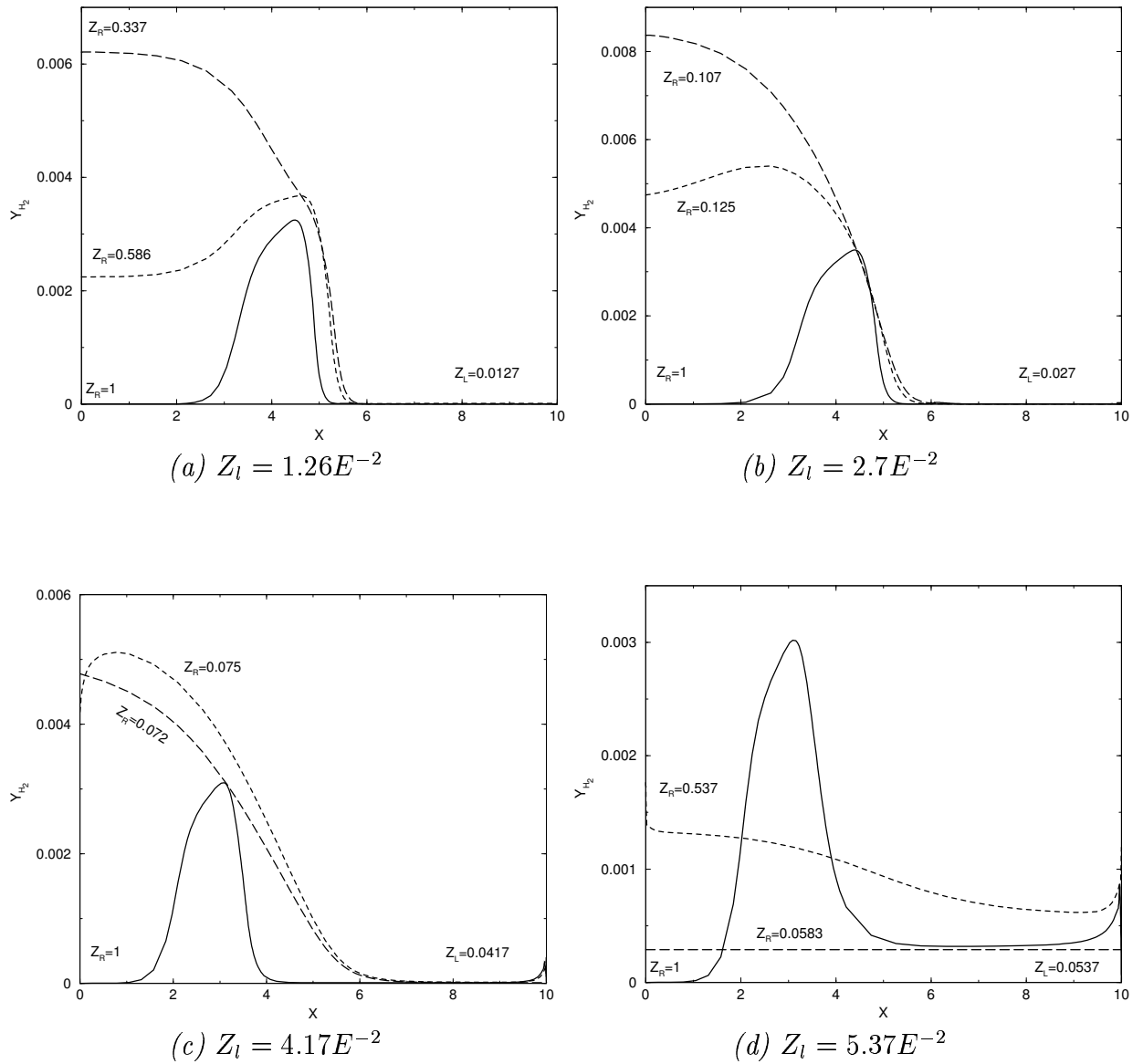


FIG. 3.36 – Fraction massique du H_2 en fonction de la position de la flamme partiellement prémélangée (en cm). $c_{mel} = 0$ (trait plein), $c_{mel} = 0.5$ (pointillés), $c_{mel} = 1$ (longs pointillés). (a) Z_L éloigné de Z_{st} , (d) $Z_L \simeq Z_{st}$ et (b, c) mélanges intermédiaires.

Fraction massique du monoxyde d'azote (Y_{NO})

La fraction massique du polluant (Y_{NO}) est souvent supérieure dans les flammes partiellement prémélangées que dans les flammes de diffusion non-prémélangées (figure 3.37) du fait des températures plus élevées. Les maxima sont obtenus proches de la stœchiométrie ($Z_{st} \simeq 0.055$). Bien que la formation de NO est fortement dépendante des fortes températures, ce n'est pas le seul paramètre. En effet, pour $c_{mel} = 0.2$, Y_{NO}^{max} est obtenue pour une flamme partiellement prémélangée ($Z_L = 0.045$) alors que les températures maximales sont obtenues pour $Z_L = 0.051$.

De plus, les prémélanges stœchiométriques ne sollicitent pas une formation maximale de NO (voir figure 3.37).

La fraction massique de NO dans les prémélanges est négligeable, sauf dans le cas où des gaz brûlés sont injectés en condition initiale ($c_{mel} \simeq 1$, équilibre chimique). La fraction massique de NO est tracée en fonction de la température pour des prémélanges à $c_{mel} = 1$ (figure 3.38). Là encore, les plus grandes variations de NO et les maxima sont observées pour un mélange proche de la stœchiométrie ($Z_L = 0.046$, $Z_R = 0.064$), mais pas égale à Z_{st} .

La fraction massique de NO est tracée dans l'espace physique pour différentes conditions de mélange (planche 3.39). Elle est majoritairement présente dans les zones pauvres de la flamme.

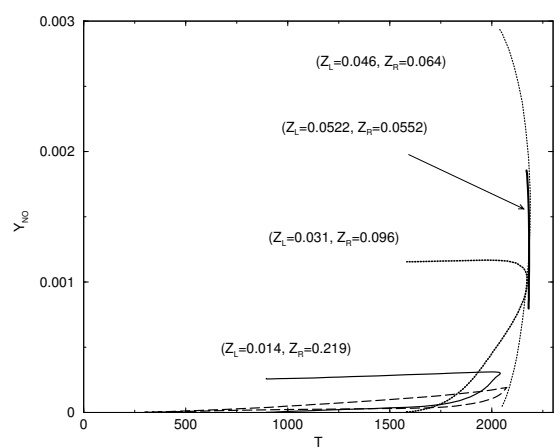
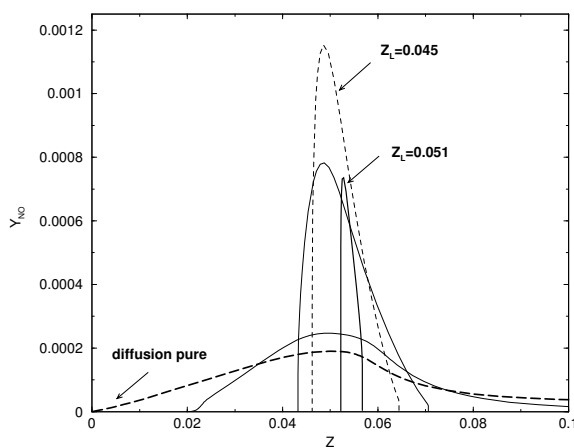


FIG. 3.37 – Y_{NO} en fonction de Z ($c_{mel} = 0.2$), pour les conditions de mélange : diffusion pure, $Z_L = 0.02$; 0.042 ; 0.045 ; 0.051 .

FIG. 3.38 – Fraction massique de NO en fonction de la température ($c_{mel} = 1$), pour différentes conditions de mélange.

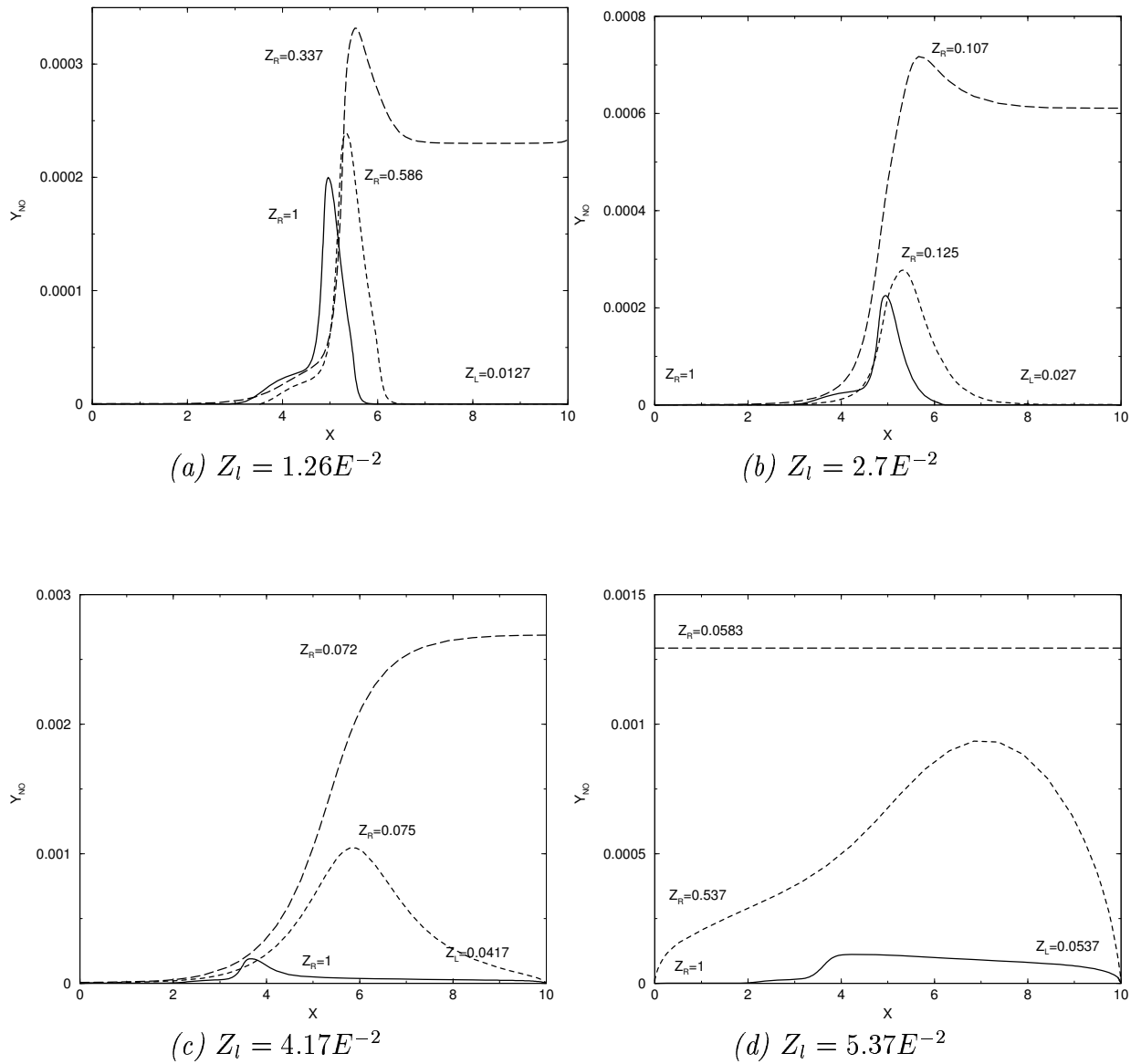


FIG. 3.39 – Fraction massique du NO en fonction de la position de la flamme partiellement prémélangée (en cm). $c_{mel} = 0$ (trait plein), $c_{mel} = 0.5$ (pointillés), $c_{mel} = 1$ (longs pointillés). (a) Z_l éloigné de Z_{st} , (d) $Z_l \simeq Z_{st}$ et (b, c) mélanges intermédiaires.

Conclusion

Les cinétiques chimiques complexes de la combustion dihydrogène/air et méthane/air ont été tabulées en tenant compte de tous les régimes de combustion (prémélange, diffusion, dilution par les produits de combustion, prémélange partiel froid).

L'influence de l'étirement a été mise en évidence dans les régimes partiellement prémélangés des flammes $H_2/He/air$. Notamment, les variations des grandeurs maximales des espèces chimiques ou de la température sont sensibles seulement pour les faibles étirements. La fraction massique de NO est l'espèce qui présente le maximum de variation. Enfin, les maxima (Y_i^{max} , T^{max}) des flammes partiellement prémélangées sont moins sensibles à l'étirement que les flammes de diffusion "pures".

Les structures chimiques des fronts de flammes partiellement prémélangées ont été étudiées et l'influence des richesses et des avancements a été mise en évidence sur les niveaux de température des fractions massiques des espèces chimiques. L'ensemble des résultats obtenus dans cette partie nous a permis de quantifier l'importance des différents régimes de combustion. Notamment, du point de vue chimie, il est difficile de ne pas tenir compte à la fois du régime prémélangé et du régime de diffusion dans les foyers aéronautiques.

Cependant, une tabulation de flammes partiellement prémélangées n'est pas envisageable en raison du nombre de variables indépendantes (mélanges pauvre et riche et étirement). Les temps de calcul de la méthode de tabulation deviennent alors trop longs. Pour cela, les méthodes de tabulation par des flammes prémélangées et de diffusion sont privilégiées.

Des tests réalisés à partir de mesures expérimentales effectuées dans des flammes turbulentes partiellement prémélangées permettent alors de compléter l'étude de la tabulation de flammes prémélangées (FPI).

Chapitre 4

Flammes prémélangées pour tabuler les flammes partiellement prémélangées

Les données expérimentales des flammes jets turbulentes de Sandia, étudiées par Barlow et Franck (Barlow and Frank., 1998), sont riches en résultats. Elles contiennent les principales concentrations instantanées des espèces chimiques (CH_4 , O_2 , N_2 , CO_2 , H_2O , CO , NO , OH , H_2) et la température, ce qui permet une cartographie complète des flammes turbulentes. La configuration est la suivante : un jet central de méthane partiellement prémélangé avec de l'air (25% vol. CH_4 , 75% vol. air) d'un diamètre $D=7.2$ mm est entouré par un ensemble de petites flammes pilotes pauvres ($\phi \approx 0.77$, $Z_s \approx 0.351$) d'un diamètre 18,2 mm. Ce brûleur est plongé dans un écoulement d'air (voir figure 4.1).

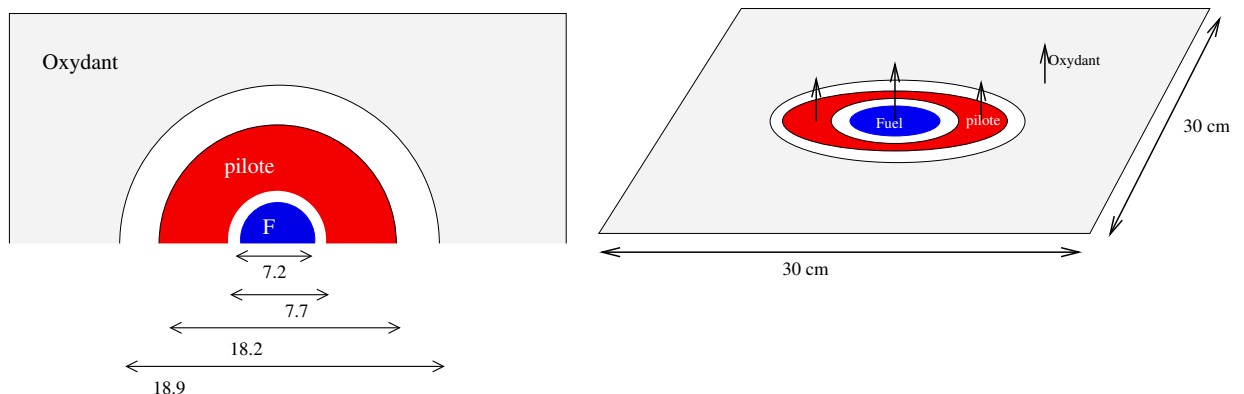


FIG. 4.1 – Brûleur axi-symétrique des flammes jets turbulentes de Sandia, diamètres en mm.

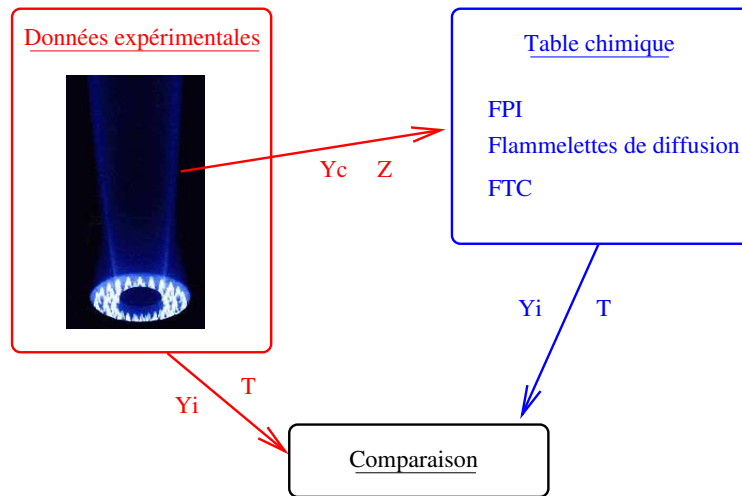


FIG. 4.2 – Méthode de comparaison entre les données expérimentales et les tables chimiques laminaires.

Les comparaisons sont réalisées sur deux types de flammes jets partiellement prémélangées :

- la flamme D : La vitesse débitante du jet central est 49,6 m/s, la vitesse du pilote est 11.4 m/s et celle de l'air à 0,9 m/s. Le nombre de Reynolds est de l'ordre de 22400.
- la flamme F : Les vitesses du jet central et du pilote sont multipliées par deux, augmentant ainsi les extinctions locales de la flamme. Le nombre de Reynolds est de l'ordre de 44800.

Il est possible de comparer les résultats expérimentaux aux tables laminaires FPI et de diffusion. Aucun modèle de turbulence n'intervient dans ces tests ; on ne s'intéresse ici qu'aux valeurs instantanées.

4.1 Méthode de comparaison

A partir de la variable de progrès Y_c et de la fraction de mélange Z expérimentales, il est possible d'extraire les résultats des tables chimiques laminaires. Les fractions massiques et la température des flammes turbulentes sont alors comparées aux calculs des flammes laminaires en chimie complexe (voir figure 4.2).

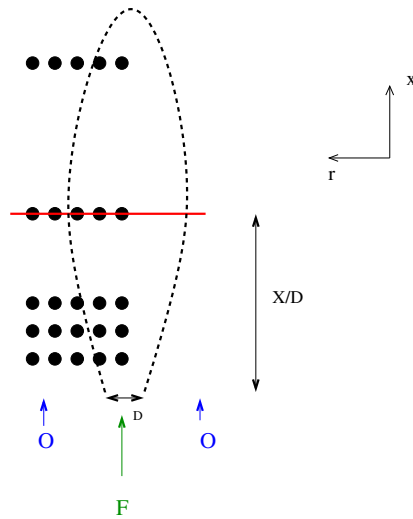


FIG. 4.3 – Schéma des positions des mesures expérimentales des flammes jets turbulentes de Sandia. La ligne rouge représente une position X/D sur laquelle les moyennes conditionnées sont effectuées. Les pointillés représentent le mélange stœchiométrique. Les positions axiales correspondant aux mesures expérimentales sont $X/D=3, 7.5, 15, 30, 45, 60, 75$.

4.2 Comparaisons Expérience / Diffusion / Prémélange, limitées aux domaines des flammelettes de diffusion à contre-courant

En chaque point de mesure d'expérience, une collection de 500 données instantanées (en moyenne) est disponible. Afin de faciliter les comparaisons, les moyennes conditionnées à Z sont tracées en fonction de la fraction de mélange pour chacune des positions axiales mesurées (voir figure 4.3).

Domaine de calcul :

- Dans la flamme de diffusion turbulente expérimentale, la fraction de mélange varie entre 0 et 1, alors que la table de prémélange est limitée par les limites d'inflammabilité. Les résultats seront donc tracés dans ces limites ($0, 15 < Z < 0, 6; Z_{st} = 0.351$).
- La collection des flammes à contre-courant est limitée par l'extinction soit une valeur de $Y_c^q(Z)$.

Finalement, les moyennes conditionnées ne correspondent pas aux moyennes réelles puisqu'il existe certains points pour lesquels $Y_c < Y_c^q$ qui ne sont pas comptabilisés. Cette méthode permet simplement de valider les méthodes de tabulation dans le domaine $Y_c^q(Z) < Y_c < Y_c^{eq}(Z)$, donc au-dessus du point d'extinction des flammelettes laminaires.

De grandes différences de concentration de CO entre les régimes de combustion prémélangé et de diffusion en laminaire ont été mises en évidence dans la première partie. Les comparaisons se focalisent donc sur le monoxyde de carbone. Les résultats sont reportés sur les figures 4.4 et 4.5. Les moyennes conditionnées du CO sont tracées en fonction de la fraction de mélange pour la flamme D (figures de gauche) et la flamme F (figures de droite) à différentes hauteurs du brûleur. La tabulation des flammes de diffusion (trait plein) est plus proche de l'expérience que FPI (pointillés). Les niveaux du côté riche de la flamme ($Z > Z_{st} = 0,351$) sont deux fois plus forts dans les flammes prémélangées que dans les flammes de diffusion comme il a été observé dans les chapitres précédents. A la stœchiométrie, les résultats entre les deux méthodes de tabulation sont très proches et correspondent aux niveaux atteints par l'expérience. Loin du brûleur, $X/D > 45$, (figure 4.5) les effets de prémélange partiel sont plus importants, ayant pour conséquence une amélioration des résultats issue de la tabulation FPI.

Il est important de noter que les différences entre les flammes D et F ne sont pas marquées car les moyennes conditionnées sont réalisées dans le domaine limité par les flammelettes de diffusion ($Y_c > Y_c^q$).

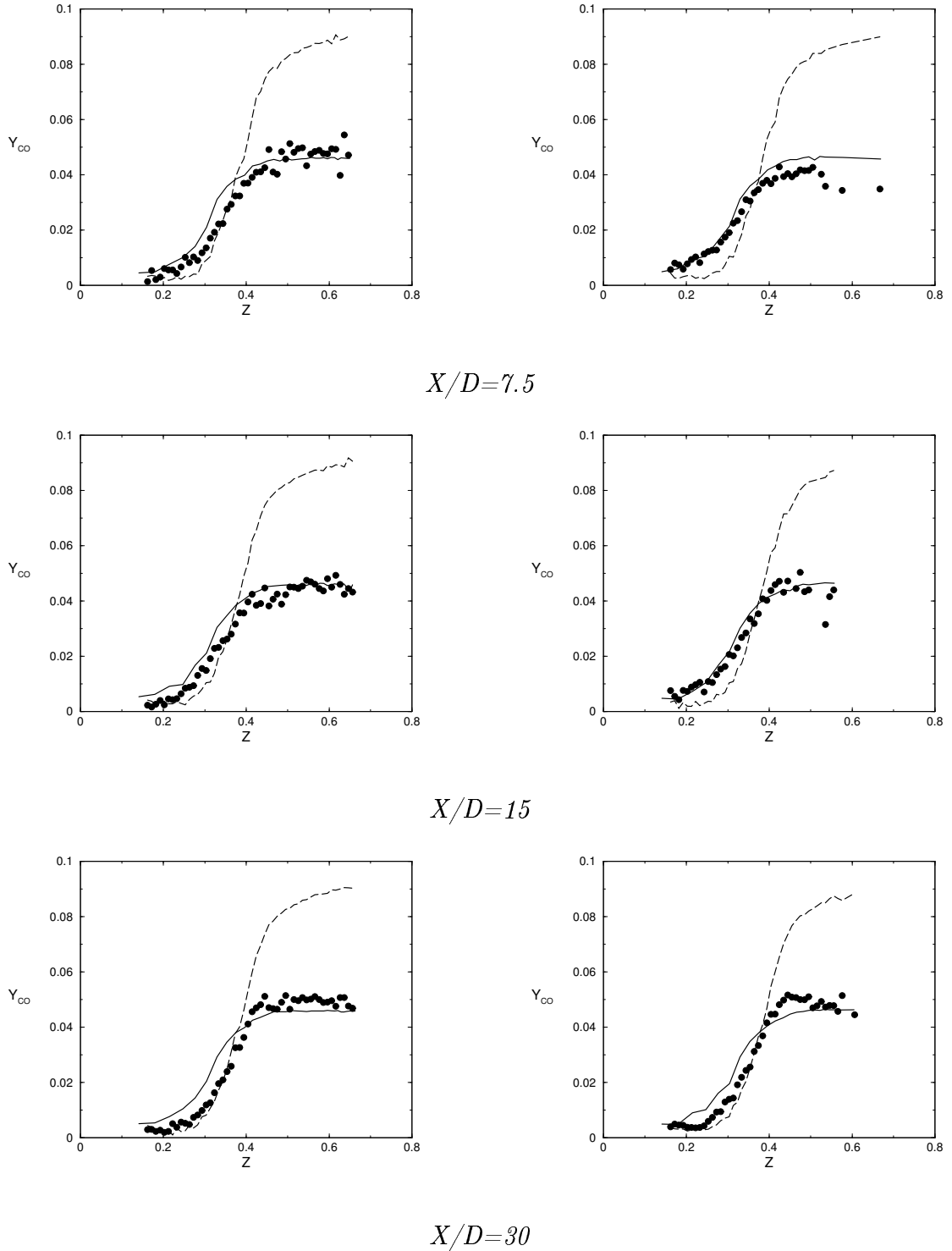


FIG. 4.4 – Moyennes conditionnées (si $Y_c > Y_c^q$) de la fraction massique de CO, $\overline{(CO|Z)}$, en fonction de la fraction de mélange Z à différentes hauteurs du brûleur. cercles : expérience, pointillé : FPI, trait : diffusion. A gauche : flamme D ; à droite : flamme F.

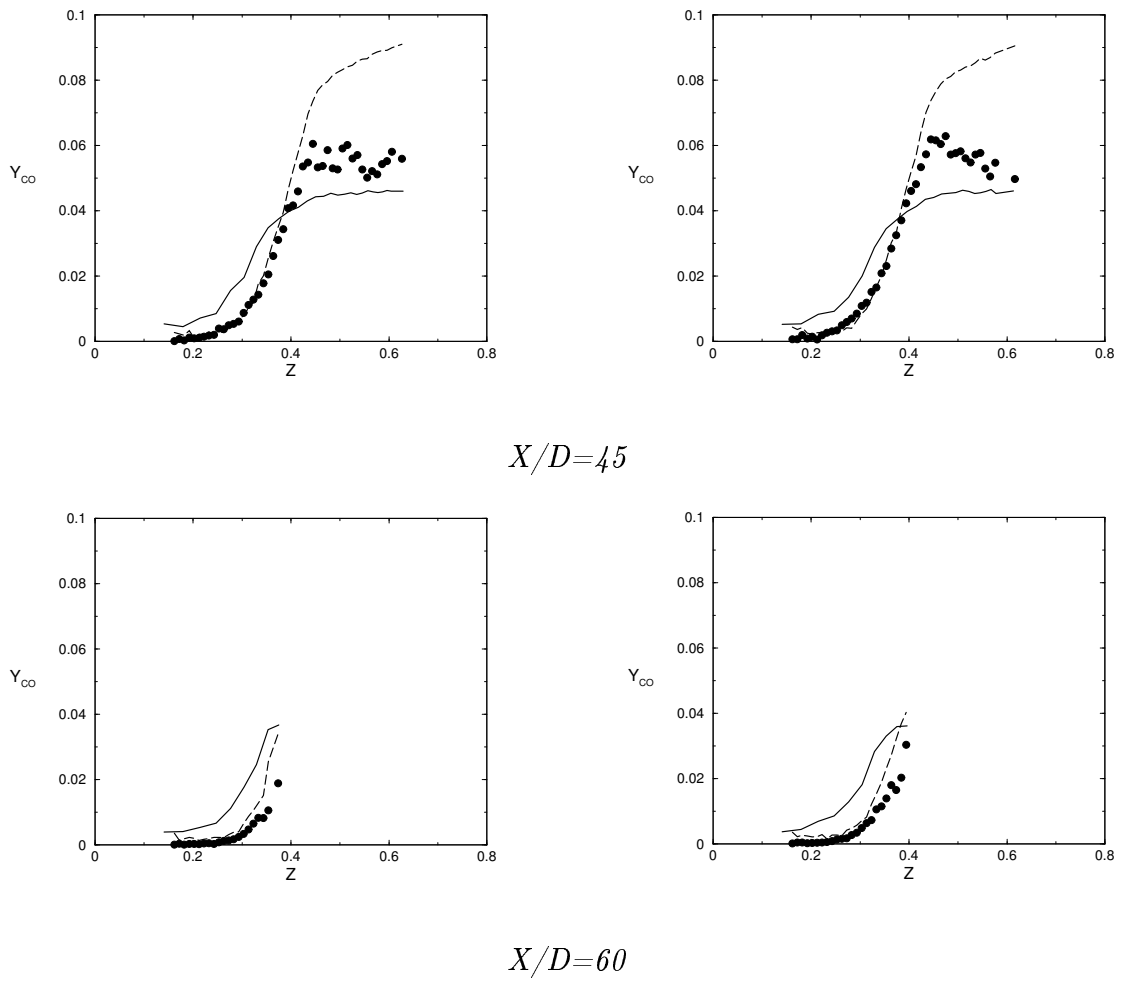


FIG. 4.5 – Moyennes conditionnées (si $Y_c > Y_c^q$) de la fraction massique de CO, $\overline{(CO|Z)}$, en fonction de la fraction de mélange Z à différentes hauteurs du brûleur. cercles : expérience, pointillé : FPI, trait : diffusion. A gauche : flamme D ; à droite : flamme F.

4.3 Expérience / FPI

Dans cette partie, la méthode FPI est comparée à l'expérience pour tous les points de mesures Y_c allant de 0 à l'équilibre chimique. Les points peuvent donc se situer en dessous de la limite d'extinction des flammelettes de diffusion. Il s'agit ici des vraies moyennes conditionnées du CO. Les résultats sont tracés sur les figures 4.6 et 4.7. En comparant avec l'étude précédente on observe que les niveaux sont nettement plus faibles (par exemple en $X/D = 15$; figures 4.4 et 4.6). La méthode de tabulation par des flammes de diffusion à contre-courant est donc limitée aux flammes faiblement turbulentes ayant peu d'extinction locale.

- La méthode de tabulation FPI prédit avec précision la concentration de CO dans la partie pauvre de la flamme ($Z < Z_{st} = 0,351$).
- Les tendances sont respectées dans la partie riche. On observe bien une diminution du CO pour les fractions de mélange supérieures à 0,45, contrairement à ce qui a été obtenu par la tabulation de flammes à contre-courant. Ce résultat montre qu'une quantité importante de fractions massiques de Y_c est inférieure à la limite d'extinction. Cette quantité est d'autant plus importante dans la flamme F ($U_F = 100$ m/s) que la flamme D ($U_F = 50$ m/s). Les trois facteurs qui expliquent ces résultats sont :
 - les effets de chimie non-infiniment rapide, qui sont d'autant plus marqués que l'écoulement est turbulent,
 - le prémélange partiel, qui permet d'obtenir des mélanges à toutes les valeurs de Y_c allant de 0 à l'équilibre.
 - les extinctions locales pour lesquelles $Y_c = 0$.
- Les niveaux atteints par la méthode FPI surestiment dans la zone riche d'un rapport 2 les valeurs expérimentales, ce qui, encore une fois, a déjà été observé dans l'étude des flammes laminaires (chapitre 1).

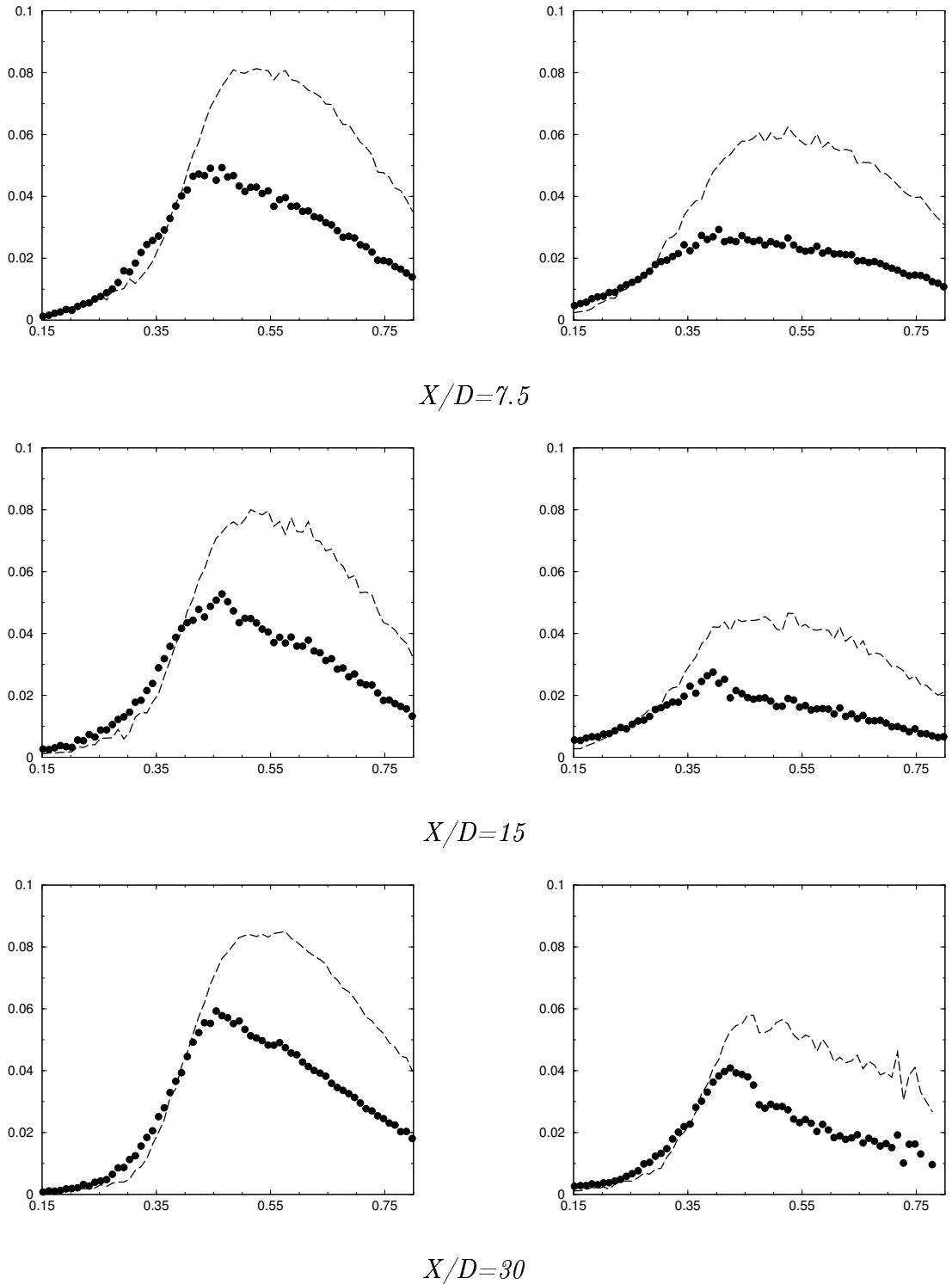


FIG. 4.6 – Moyennes conditionnées de la fraction massique de CO, $\overline{(CO|Z)}$, en fonction de la fraction de mélange Z à différentes hauteurs du brûleur. cercles : expérience, pointillé : FPI. A gauche : flamme D ; à droite : flamme F.

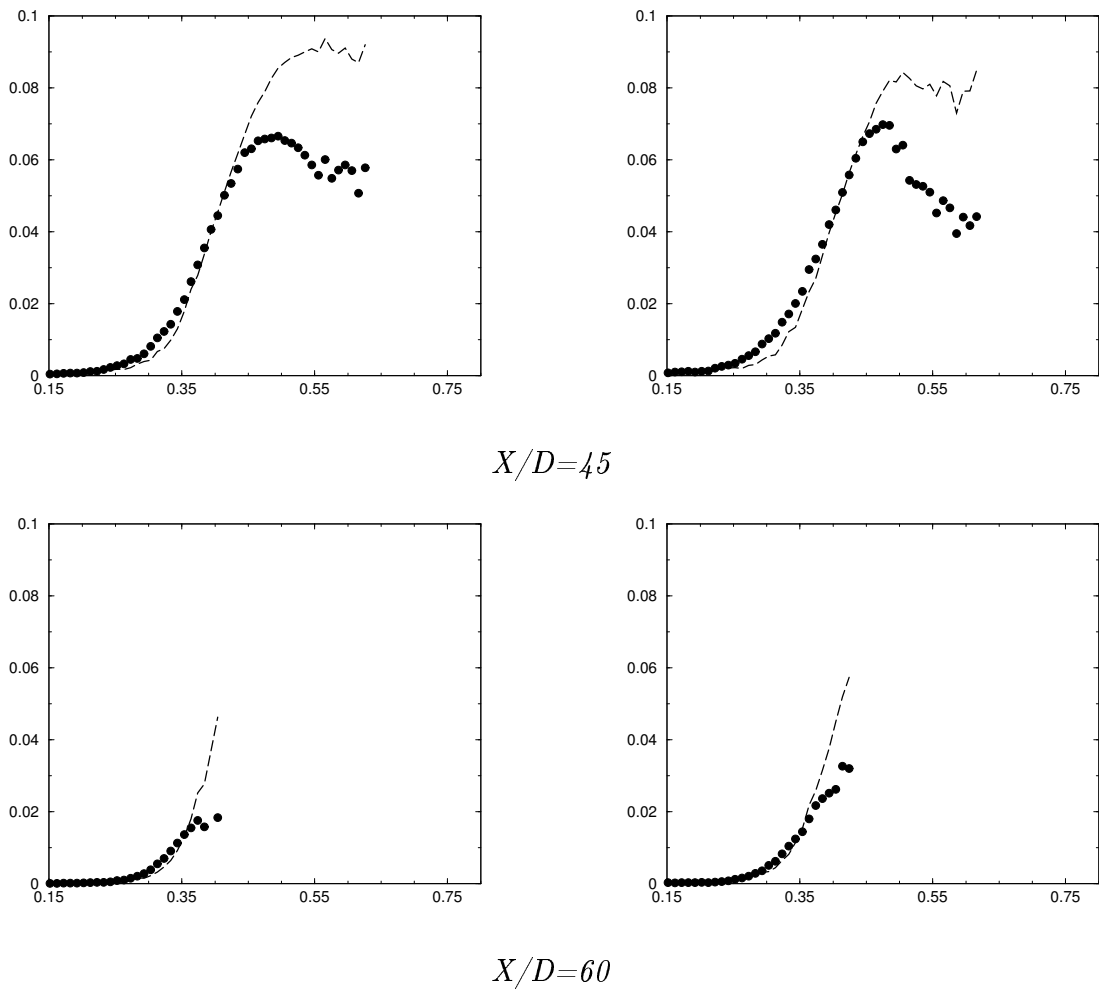


FIG. 4.7 – Moyennes conditionnées de la fraction massique de CO, $\overline{(CO|Z)}$, en fonction de la fraction de mélange Z à différentes hauteurs du brûleur. cercles : expérience, pointillé : FPI. A gauche : flamme D ; à droite : flamme F.

Conclusion

Ces résultats montrent les limites des tabulations par des flammes laminaires prémélangées (FPI) et à contre-courant dans des régimes de combustion turbulents partiellement prémélangés. Cependant, chacune de ces tabulations apporte des informations complémentaires.

- Les niveaux sont correctement retrouvés par les flammes de diffusion si $Y_c > Y_c^q$,
- les tendances des moyennes conditionnées sont prédites par les flammes prémélangées.

L'idée du chapitre suivant sera donc de coupler ces deux méthodes de tabulation afin d'en extraire tous les avantages.

Chapitre 5

Méthode de tabulation FTC, Flame Tabulated Chemistry

5.1 Génération de la table

Dans les chapitres précédents, il a été montré que les méthodes de tabulation des flammes prémélangées (FPI ou FGM) peuvent difficilement reproduire la distribution d'espèces chimiques ayant une cinétique lente (NO, CO dans la zone riche de la flamme). Une alternative consiste à coupler les deux méthodes de tabulation. Pour cela, on construit une fonction afin de recalculer les niveaux obtenus par les flammes prémélangées à ceux des flammes de diffusion. Cette fonction $\alpha(Z, Y_c)$ est donc calculée à partir des tables FPI et des flammelettes de diffusion $Y_i^D(Z, \chi_Z)$. χ_Z étant le taux de dissipation scalaire de Z. Pour chaque point dans les flammes de diffusion, défini par les deux paramètres de contrôle (Z, χ_Z) , une variable de progrès $Y_c = Y_{CO_2} + Y_{CO}$ est déterminée pour créer le lien avec la table FPI. Alors, pour chaque espèce, les rapports entre la réponse de la flammelette de diffusion et les flammes prémélangées sont stockés :

$$\alpha_i(Z, Y_c^D(Z, \chi_Z)) = \frac{Y_i^D(Z, \chi_Z)}{Y_i^{FPI}(Z, Y_c^D(Z, \chi_Z))} \quad (5.1)$$

Pour chaque couple (Z, χ_Z) des flammes de diffusion il n'existe qu'un seul couple correspondant (Z, Y_c^D) . Ainsi, une fois α_i connue, la détermination de Y_c et Z est suffisante pour extraire le vecteur de concentration des flammes de diffusion à partir de la table FPI. Avec l'équation 5.1, la fonction α_i est indéterminée au-delà des limites d'extinction des flammes à contre-courant. Une première approximation consiste à garder constante la valeur de α_i en dessous de la limite d'extinction. Cette constante est fixée par la réponse de la flamme de diffusion juste avant son extinction. La tabulation FTC est alors construite de la manière suivante :

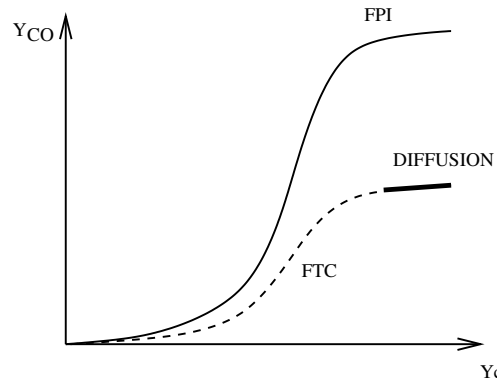


FIG. 5.1 – Schéma représentatif de la fraction massique de CO en fonction de la variable de progrès Y_C à richesse fixée supérieure à la stœchiométrie. trait plein : FPI, pointillés : FTC, trait épais : collection de flammes de diffusion à contre-courant.

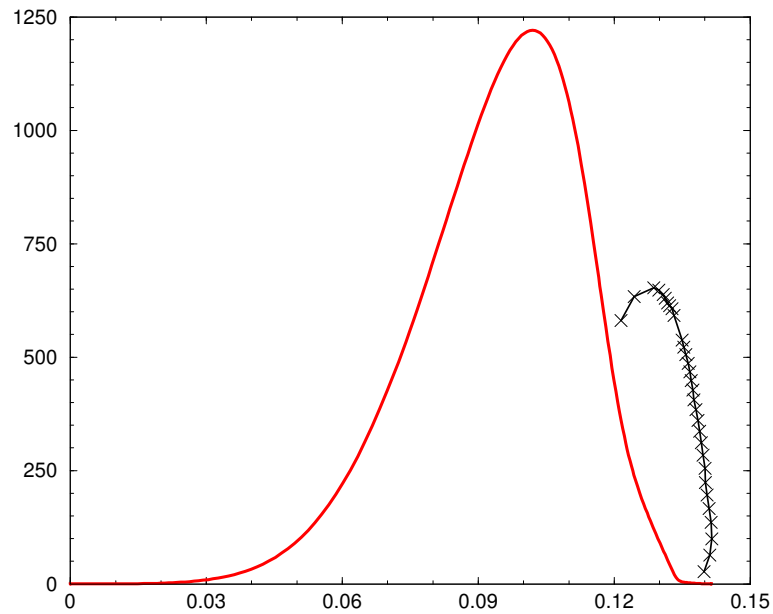


FIG. 5.2 – Taux de réaction ω_{Y_C} (en s^{-1}) en fonction de Y_C , à la stœchiométrie. Trait rouge : FPI. Trait noir avec symboles : collection de flamme de diffusion à contre-courant.

$$Y_i^{FTC}(Z, Y_c) = \alpha_i(Z, Y_c)Y_i^{FPI}(Z, Y_c) \quad (5.2)$$

Le schéma 5.1 représente la fraction massique du CO dans une flamme riche en fonction de la variable de progrès pour les tabulations FPI, flammelettes de diffusion et FTC. La correction via le paramètre α_i est utilisée sur toutes les variables. Elle est proche de 1 pour certaines espèces chimiques (l'eau) et pour la température. En revanche, elle modifie considérablement les résultats pour des espèces intermédiaires (H_2 , OH), ou d'autres produits de combustion (CO_2 , CO).

Cette procédure peut être vue sous deux angles :

- Corriger les niveaux des flammes prémélangées par des flammes à contre-courant dans le but de retrouver les résultats des flammes de diffusion.
- Prolonger les flammes de diffusion dans le domaine d'extinction des flammelettes par des flammes prémélangées.

Les espèces et la température étant déterminées, il ne reste qu'un seul paramètre à extraire des flammes laminaires : le taux de réaction chimique de Y_c , $\dot{\omega}_{Y_c}$.

$$\dot{\omega}_{Y_c} = \dot{\omega}_{Y_{CO_2}} + \dot{\omega}_{Y_{CO}} \quad (5.3)$$

Celui-ci est indispensable dans la modélisation de la combustion turbulente proposée dans ce mémoire.

Ce taux de réaction est tracé sur la figure 5.2 en fonction de la variable de progrès Y_c et pour un mélange stœchiométrique. Pour $Y_c < 0.12$, le taux de production de Y_c n'est pas défini dans les flammelettes de diffusion, car ces points sont en dessous de l'avancement à l'extinction $c \simeq 0.85$. Donc à cette richesse, pour $0 < Y_c < 0.12$, on opte pour la tabulation FPI. Dans la mesure où le prémélange partiel riche joue un rôle important dans le calcul du dégagement de chaleur au sein d'une chambre de combustion aéronautique, FPI est conservée pour estimer $\dot{\omega}_{Y_c}$, au dessus de $Y_c \simeq 0.12$. Il est aussi important de noter que les niveaux de Y_c maximums atteints dans les flammes de diffusion et de prémélange sont identiques sur l'ensemble des fractions de mélange. $Y_c \simeq 0.12$ ($c \simeq 0.85$) correspond au point d'extinction des flammelettes de diffusion où les flammes de prémélange et de diffusion dégagent la même quantité de chaleur.

De plus, la tabulation FTC permet de corriger les niveaux des flammes prémélangées dans les parties riches de la flamme, or la réaction a lieu dans une zone proche de la stœchiométrie ; une première approche consiste donc à extraire directement le taux de réaction de Y_c de la table FPI. Ce choix sera validé a posteriori par comparaison entre les

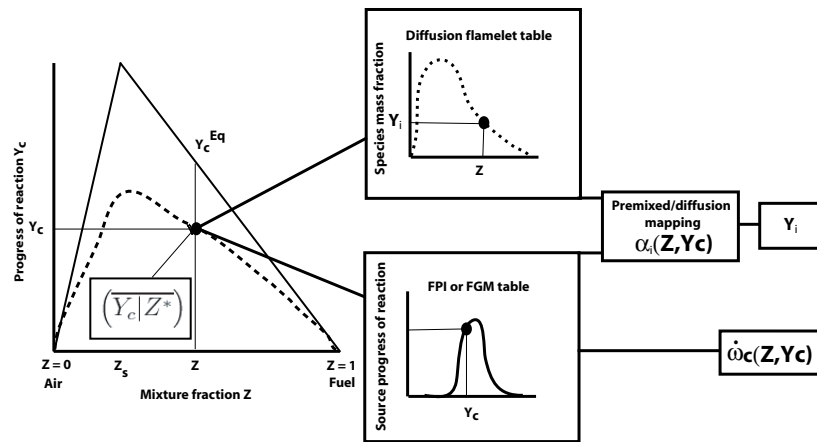


FIG. 5.3 – Procédure FTC d'accès aux fractions massiques des espèces chimiques Y_i et du taux de réaction $\dot{\omega}_{Y_c}$ à partir des tables FPI et flammelettes de diffusion.

prédictions RANS et les mesures expérimentales.

Cette procédure de création d'une nouvelle tabulation de la chimie, FTC, dans la zone riche de la flamme est résumée sur la figure 5.3.

5.2 Comparaison FTC / Expérience

Cette méthode de tabulation est maintenant testée en post-traitant les données expérimentales comme précédemment pour les tabulations FPI (voir chapitre 4, page 110). La fraction massique de CO conditionnée à Z^* est tracée sur les figures 5.4 et 5.5 en fonction de la fraction de mélange pour les flammes D (à gauche) et F (à droite). Les résultats expérimentaux sont comparés à la tabulation FPI (pointillés), et à la tabulation FTC (ligne).

Les résultats sont globalement en bon accord avec l'expérience à toutes les positions des flammes jets turbulentes. La diminution du CO entre la flamme D et F est bien prédite. Une sous-estimation importante de la fraction massique du CO est observée pour $Z=0.4$, notamment à la position $X/D=45$ (figure 5.5) caractéristique d'un régime de diffusion sans prémélange.

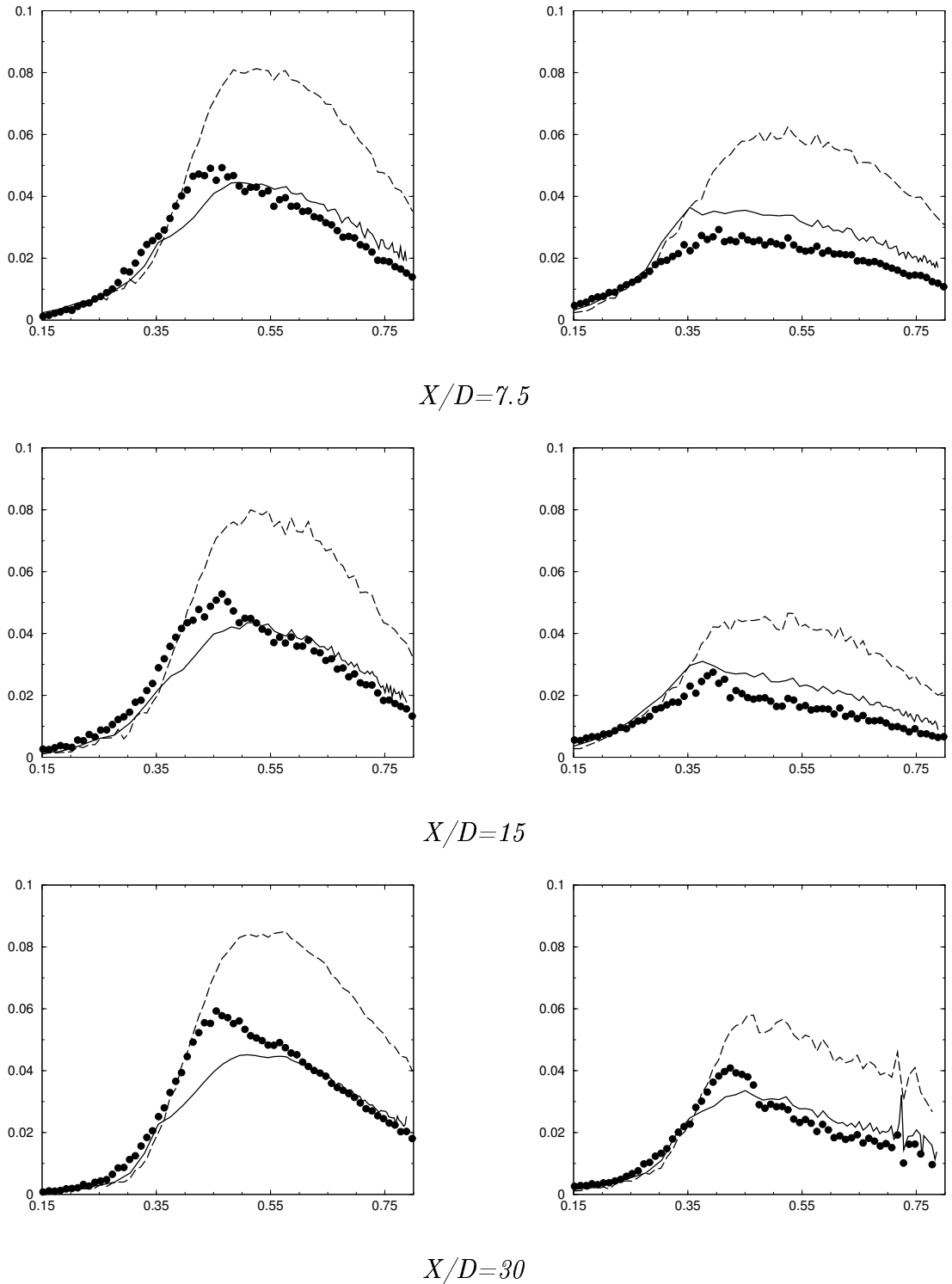


FIG. 5.4 – Moyennes conditionnées de la fraction massique de CO en fonction de la fraction de mélange Z à différentes hauteurs du brûleur. Cercles : expériences, pointillés : FPI, trait : FTC. A gauche : flamme D ; à droite flamme F.

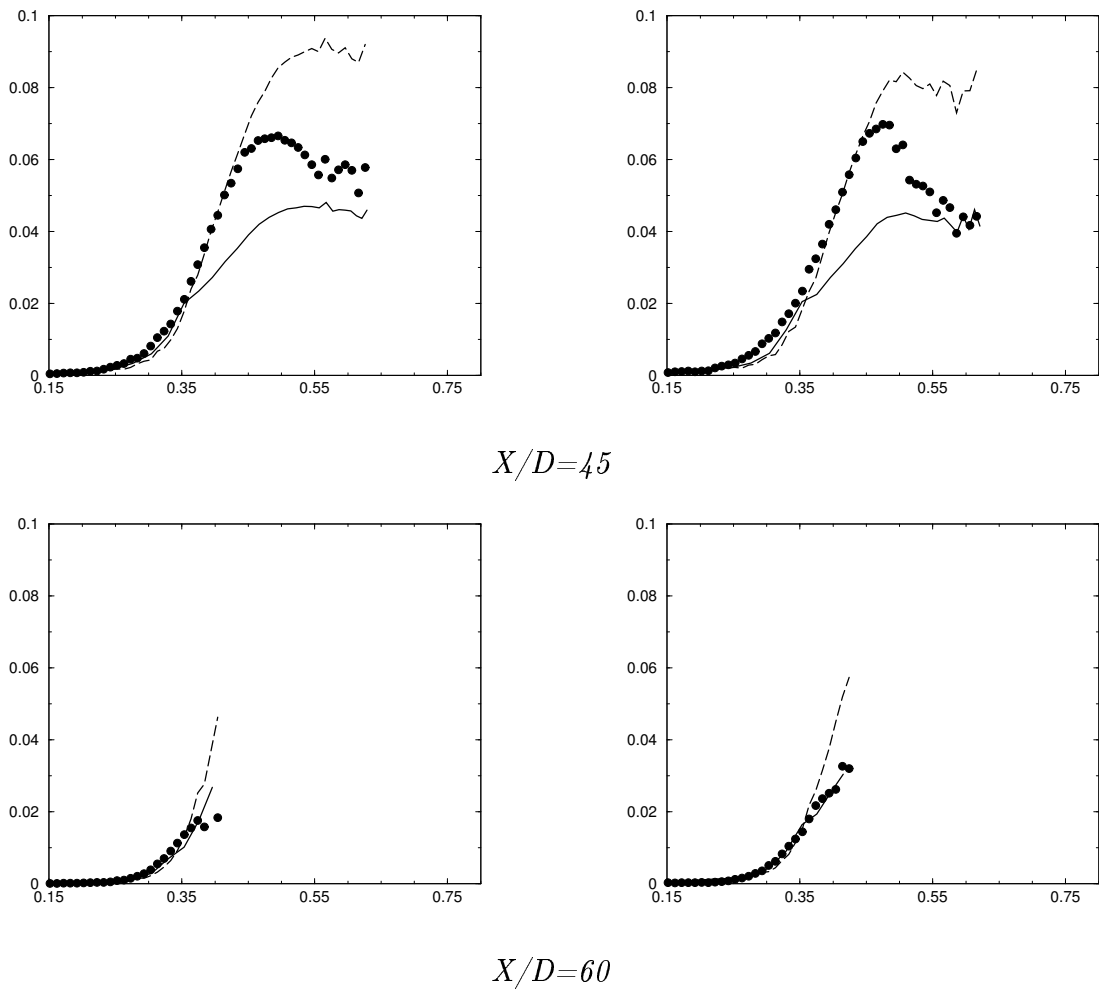


FIG. 5.5 – Moyennes conditionnées de la fraction massique de CO en fonction de la fraction de mélange Z à différentes hauteurs du brûleur. cercles : expériences, pointillés : FPI, trait : FTC. A gauche : flamme D ; à droite flamme F.

Chapitre 6

Conclusion de la première partie

La simulation des flammes turbulentes se développant dans des systèmes de combustion dont la géométrie est complexe, implique une tabulation, préalable aux calculs, des phénomènes liés à la cinétique chimique. Différentes options sont possibles pour réaliser ces tables. Certaines utilisent une approche purement cinétique (schémas réduits, ILDM, ISAT), d'autres associent la cinétique à des phénomènes de transport (flammelettes de diffusion ou prémélangées FPI, FGM).

Nous avons examiné les possibilités de tabulation des systèmes non-prémélangés à partir des flammelettes de prémélange. Une première série d'analyse consiste à comparer le vecteur de concentrations en un point d'une flamme de diffusion à contre-courant avec celui obtenu dans une flamme prémélangée, dont la richesse est celle mesurée localement dans la flamme de diffusion. La position à travers la flamme prémélangée est déterminée par l'avancement, identique à celui du point de flamme de diffusion. Il est montré que les flux à travers les lignes iso-richesse limitent la capacité de prédiction de la tabulation prémélangée. En revanche, cette comparaison systématique entre la flamme de diffusion et de prémélange suggère une projection, essentiellement active du côté riche, de la réponse des flammes de prémélange vers celles de diffusion. Cette approche est particulièrement attrayante pour la prise en compte des phénomènes de prémélange partiel, inaccessibles aux flammelettes de diffusion. Les deux tabulations prémélangée et diffusion sont alors combinées pour décrire les phénomènes cinétiques dans les flammes partiellement prémélangées.

Des tests sont ensuite réalisés à partir de mesures effectuées au laboratoire de Sandia (Californie) dans des flammes jets non-prémélangées turbulentes. Ils confirment la viabilité de la tabulation hybride prémélange / diffusion. Cette approche est appelée "Flame Tabulated Chemistry", FTC. Les paramètres de contrôle de cette tabulation sont la fraction de mélange, Z , utilisée pour mesurer la richesse locale, ainsi qu'une variable

d'avancement, c , construite à partir des fractions massiques de CO et CO_2 .

La stratégie de tabulation étant maintenant fixée, il est nécessaire de la coupler aux phénomènes de turbulence.

Deuxième partie

MODÉLISATION DE LA COMBUSTION TURBULENTE

1 Introduction

Une procédure de tabulation a été définie dans la partie précédente. Nous allons maintenant chercher à moyenner la réponse de la table hybride prémélange / diffusion, afin de décrire le comportement moyen des flammes turbulentes.

La moyenne conditionnée de la variable de progrès $(\overline{Y_c|Z^*})$ est utilisée comme paramètre de contrôle pour approximer les fractions massiques moyennes des espèces chimiques et la température moyenne à partir de la table FTC. La moyenne conditionnée est définie par :

$$\left(\overline{Y_c|Z^*}\right) = \int_0^1 Y_c^* \overline{P}(Y_c^*|Z^*) dY_c^* \quad (1)$$

Où $\overline{P}(Y_c^*|Z^*)$ est la fonction de densité de probabilité (pdf) conditionnée de Y_c pour une valeur donnée de Z^* . Cette pdf conditionnée apparaît après décomposition de $\tilde{P}(Z^*, Y_c^*)$, la pdf jointe de Y_c et Z , avec la relation :

$$\tilde{P}(Z^*, Y_c^*) \simeq \overline{P}(Y_c^*|Z^*) \tilde{P}(Z^*) \quad (2)$$

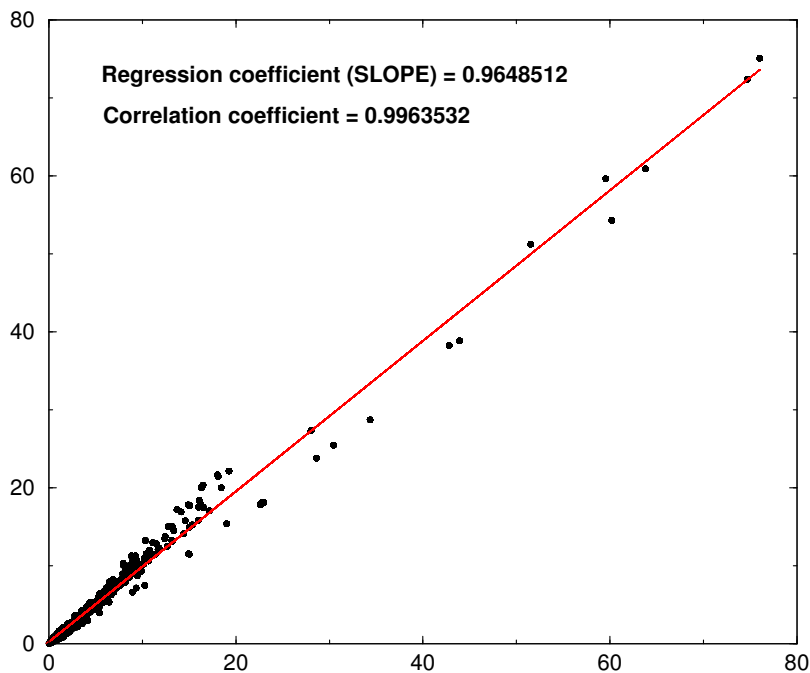


FIG. 1 – $\bar{\rho}\tilde{P}(z, c)$ en fonction de $\bar{\rho}\overline{P}(c^*|Z^*)\tilde{P}(Z)$ en tous les points des flammes D et F.

Cette relation néglige les corrélations entre la fraction de mélange, Z , et de l'avancement, c , lors du calcul de la densité. Ces deux expressions sont tracées pour toutes les

positions des mesures expérimentales de la flamme F (voir figure 1). Les calculs des pdfs sont obtenus en discrétisant la fraction de mélange et l'avancement de la réaction par pas de 0.1. La régression linéaire montre que cette hypothèse (équation 2) n'influence que minoritairement les résultats (le coefficient de régression étant de 0.964 et le coefficient de corrélation égale à 0.996).

Le long d'une iso-surface de fraction de mélange, la variable de progrès évolue entre zéro et son équilibre $Y_c^{Eq}(Z)$. Il est donc possible de normaliser Y_c par $Y_c^{Eq}(Z)$ pour définir une variable d'avancement c :

$$c = \frac{Y_c}{Y_c^{Eq}(Z)} \quad (3)$$

Dans une flamme turbulente, $(\overline{Y_c|Z^*})$, la moyenne conditionnée de Y_c peut être écrite :

$$(\overline{Y_c|Z^*}) = (\overline{c|Z^*}) Y_c^{Eq}(Z^*) \quad (4)$$

La moyenne conditionnée $(\overline{c|Z^*})$ reste indéterminée. Il faut donc fermer ce terme. L'hypothèse selon laquelle la variable d'avancement c serait statistiquement indépendante de Z est maintenant discutée. L'étude se porte sur une analyse d'une DNS de Vervisch et al (Vervisch., 1992) et sur l'exploitation des données expérimentales des flammes jets turbulentes de Sandia.

2 Comportement statistique de $(\overline{c|Z^*})$

2.1 Analyse d'une DNS

Les calculs de DNS de flammes de diffusion (Vervisch., 1992), qui interagissent avec une turbulence décroissante, ont montré qu'il existe des conditions dans lesquelles la pdf conditionnée $\overline{P}(c^*|Z^*)$ est faiblement dépendante de Z . Cette pdf, $\overline{P}(c^*|Z^*)$, est tracée sur la figure 2 en fonction de la variable d'avancement pour plusieurs valeurs de la fraction de mélange. La variable d'avancement est ici dérivée de la concentration d'oxygène :

$$c = \frac{Y_{O_2} - Y_{O_2,min}}{Y_{O_2,max} - Y_{O_2,min}}$$

Une hypothèse d'une chimie à une étape est adaptée. La surface stœchiométrique est localisée à $Z_s = 0.5$.

Les résultats montrent qu'au-delà des limites d'inflammabilité la forme de la pdf est faiblement dépendante du mélange et donc $\overline{P}(c^*|Z^*) \approx \overline{P}(c^*)$.

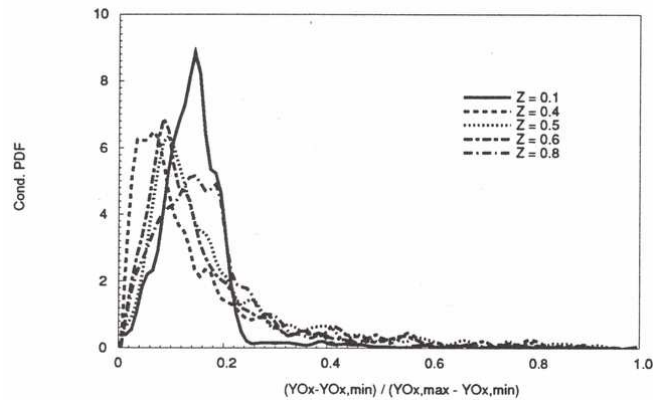


FIG. 2 – PDF conditionnée $\overline{P}(c^*|Z^*)$ extrait d'une DNS pour différentes valeurs de Z^* (Vervisch., 1992).

Toutefois, ces observations obtenues sur des DNS où la chimie est très simplifiée ne permettent pas de conclure quant à la validité de cette hypothèse dans le cas d'un hydrocarbure complexe. L'exploitation des données expérimentales des flammes turbulentes suivantes va nous permettre d'apporter un complément d'information.

2.2 Étude des flammes jets turbulentes expérimentales

2.2.1 Définition de l'équilibre de Y_c pour l'expérience

La variable d'avancement, c , est normalisée par la variable de progrès à l'équilibre chimique, $Y_c^{eq}(Z)$. Cet état d'équilibre est calculé à partir des données expérimentales et non par la minimisation de la fonction de Gibbs afin de rester cohérent avec l'analyse. L'équilibre chimique est alors défini par les valeurs maximales de Y_c issues des flammes D, E et F pour chaque fraction de mélange. La différence entre ces deux définitions est tracée sur la figure 3. La surestimation expérimentale de l'équilibre chimique dans la zone pauvre est attribuée aux incertitudes de mesure sur Y_c . Pour Z voisin de 0.5, un suréquilibre de Y_c expérimental est observé allant dans le sens des résultats obtenus sur la moyenne conditionnée du CO, dans le chapitre 5.2, page 123. Enfin, en $Z=1$ le mélange est constitué de 77 % de méthane et 23 % d'air (Barlow and Frank., 1998), ce qui correspond à un équilibre chimique $Y_c^{eq}(Z = 1) = 0.27$ (trait). Expérimentalement la réaction est très faible d'où $Y_c^{eq}(Z = 1) \simeq 0$.

2.2.2 Corrélation entre c et Z

L'étude est réalisée en exploitant les données expérimentales des flammes turbulentes D et F de Sandia (Barlow and Frank, 2003b; Barlow and Frank., 1998). Les positions

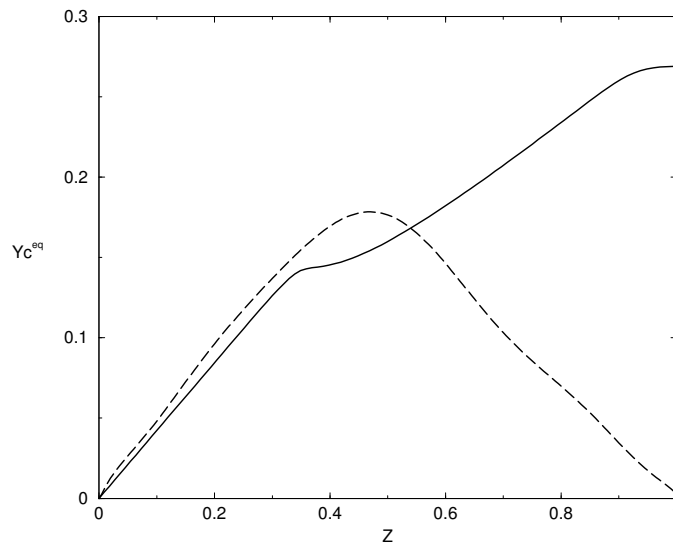


FIG. 3 – Définition de l'équilibre chimique pour la variable de progrès Y_c^{eq} en fonction de la fraction de mélange Z . expérience (pointillés), Minimisation de la fonction de Gibbs (trait plein). Le combustible initial est un prémélange méthane / air dans les proportions volumiques respectives 77 % et 23 %. La fraction de mélange pour cette condition d'entrée est $Z=1$.

de mesures axiales sont rappelées sur la figure 4. Sachant que les pdfs conditionnées, $\overline{P}(c^*|Z^*)$ représentent une information locale (positions x et r fixées), elles ne sont pas calculées en toutes les positions radiales mais seulement pour 3 positions radiales à toutes les positions X/D mesurées (7,5 ; 15 ; 30 ; 45). Les 3 positions radiales sont déterminées pour des valeurs de Z instantanées proches de 1 de 0 et de 0,5 (voir figure 5). Les cercles correspondent au choix des positions pour lesquelles les pdfs seront tracées (figures 6 et 7).

Le calcul des pdfs $\overline{P}(c^*|Z^*)$ est réalisé en discrétisant Z par pas Δ_Z de 0.05 si la gamme de Z n'est pas grande (par exemple au point $Z \simeq 0$ ou $Z \simeq 1$) ou par pas de 0.1 (si $Z \simeq 0.5$). La variable d'avancement c est discrétisée par pas de 0.05. Seule les pdfs conditionnées à Z^* ayant au moins 40 valeurs en Z^* seront tracées. Le calcul de la pdf est le suivant :

$$\overline{P}(c^*|Z^*) = \frac{1}{N_{Z^*}} \sum_{i=1}^{N_{Z^*}} \delta(c^*|Z^*) \quad (5)$$

Avec,

$$\begin{cases} \delta(c^*|Z^*) = 1 & \text{si } c^* - \Delta_c/2 < c < c^* + \Delta_c/2 \\ \delta(c^*|Z^*) = 0 & \text{sinon} \end{cases}$$

N_{Z^*} est le nombre de mesures en un point de l'écoulement (X, r) ayant la valeur de Z

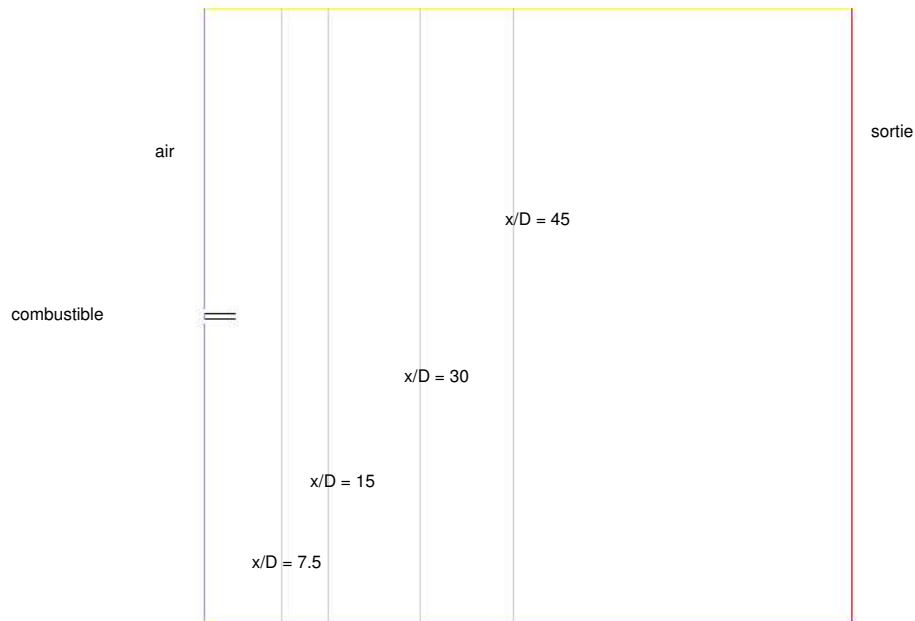


FIG. 4 – Positions axiales des zones de mesures des flammes jets turbulentes de Sandia, $X/D= 7.5, 15, 30$ et 45 ; $D=7.2$ mm

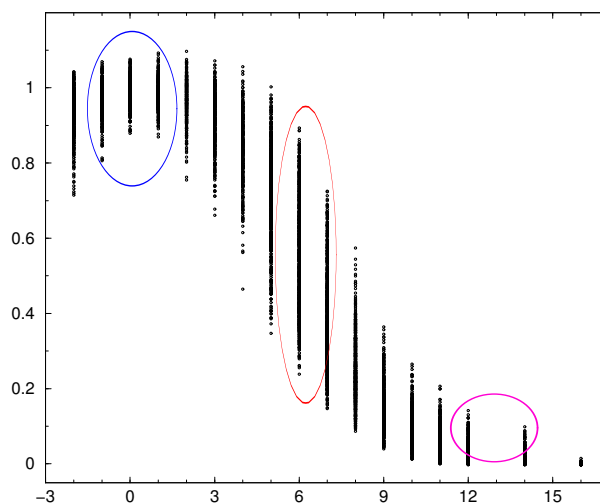


FIG. 5 – Fraction de mélange Z expérimentales en fonction de la position radiale r (en mm) en $X/D=7.5$ de la flamme D . Choix des positions radiales pour le calcul des pdfs conditionnées (cercles) : une riche ($r \simeq 0$ mm), une pauvre ($r \simeq 12$ mm) et une troisième intermédiaire ($Z \simeq 0,5$) ($r \simeq 4$ mm).

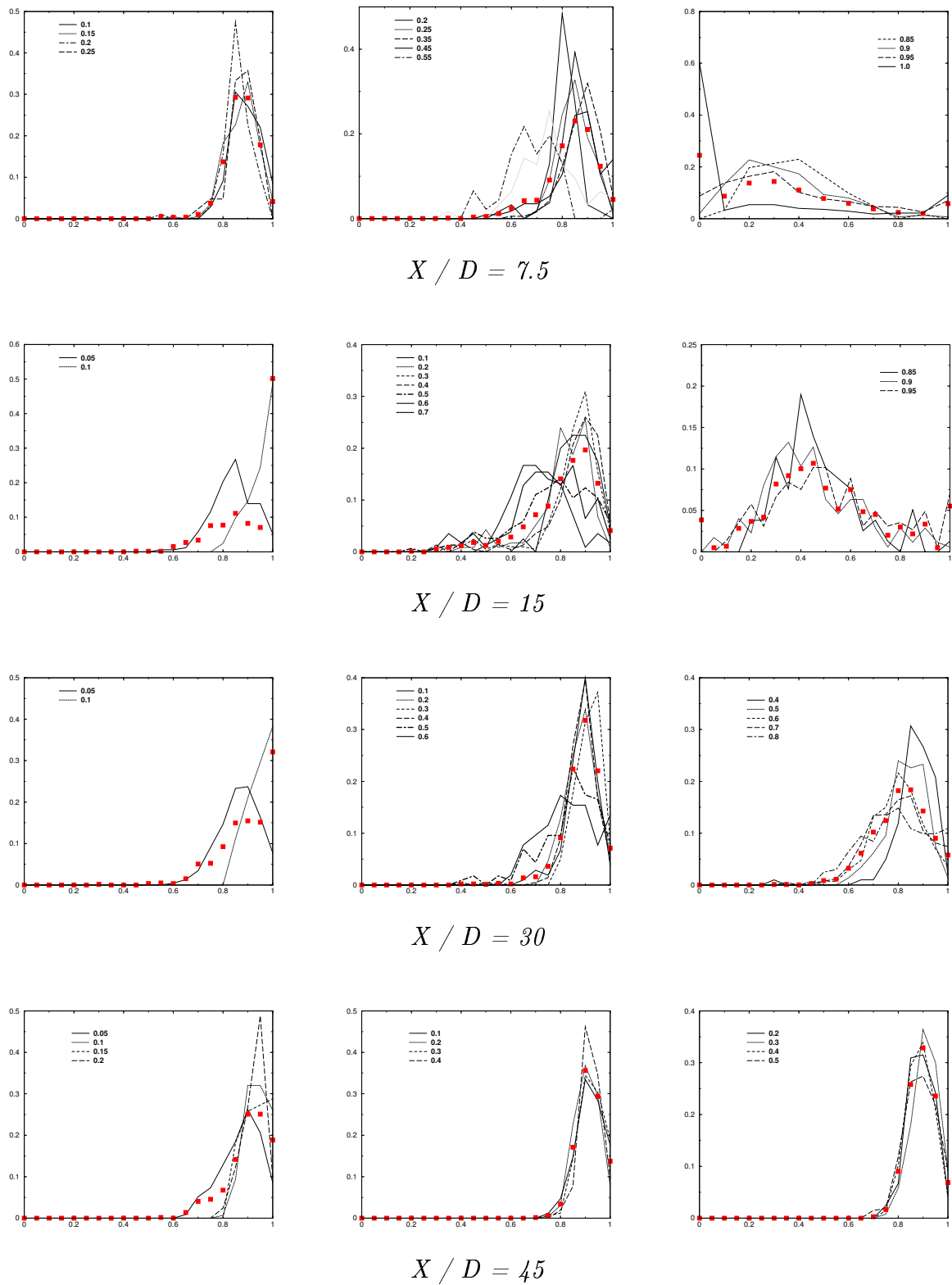


FIG. 6 – Fonction de densité de probabilité de l'avancement de la réaction c^* conditionné à Z^* en fonction de c^* , $\overline{P}(c^*|Z^*)$, à différentes positions de la flamme D pour différentes valeurs de Z . Symbols rouges : $\overline{P}(c)$ ($D=7,2$ mm).

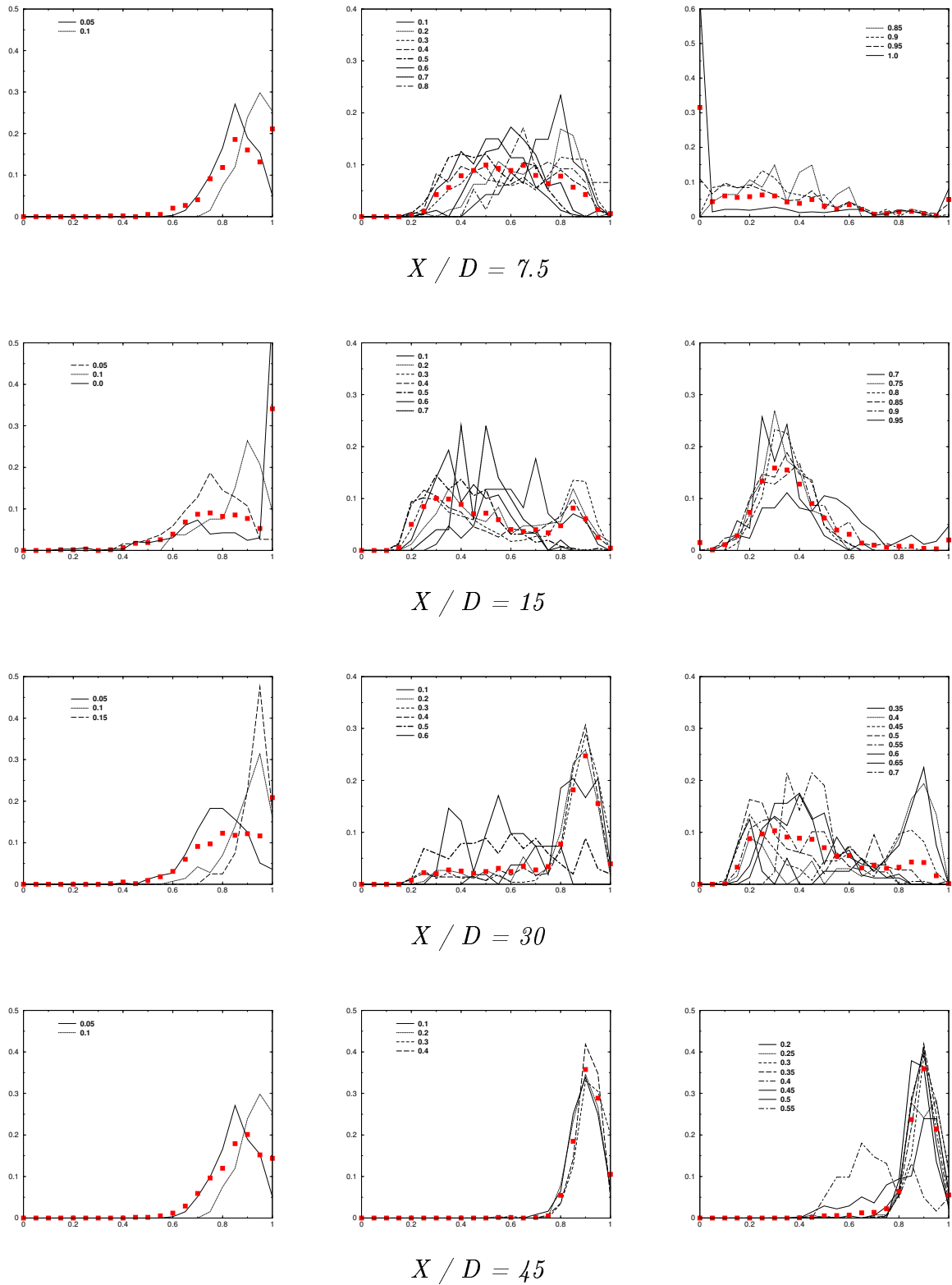


FIG. 7 – Fonction de densité de probabilité de l'avancement de la réaction c^* conditionné à Z^* en fonction de c^* , $\bar{P}(c^*|Z^*)$, à différentes positions de la flamme F pour différentes valeurs de Z . Symbols rouges : $\bar{P}(c)$ ($D=7,2$ mm).

égale à Z^* ($\pm\Delta_Z/2$).

La figure 6 regroupe les résultats issus de la flamme D et la figure 7 de la flamme F. La discontinuité des pdfs est marquée par une insuffisance de mesures expérimentales pour tracer des moyennes conditionnées. La superposition de ces résultats avec la pdf de c , $\overline{P}(c)$ (symboles rouges), permet de visualiser et quantifier les différences entre ces pdfs.

– La flamme D :

Les pdfs conditionnées $\overline{P}(c^*|Z^*)$ sont pour la majorité des positions, indépendantes de la valeur de Z , c'est-à-dire $\overline{P}(c^*|Z^*) \simeq \overline{P}(c^*)$. De légères différences sont visibles proche du brûleur ($X/D < 15$) et où les fluctuations de Z sont les plus fortes (figures centrales).

– La flamme F :

Globalement les mêmes observations sont faites sur cette flamme qui est plus turbulente et dans laquelle de nombreuses extinctions locales sont observées. Cependant, à la position $X/D = 30$, deux formes de la pdfs conditionnées se distinguent fortement.

Finalement, l'hypothèse $\overline{P}(c^*|Z^*) \simeq \overline{P}(c^*)$ est vérifiée à de nombreuses positions des flammes D et F lorsque cet avancement est calculé par la somme des fractions massiques du CO et du CO_2 . A noter que cette relation n'est pas valable pour $\overline{P}(Y_c^*|Z^*)$, dans laquelle la variable de progrès n'est pas normalisée par l'équilibre (voir figure 8).

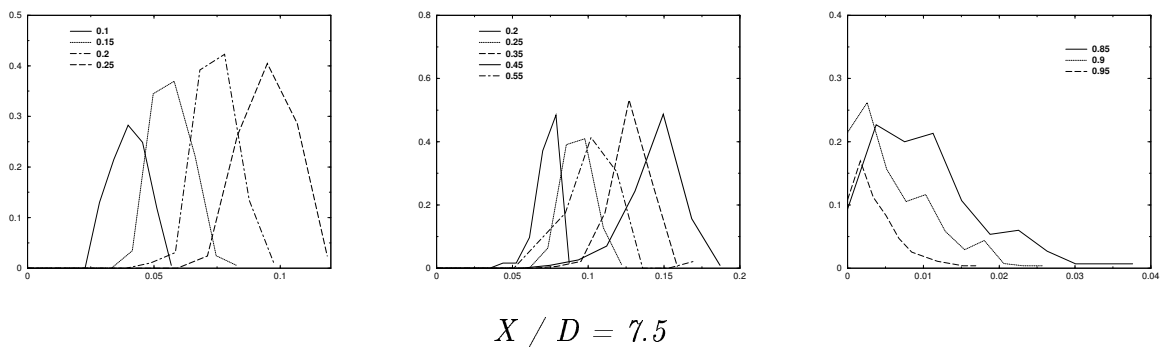


FIG. 8 – Fonction de densité de probabilité de la variable de progrès Y_c^* conditionné à Z^* en fonction de Y_c^* , $\overline{P}(Y_c^*|Z^*)$, à différentes positions radiale de la flamme D pour différentes valeurs de Z .

3 Prise en compte des fluctuations turbulentes

En intégrant l'équation 4 à travers les surfaces de fraction de mélange avec la pdf $\tilde{P}(Z^*)$, en accord avec la relation 2, on arrive à :

$$\tilde{Y}_c = \bar{c} \tilde{Y}_c^{Eq} \quad (6)$$

Avec,

$$\tilde{Y}_c^{Eq} = \int_0^1 Y_c^{Eq}(Z^*) \tilde{P}(Z^*) dZ^* \quad (7)$$

La pdf de la fraction de mélange, $\tilde{P}(Z^*)$ est présumée à partir de ses deux premiers moments \tilde{Z} et \tilde{Z}''^2 par la fonction Beta (Veynante and Vervisch., 2002).

Une équation de transport pour \tilde{Z} est donc calculée en négligeant le terme de diffusion laminaire :

$$\bar{\rho} \frac{\partial \tilde{Z}}{\partial t} + \bar{\rho} \tilde{\mathbf{u}} \cdot \nabla \tilde{Z} = -\nabla \cdot \bar{\tau}_Z \quad (8)$$

Où $\bar{\tau}_Z = (\overline{\rho \mathbf{u} \tilde{Z}} - \bar{\rho} \tilde{\mathbf{u}} \tilde{Z}) \approx -\bar{\rho} (\nu_t / Sc_T) \nabla \tilde{Z}$ dénote le transport turbulent pour lequel une hypothèse de transport par gradient est retenue, exprimée avec la viscosité ν_T et le nombre de Schmidt turbulent $Sc_T = 0.7$. Cette fermeture avec la valeur de Sc_T est adoptée pour toutes les équations de transport.

Similairement, la modélisation de l'équation de transport pour \tilde{Z}''^2 est introduite :

$$\bar{\rho} \frac{\partial \tilde{Z}''^2}{\partial t} + \bar{\rho} \tilde{\mathbf{u}} \cdot \nabla \tilde{Z}''^2 = -\nabla \cdot \bar{\tau}_{Z''^2} + 2\rho \nu_T |\nabla \tilde{Z}|^2 - 2\bar{\rho} \chi_Z \quad (9)$$

où $\bar{\tau}_{Z''^2} = (\overline{\rho \mathbf{u} \tilde{Z}''^2} - \bar{\rho} \tilde{\mathbf{u}} \tilde{Z}''^2)$. La dissipation scalaire est exprimée par une relaxation linéaire, $\bar{\rho} \chi_Z = \bar{\rho} \tilde{Z}''^2 / (k/\tilde{\epsilon})$.

Deux options sont alors possibles pour fermer les termes indéterminés (taux de réaction pour Y_c , température et espèces chimiques) :

- Les fluctuations de Y_c autour de sa moyenne conditionnée sont négligées et une approximation au premier ordre utilisant $(\overline{Y_c | Z^*})$ est obtenue.
- Les fluctuations de Y_c autour de sa moyenne conditionnée sont introduites, $(\overline{Y_c'^2 | Z^*})$, pour construire une fermeture plus précise.

3.1 Approximation au premier ordre

Cette approximation est déterminée par le calcul de la moyenne conditionnée $\left(\overline{Y_c|Z^*}\right)$ (équation 4, page 131). Dans cette expression, $\left(\overline{c|Z^*}\right)$ peut être fermé en supposant les variables c et Z statistiquement indépendantes :

$$\left(\overline{c|Z^*}\right) \simeq \bar{c} \quad (10)$$

Cette relation, exprimée sous forme de pdf devient :

$$\overline{P}(c^*|Z^*) = \overline{P}(c^*) \quad (11)$$

Cette hypothèse a été discutée et validée précédemment.

En utilisant les relations 4, 6 et 10, la moyenne conditionnée à Z de Y_c est écrite sous la forme :

$$\left(\overline{Y_c|Z^*}\right) \approx \left(\frac{\tilde{Y}_c}{\tilde{Y}_c^{Eq}}\right) Y_c^{Eq}(Z^*) \quad (12)$$

La détermination de $\left(\overline{Y_c|Z^*}\right)$ requiert la connaissance de \tilde{Y}_c , dont l'équation de transport est modélisée par :

$$\frac{\partial \tilde{Y}_c}{\partial t} + \bar{\rho} \tilde{\mathbf{u}} \cdot \nabla \tilde{Y}_c = -\nabla \cdot \tau_{Y_c} + \bar{\rho} \tilde{\omega}_{Y_c} \quad (13)$$

Où $\bar{\tau}_{Y_c} = \left(\overline{\rho \mathbf{u} Y_c} - \bar{\rho} \tilde{\mathbf{u}} \tilde{Y}_c\right)$.

Pour ce premier niveau de modélisation, $\left(\overline{Y_c|Z^*}\right)$ est utilisée pour entrer dans la table FPI et le taux de réaction $\tilde{\omega}_{Y_c}$ est exprimé par :

$$\tilde{\omega}_{Y_c} = \int_0^1 \dot{\omega}_{Y_c}^{FPI} \left[Z^*, \left(\overline{Y_c|Z^*}\right) \right] \tilde{P}(Z^*) dZ^* \quad (14)$$

Où $\tilde{P}(Z^*)$ prend la forme de la fonction Beta (Veynante and Vervisch., 2002). Les fractions massiques moyennes conditionnées des espèces chimiques sont approximées par $Y_i^{FTC} = \alpha_i Y_i^{FPI}$, permettant d'accéder aux concentrations moyennes :

$$\tilde{Y}_i = \int_0^1 \alpha_i \left[Z^*, \left(\overline{Y_c|Z^*}\right) \right] Y_i^{FPI} \left[Z^*, \left(\overline{Y_c|Z^*}\right) \right] \tilde{P}(Z^*) dZ^* \quad (15)$$

Dans ces expressions, les fluctuations de la variable de progrès pour un niveau de fraction de mélange donné sont négligées, et ceci ne peut pas être pleinement satisfaisant dans les flammes fortement turbulentes, avec par exemple, la présence d'extinctions locales influençant fortement la forme de la pdf $\overline{P}(c^*|Z^*)$.

3.2 Approximation au second ordre

La deuxième alternative consiste à présumer le comportement statistique de Y_c après avoir estimé $\left(\overline{Y_c'^2|Z^*}\right)$, l'amplitude moyenne des fluctuations conditionnées.

$Y_c' = Y_c - \left(\overline{Y_c|Z^*}\right)$ est définie en accord avec les moyennes conditionnées (Klimenko and Bilger, 1999) :

$$\left(\overline{Y_c'^2|Z^*}\right) = \int_0^1 \left[Y_c^* - \left(\overline{Y_c|Z^*}\right) \right]^2 \overline{P}(Y_c^*|Z^*) dY_c^* \quad (16)$$

$$= \left(\overline{\varphi|Z^*}\right) - \left(\overline{Y_c|Z^*}\right)^2 \quad (17)$$

Où $\varphi = Y_c Y_c$ dénote le carré de la variable de progrès de la réaction. En utilisant les équations 3 et 4 et en maintenant l'hypothèse que $\overline{P}(c^*|Z^*)$ dépend faiblement de Z^* , on peut écrire :

$$\left(\overline{Y_c'^2|Z^*}\right) = \left(\overline{\varphi|Z^*}\right) - \left(\overline{Y_c|Z^*}\right)^2 \approx (\overline{c\bar{c}} - \bar{c}\bar{c}) (Y_c^{Eq}(Z^*))^2 \quad (18)$$

L'intégration de cette équation à travers les iso-surfaces de fraction de mélange avec $\tilde{P}(Z^*)$ conduit à :

$$\tilde{\varphi} - \bar{c}\bar{c}\widetilde{Y_c^{Eq^2}} = (\overline{c\bar{c}} - \bar{c}\bar{c}) \widetilde{Y_c^{Eq^2}} \quad (19)$$

et en exprimant \bar{c} à partir de l'équation 6,

$$\left(\overline{Y_c'^2|Z^*}\right) = \left(\frac{\tilde{\varphi}}{\widetilde{Y_c^{Eq^2}}} - \left(\frac{\tilde{Y}_c}{\tilde{Y}_c^{Eq}} \right)^2 \right) (Y_c^{Eq}(Z^*))^2 \quad (20)$$

Le niveau des fluctuations $\left(\overline{Y_c'^2|Z^*}\right)$ est alors relié à $\tilde{\varphi}$. L'équation de transport pour $\tilde{\varphi}$ s'écrit (Veynante and Vervisch., 2002) :

$$\bar{\rho} \frac{\partial \tilde{\varphi}}{\partial t} + \bar{\rho} \tilde{\mathbf{u}} \cdot \nabla \tilde{\varphi} = -\nabla \cdot \bar{\tau}_\varphi - 2\bar{\rho} \overline{\chi_{Y_c}} + 2\bar{\rho} \overline{\Omega}_\varphi \quad (21)$$

Où $\bar{\tau}_\varphi = (\overline{\rho \mathbf{u} \varphi} - \bar{\rho} \tilde{\mathbf{u}} \tilde{\varphi})$. Les deux derniers termes de cette équation ne sont pas fermés. $\chi_{Y_c} = D |\nabla Y_c|^2$ dénote le taux de dissipation du scalaire Y_c et $\dot{\Omega}_\varphi = Y_c \dot{\omega}_{Y_c}$ est le terme source chimique.

- Le taux de dissipation scalaire peut être fermé par une relaxation linéaire analogue au taux de dissipation de Z ou avec une fermeture plus complexe adaptée aux scalaires réactifs (Vervisch et al., 2004a). Seule la première approche a été utilisée : $\overline{\rho \chi_{Y_c}} = \bar{\rho} C_\varphi (\tilde{\varphi} - \tilde{Y}_c \tilde{Y}_c) / (\tilde{k} / \tilde{\epsilon})$, avec $C_\varphi = 0.25$. Cette constante est ajustée dans les calculs de flamme D et fixée par la suite (simulation de la flamme F).

- Les termes sources chimiques, $\overline{\rho\dot{\omega}_c}$ et $\overline{\rho\dot{\Omega}_\varphi}$, la température et les concentrations d'espèces chimiques restent indéterminés.

On tire avantage de la connaissance de $\left(\overline{Y_c|Z^*}\right)$ et $\left(\overline{Y_c'^2|Z^*}\right)$ pour présumer le comportement statistique de Y_c le long des iso-surfaces de fraction de mélange. La pdf conditionnée $\overline{P}(c^*|Z^*) \approx \tilde{P}(c^*)$ est toujours supposée faiblement dépendante de Z et une fonction Beta est adoptée pour présumer sa forme. \bar{c} est déterminé par l'équation 6 et les fluctuations $\overline{c'^2}$ à partir de l'équation 19 qui peut être reformulée la manière suivante :

$$\overline{c'^2} = \frac{\tilde{\varphi}}{Y_c^{Eq2}} - \left(\frac{\tilde{Y}_c}{\tilde{Y}_c^{Eq}}\right)^2 \quad (22)$$

A la fois $\tilde{\omega}_{Y_c}$ de l'équation 13 et $\tilde{\Omega}_\varphi$ trouvé dans l'équation 21 sont estimés via la table chimique FPI :

$$\tilde{\omega}_{Y_c} = \int_0^1 \int_0^1 \dot{\omega}_{Y_c}^{FPI}(Z^*, c^*) \overline{P}(c^*) \tilde{P}(Z^*) dc^* dZ^* \quad (23)$$

$$\tilde{\Omega}_\varphi = \int_0^1 \int_0^1 c^* Y_c^{Eq}(Z^*) \dot{\omega}_{Y_c}^{FPI}(Z^*, c^*) \overline{P}(c^*) \tilde{P}(Z^*) dc^* dZ^* \quad (24)$$

Toutes les fractions massiques moyennes des espèces chimiques et la température sont obtenues par la tabulation FTC en introduisant la fonction α_i :

$$\tilde{Y}_i = \int_0^1 \int_0^1 \alpha_i(Z^*, c^*) Y_i^{FPI}(Z^*, c^*) \overline{P}(c^*) \tilde{P}(Z^*) dc^* dZ^* \quad (25)$$

Dans l'approximation au second ordre, les équations de transport pour \tilde{Z} et \tilde{Z}''^2 , ainsi que \tilde{Y}_c (Eq. 13) et $\tilde{\varphi}$ (Eq. 21) sont calculées. A noter qu'il est nécessaire de moyenner Y_c^{Eq} et Y_c^{Eq2} et que ces termes ne dépendent que du mélange. La pdf Beta est une fois de plus utilisée. Cette seconde fermeture a de fortes similarités avec le modèle d'interaction turbulence-chimie basé sur les multivariations des pdfs beta présumées proposé par Landenfeld et al (Landenfeld et al., 2002) ainsi qu'avec le modèle proposé par Bradley et al (Bradley et al., 1998).

4 Couplage avec l'écoulement turbulent

Dans le cas d'un calcul effectué sous une hypothèse d'un faible nombre de Mach (< 0.3), le couplage avec le code de calcul RANS se fait uniquement par l'intermédiaire de la densité

qui est déterminée par l'équation des gaz parfaits et donc de la température et des espèces chimiques issues du modèle de combustion.

$$\rho = \frac{P}{rT}$$

avec $r = R \sum Y_i/M_i$ et R la constante des gaz parfaits ; $R=8,314 \text{ J.mol}^{-1}.\text{K}^{-1}$.

La densité moyenne est obtenue par la relation :

$$\bar{\rho} \simeq \frac{P}{\left(R \sum \tilde{Y}_i/M_i\right) \tilde{T}} \quad (26)$$

La pression dans les calculs des flammes jets est fixée à 1 bar.

Les corrélations entre Y_i et T sont étudiées en comparant l'expression précédente (Eq. 26) à celle calculée expérimentalement :

$$\bar{\rho} = \sum_{i=1}^N \rho \quad (27)$$

N est le nombre de mesure effectuée ($\simeq 500$).

La comparaison est effectuée sur tous les points des flammes jets turbulentes de Sandia D et F (Barlow and Frank, 2003b; Barlow and Frank., 1998) (voir figure 9). La relation linéaire entre ces deux expressions montre que les fluctuations entre Y_i et T peuvent être négligées pour le calcul de la densité à pression constante.

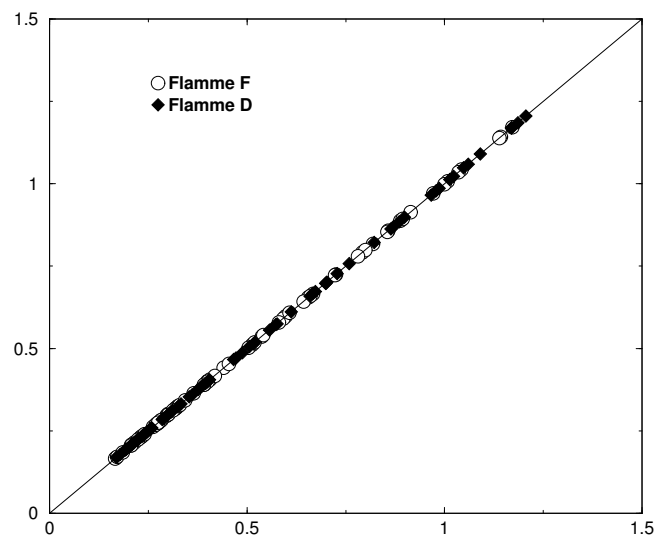


FIG. 9 – $\bar{\rho}$ (Eq. 26) en fonction de $\bar{\rho}$ (Eq. 27) dans les flammes jets turbulentes D et F du laboratoire de Sandia.

5 Conclusion

Un modèle de combustion turbulente développé à partir des moyennes conditionnées à été proposé. Les hypothèses formulées dans cette approche sont discutées, notamment l'indépendance statistique de la fraction de mélange et de la variable d'avancement est vérifiée lorsque la variable de progrès Y_c est définie par la somme des fractions massiques du CO_2 et du CO . Les moyennes des concentrations d'espèces chimiques et de la température, issues de la tabulation FTC, sont calculées par des fonctions de densité de probabilité présumées sous la forme de fonction Beta.

Deux approximations sont alors proposées :

- l'approximation au premier ordre dans laquelle les fluctuations d'avancement de la réaction ne sont pas prises en compte. Trois équations de transport sont donc nécessaires pour modéliser la combustion turbulente : la fraction de mélange, sa variance et une variable de progrès, \tilde{Y}_c .
- l'approximation au second ordre, où les fluctuations d'avancement sont introduites. Une équation de transport supplémentaire est donc calculée pour $\widetilde{Y_c Y_c}$.

Le faible nombre d'équation de transport (3 ou 4) ne contribue pas à une augmentation importante des temps de calcul, ce qui fait de la méthode une approche intéressante dans les simulations des foyers aéronautiques ou tout autre configuration industrielle de grande taille.

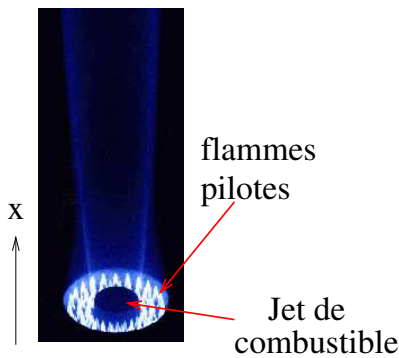
Cette formulation PCM-FTC, Presumed Conditional Moment - Flame Tabulated Chemistry est maintenant testée sur des flammes jets turbulentes de méthane / air. Le caractère prédictif des concentrations d'espèces chimiques de la température et du décollement de flamme sont les principaux paramètres étudiés.

Troisième partie

VALIDATION DE PCM-FTC

Chapitre 1

Flamme D



La flamme jet pilote partiellement prémélangée avec un nombre de Reynolds de l'ordre de 22400, étudiée par Barlow et Franck (Barlow and Frank., 1998), est retenue pour le premier cas de validation. De nombreux points de mesure ont été effectués ($x/D=1, 2, 3, 7.5, 15, 30, 45, 60, 75$; $D=7.2$ mm et x la coordonnée axiale). La température et les concentrations d'espèces chimiques (CO_2 , CO , H_2O , CH_4 , O_2 , N_2 , OH , CO , NO) permettent de quantifier le pouvoir de prédiction de la chimie détaillée par la méthode PCM-FTC.

Un jet central de méthane partiellement prémélangé avec de l'air (25% vol. CH_4 , 75% vol. air) d'un diamètre $D=7.2$ mm est entouré par un ensemble de petites flammes pilotes pauvres ($\phi \approx 0.77$, $Z_s \approx 0.351$) d'un diamètre 18,2 mm. Ce brûleur est plongé dans un écoulement d'air (voir figure 1.1).

La vitesse débitante du jet central est 49,6 m/s, la vitesse du pilote est 11.4 m/s et celle de l'air 0,9 m/s. Les profils de vitesse expérimentaux en entrée ainsi que l'énergie cinétique turbulente sont imposés comme conditions limites du calcul RANS. Le taux de dissipation de la turbulence est estimé à partir de l'échelle de longueur turbulente qui est ici assimilée au rayon intérieur du tube d'injection :

$$\tilde{\epsilon} = \frac{\tilde{k}^{3/2}}{D/2}$$

Tous les détails de cette flamme (conditions limites, conditions de mesures expérimentales) peuvent être retrouvés sur le site internet : <http://www.ca.sandia.gov/TNF>.

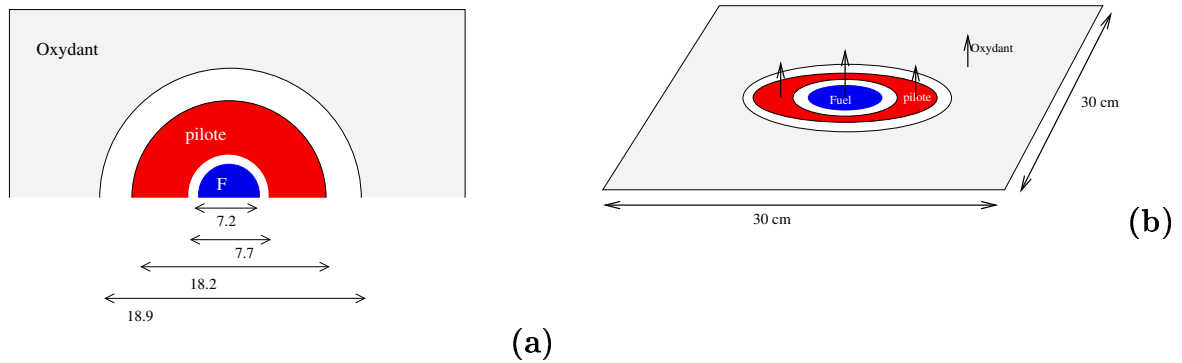


FIG. 1.1 – Schéma descriptif de la base du brûleur axi-symétrique des flammes jets turbulentes de Sandia. (a) : vue de dessus (diamètres en mm); (b) vue 3D.

La géométrie du calcul est 0,72 m x 0,36 m et le maillage est composé environ de 17000 noeuds, raffiné en fonction des gradients de température. La taille des cellules proches de la zone de réaction est contrôlée par l'épaisseur de la flamme turbulente afin que les taux de réaction des scalaires réactifs soient les plus lisses possibles. Ce raffinement n'est pas indispensable avec la méthode de transport de pdf car les scalaires réactifs sont transportés par une méthode lagrangienne.

Le logiciel "Fluent" 6.1 est utilisé pour les calculs des flammes D et F. La version \tilde{k} - $\tilde{\epsilon}$ réalisable du modèle de turbulence est adaptée au calcul axi-symétrique de jet rond en ajoutant la correction de Pope à l'équation pour $\tilde{\epsilon}$:

$$P_{pc} = \bar{\rho} C_{\tilde{\epsilon}_3} \frac{\tilde{\epsilon}^2}{\tilde{k}} S_\epsilon$$

$$S_\epsilon = \frac{1}{4} \left(\frac{\tilde{k}}{\tilde{\epsilon}} \right)^3 \left(\frac{\partial \tilde{u}_x}{\partial r} - \frac{\partial \tilde{u}_r}{\partial x} \right)^2 \frac{\tilde{u}_r}{r}$$

Avec $C_{\tilde{\epsilon}_3} = 0.79$ (Pope, 1978). Dans ces calculs la constante $C_{\tilde{\epsilon}_3}$ est fixée à 0,5 afin d'adapter le modèle \tilde{k} - $\tilde{\epsilon}$ aux flammes jets turbulentes de Sandia. Elle est déterminée avec la simulation de la flamme D en recalant les niveaux de la température axiale. Cette constante modifie l'ouverture du jet à la sortie du brûleur.

La planche 1.2 regroupe le maillage et les lignes de mesure (Trait noir), ainsi que les résultats qualitatifs sur la température, la fraction de mélange, sa variance et le taux de réaction de Y_c .

La convergence est atteinte lorsque la fraction massique de la variable de progrès (scalaire réactif) n'évolue plus dans le domaine de calcul. Sur la figure 1.3 est tracée \tilde{Y}_c

à la position ($x=0$; axe, $y=0,72$ m; fin du domaine de calcul) en fonction des itérations. Environ 10000 itérations sont donc nécessaires pour converger le calcul de la flamme D.

1.1 Moyennes conditionnées à Z^*

Les résultats expérimentaux incluent des moyennes conditionnées obtenues le long de chaque position radiale r pour une distance de l'injecteur X/D fixée. Bien que cette moyenne soit locale (X, r), il est possible de l'étendre sur tout le profil radial car pour une valeur de Z instantanée fixée, la position correspondante r ne peut s'étendre que sur ses proches voisins. Par exemple à la position $X/D=7.5$, on ne peut pas trouver $Z=0.5$ à la position $r=0$ et $r=R$, mais seulement en $r=6$ mm (± 1 mm); voir figure 4, page 134.

La moyenne $\widehat{(\overline{Y_c|Z^*})}(X)$ correspond à la moyenne conditionnée à travers toutes les positions radiales r^i . La moyenne totale de toutes ces positions radiales $\widetilde{Y}_c(X)$ peut être écrite :

$$\widetilde{Y}_c(X) = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \widetilde{Y}_c(X, r^i) = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \int_0^1 \left(\overline{Y_c|Z^*} \right) (X, r^i) \widetilde{P}(Z^*; X, r^i) dZ^* \quad (1.1)$$

Les moments conditionnés $\widehat{(\overline{Y_c|Z^*})}(X)$ sont reliés à $\widetilde{Y}_c(X)$ à travers :

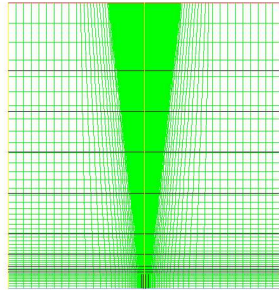
$$\widetilde{Y}_c(X) = \int_0^1 \widehat{(\overline{Y_c|Z^*})}(X) \left[\frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \widetilde{P}(Z^*; X, r^i) \right] dZ^* \quad (1.2)$$

À partir de ces deux dernières relations, la moyenne conditionnée de Y_c à Z^* s'écrit :

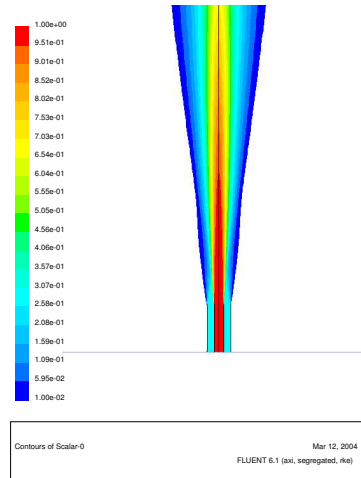
$$\boxed{\widehat{(\overline{Y_c|Z^*})}(X) = \frac{\sum_{i=1}^N \left(\overline{Y_c|Z^*} \right) (X, r^i) \widetilde{P}(Z^*; X, r^i)}{\sum_{i=1}^N \widetilde{P}(Z^*; X, r^i)}} \quad (1.3)$$

Cette dernière expression est utilisée dans les résultats des calculs moyens RANS, utilisant l'approximation du premier ordre et du second ordre, pour obtenir $\widehat{(\overline{Y_c|Z^*})}(X)$. L'équation 1.3 a aussi été retenue par Landenfeld et al (Landenfeld et al., 2002) pour comparer les moyennes conditionnées des calculs RANS aux résultats expérimentaux.

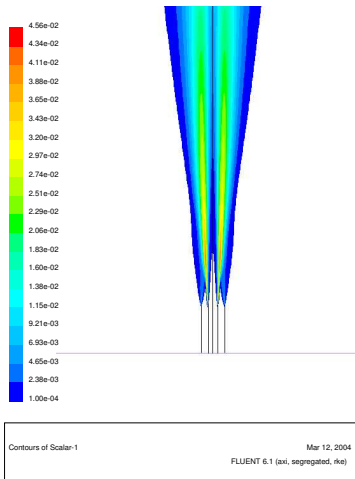
Les moyennes conditionnées sont tracées sur les figures 1.4 à 1.8 pour plusieurs variables. Les résultats du modèle PCM-FTC au premier ordre et second ordre sont alors comparés à l'expérience. Les niveaux de fluctuations (rms), fournis dans les données expérimentales, sont tracés sur tous les graphes.



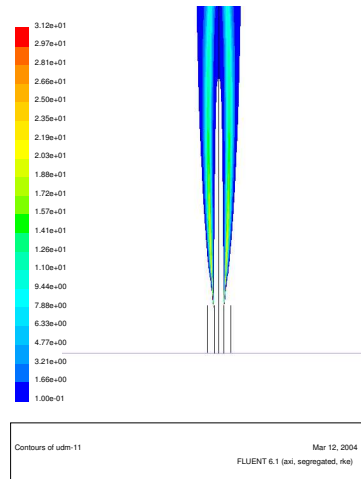
Maillage



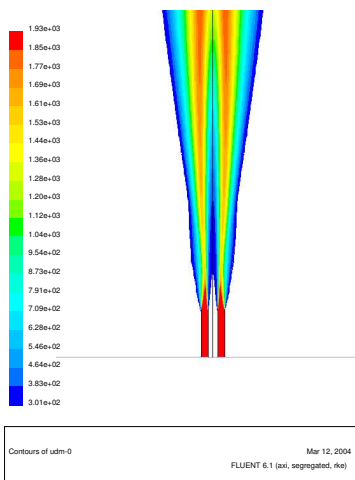
Fraction de mélange Z



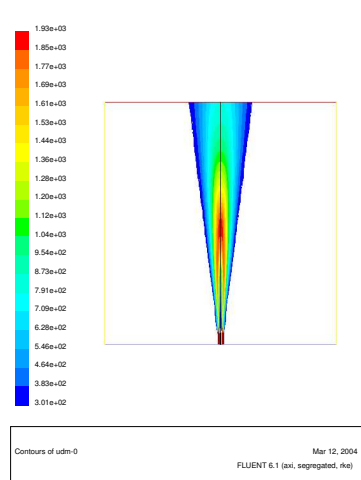
Variance de Z



Taux de réaction ω_{Y_c}



Température proche du brûleur



Température

FIG. 1.2 – Etude qualitative de la flamme jet turbulente de Sandia (flamme D).

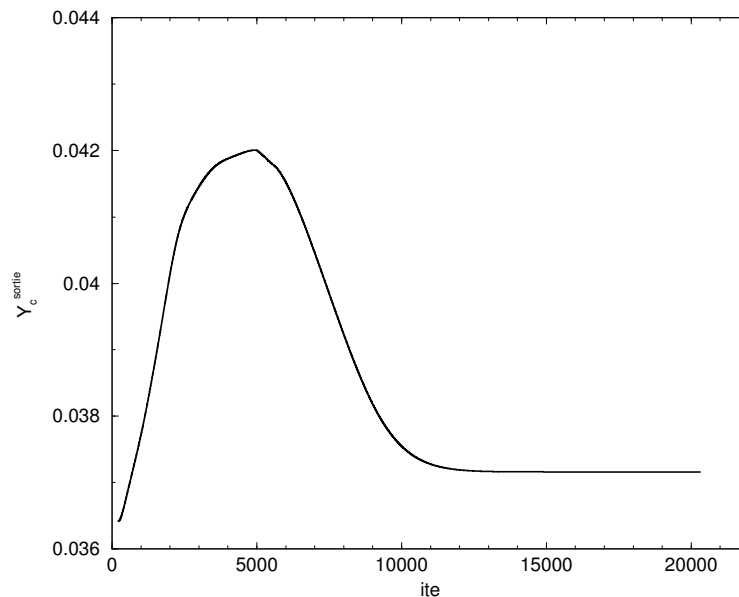


FIG. 1.3 – Convergence du calcul de la flamme D : \tilde{Y}_c à la position $(0; 0,75m)$ en fonction des itérations.

La courbe $\partial(\widehat{Y_c|Z^*})/\partial Z$, figure 1.4 tend vers 0 dans les expériences quand Z tend vers 1, mais pas dans les calculs. Une mauvaise prédiction de la pdf de Z , qui perturbe la moyenne conditionnée dans Eq. 1.3 peut en être la cause. L'approximation au premier ordre tend à surestimer Y_c dans la partie riche de la flamme, alors que les deux approximations sont en bonne correspondance avec l'expérience et très proches de l'équilibre chimique dans la partie pauvre. Les mêmes observations sont faites sur les moyennes conditionnées de la température $(\widehat{T|Z^*})$ montrées sur la figure 1.5, où la structure de la flamme est correctement reproduite.

Les prédictions et les mesures de CO dans la partie riche des flammes non-prémélangées est connue comme un point sensible (Dally et al., 2003). La moyenne conditionnée de CO est tracée sur la figure 1.6. Elle est légèrement surestimée dans la partie riche, avec une déviation de l'expérience qui apparaît autour de $Z \approx 0.4$. Cet écart peut être attribué à différents facteurs, le schéma cinétique peut être discuté avec la procédure de tabulation et le caractère présumé de la modélisation. Pour calibrer la perte d'information résultant du caractère présumé, il est intéressant de comparer ces calculs avec la figure 8 de Roomina et Bilger (Roomina and Bilger, 2001), qui sont obtenus avec une méthode CMC. Comme attendue, la solution par résolution d'une équation de transport pour $(\widehat{Y_{CO}|Z^*})$ apporte plus de précision. Cependant, le caractère prévisionnel dans la partie riche, ne dépasse pas la fraction de mélange $Z \approx 0.5$. En vue des résultats sur le CO (fig. 1.6), la méthode PCM

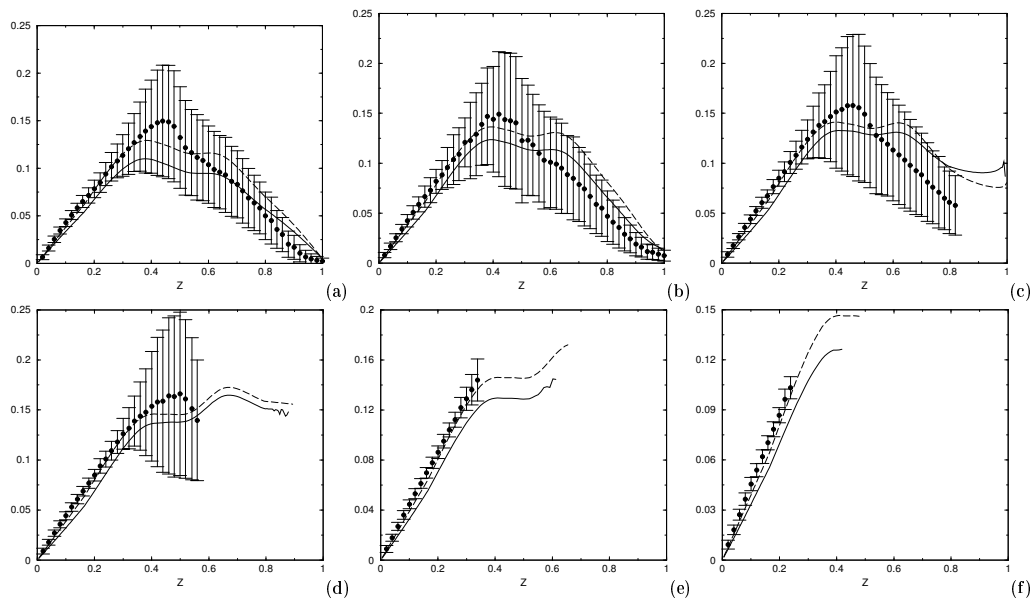


FIG. 1.4 – Moyennes conditionnées $\overline{(Y_c|Z^*)}$ à différentes hauteurs dans la flamme D. Pointillés : approximation au premier ordre. Trait : approximation au second ordre. Cercles et bars : expériences et rms. (a) : $X/D=7.5$ (b) : $X/D=15$ (c) : $X/D=30$ (d) : $X/D=45$ (f) : $X/D=60$. (g) : $X/D=75$.

peut être un premier pas intéressant dans la modélisation car elle est facile à introduire dans un code CFD et a des coûts CPU très faibles.

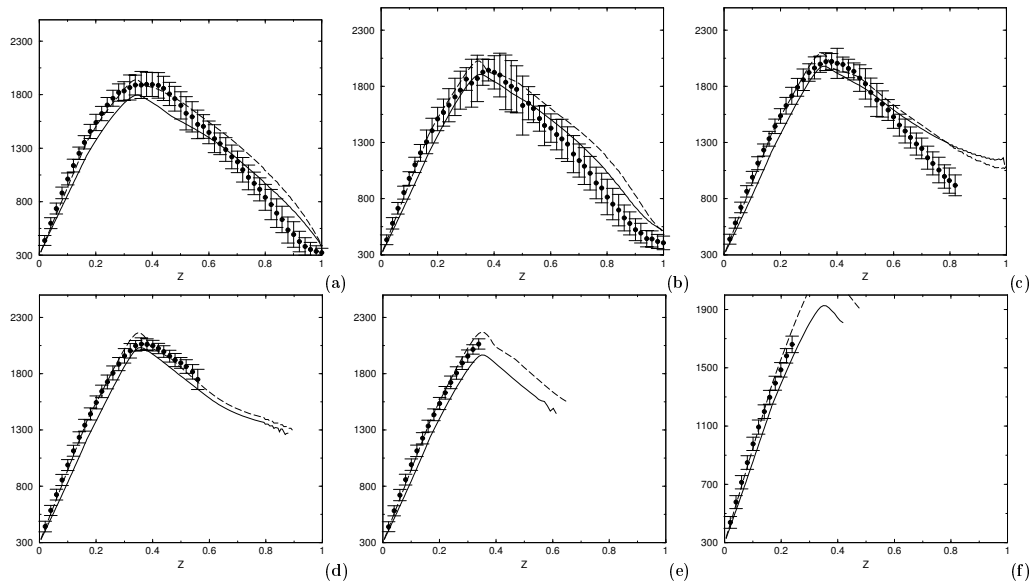


FIG. 1.5 – Moyennes conditionnées $\overline{(T|Z^*)}$ à différentes hauteurs dans la flamme D. Pointillés : approximation au premier ordre. Trait : approximation au second ordre. Cercles et bars : expériences et rms. (a) : $X/D=7.5$ (b) : $X/D=15$ (c) : $X/D=30$ (d) : $X/D=45$ (f) : $X/D=60$. (g) : $X/D=75$.

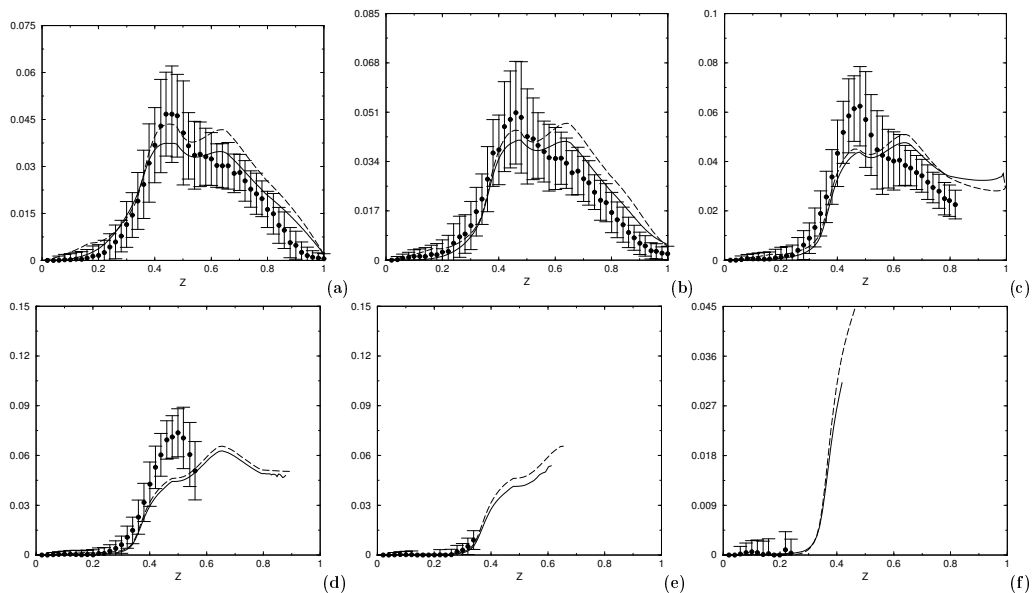


FIG. 1.6 – Moyennes conditionnées $\overline{(CO|Z^*)}$ à différentes hauteurs dans la flamme D. Pointillés : approximation au premier ordre. Trait : approximation au second ordre. Cercles et bars : expériences et rms. (a) : $X/D=7.5$ (b) : $X/D=15$ (c) : $X/D=30$ (d) : $X/D=45$ (f) : $X/D=60$. (g) : $X/D=75$.

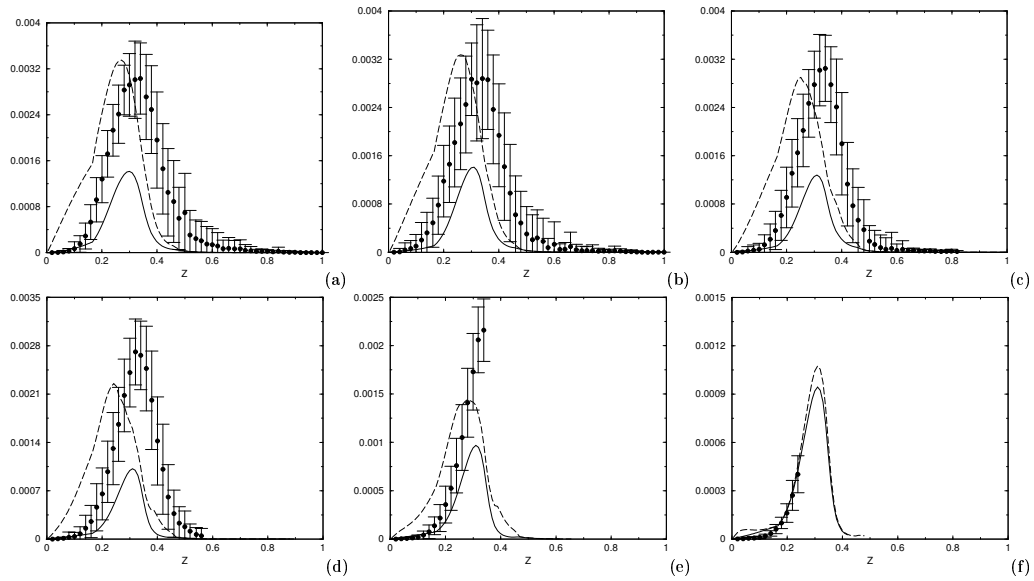


FIG. 1.7 – Moyennes conditionnées $(\overline{OH|Z^*})$ à différentes hauteurs dans la flamme D. Pointillés : approximation au premier ordre. Trait : approximation au second ordre. Cercles et bars : expériences et rms. (a) : $X/D=7.5$ (b) : $X/D=15$ (c) : $X/D=30$ (d) : $X/D=45$ (f) : $X/D=60$. (g) : $X/D=75$.

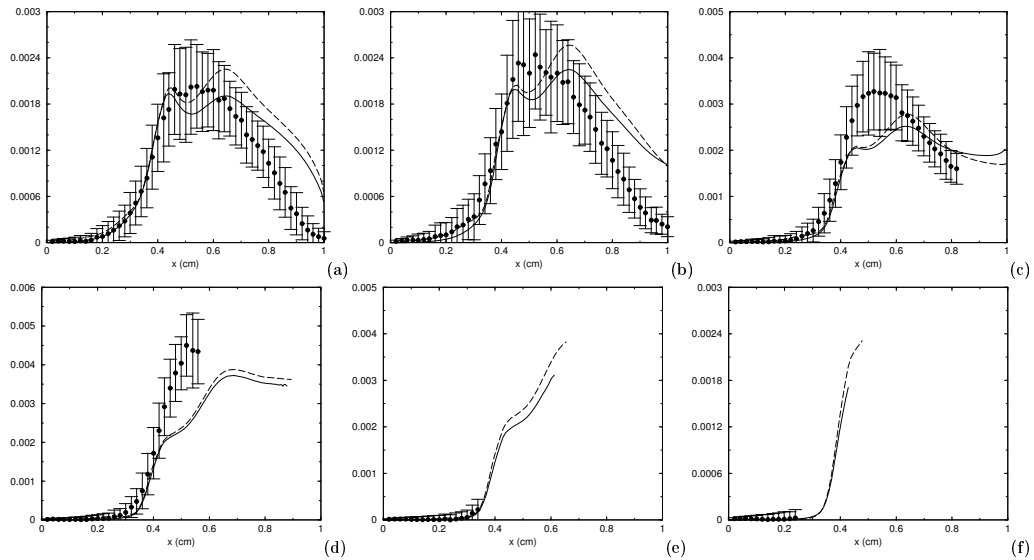


FIG. 1.8 – Moyennes conditionnées $(\overline{H_2|Z^*})$ à différentes hauteurs dans la flamme D. Pointillés : approximation au premier ordre. Trait : approximation au second ordre. Cercles et bars : expériences et rms. (a) : $X/D=7.5$ (b) : $X/D=15$ (c) : $X/D=30$ (d) : $X/D=45$ (f) : $X/D=60$. (g) : $X/D=75$.

1.2 Moyennes de Favre

Les profils de vitesses axiales le long de l'axe de l'injecteur sont tracés sur la fig. 1.9. La prédiction des vitesses reste dans une incertitude d'erreur acceptable, avec une sous-estimation dans la partie basse de la flamme ($X/D < 20$) et une surestimation dans la partie haute. Ces résultats correspondent à ce qui peut être attendu en RANS dans les écoulement réactifs (Jones, 1994). Il en est de même pour l'énergie cinétique turbulente, \tilde{k} , figure 1.10. La moyenne de Favre de la fraction de mélange est bien capturée jusqu'à $X/D = 15$ et surestimée plus loin (fig. 1.11); comme pour le champ de vitesse. À la fois l'approximation de premier et second ordres sont proches de l'expérience. Les niveaux de fluctuations de la fraction de mélange sont l'un des paramètres de contrôle de la modélisation. Il est légèrement surestimé proche du brûleur et sous-estimé en aval (fig. 1.12). La fermeture du taux de dissipation scalaire, $\tilde{\chi}_Z$ peut facilement être jugée responsable. Cependant, la résolution d'une équation de transport pour $\tilde{\chi}_Z$ (Jones, 1994) a été introduite dans les calculs et n'apporte pas d'améliorations notables. Les mêmes comparaisons sont observées avec la modélisation par transport de pdf (Xu and Pope, 2000). Seule la simulations des grandes échelles permet de capturer avec précision les fluctuations de fraction de mélange (Pitsch and Steiner, 2000).

Les profils radiaux de la température sont présentés sur la figure 1.15. Un bon accord avec l'expérience est visualisé avec l'approximation au second ordre de PCM. La fraction massique moyenne de CO est aussi bien capturée (fig. 1.16) et permet d'observer les différences entre les approximations aux premier et second ordres. En effet, l'approximation au second ordre reste proche des résultats expérimentaux jusqu'à $X/D=60$ alors que le premier ordre surestime le CO. Dans la partie pauvre de la flamme turbulente, les fluctuations de la variable de progrès ne peuvent pas être négligées et pour capturer le CO, l'approximation au second ordre est nécessaire. De même que \tilde{Y}_c et \tilde{Y}_{CO} , la fraction massique de CO_2 est correctement reproduite, par définition de la variable d'avancement. Pour compléter le test, les fractions massiques H_2O et H_2 sont présentées sur les figures 1.17 et 1.18. Les deux sont estimées en bon accord avec l'expérience pour l'approximation au second ordre. Dans ces calculs, seules les fractions massiques pour NO et OH (figure 1.19) sont éloignées des mesures expérimentales, comme attendu d'après l'analyse et la construction des flammes laminares utilisées dans la tabulation.

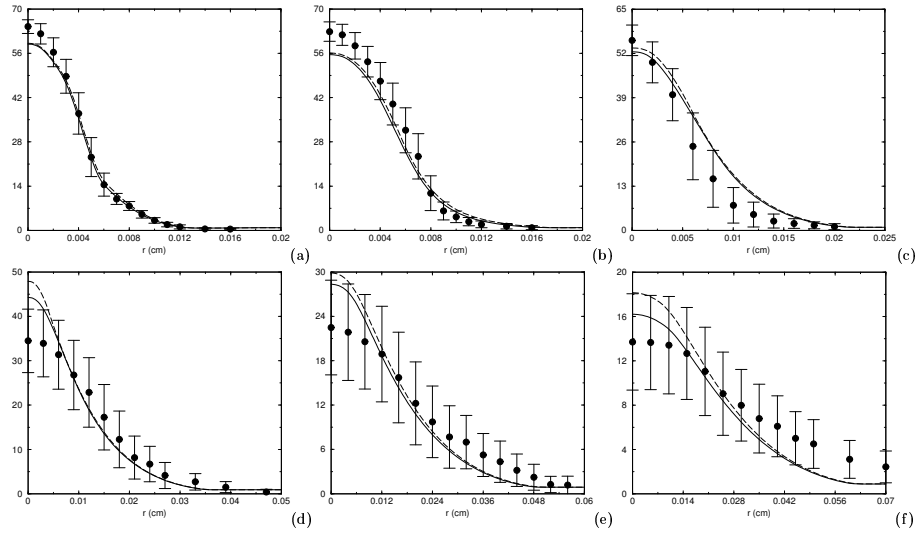


FIG. 1.9 – Profils radiaux de la vitesse axiale moyenne \tilde{u} (m/s). Pointillés : approximation au premier ordre. Trait : approximation au second ordre. (a) : $X/D=3.0$ (b) : $X/D=7.5$ (c) : $X/D=15$ (d) : $X/D=30$ (e) : $X/D=45$ (f) : $X/D=60$.

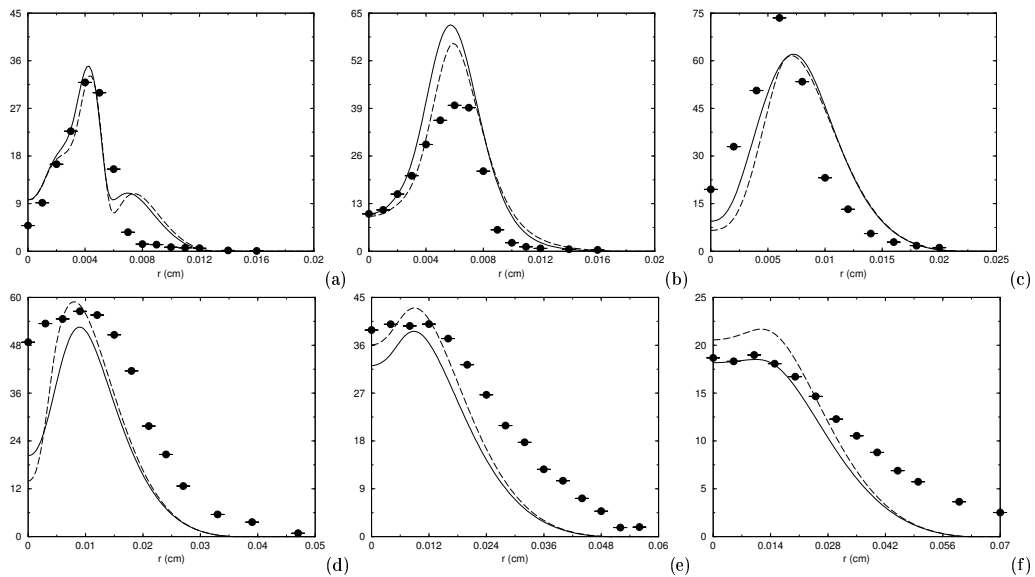


FIG. 1.10 – Profils radiaux de l'énergie cinétique turbulente \tilde{k} . Pointillés : approximation au premier ordre. Trait : approximation au second ordre. (a) : $X/D=3.0$ (b) : $X/D=7.5$ (c) : $X/D=15$ (d) : $X/D=30$ (e) : $X/D=45$ (f) : $X/D=60$.

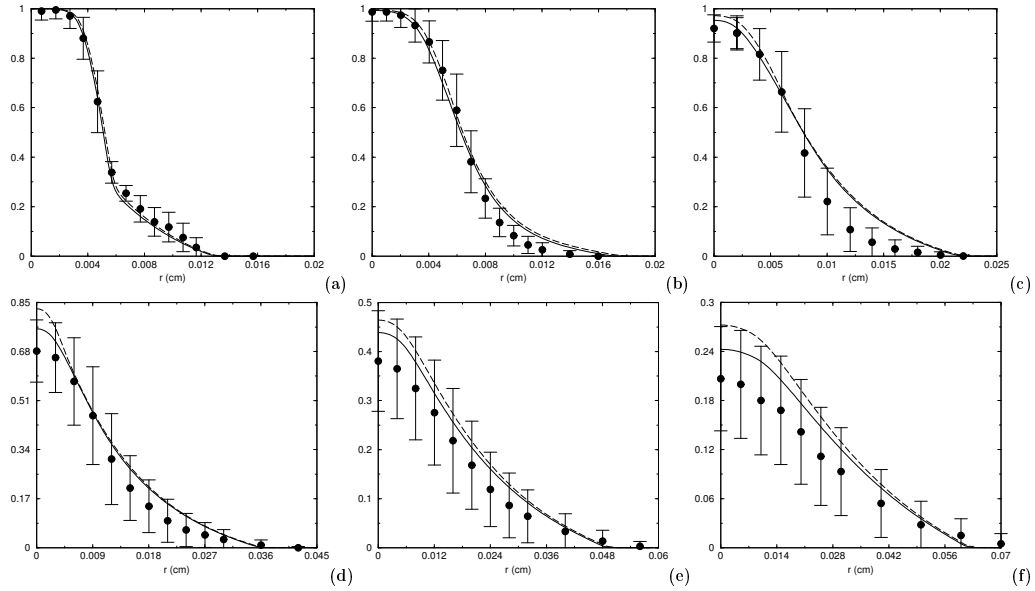


FIG. 1.11 – Profils radiaux de la fraction de mélange \tilde{Z} . Pointillés : approximation au premier ordre. Trait : approximation au second ordre. (a) : $X/D=3.0$ (b) : $X/D=7.5$ (c) : $X/D=15$ (d) : $X/D=30$ (e) : $X/D=45$ (f) : $X/D=60$.

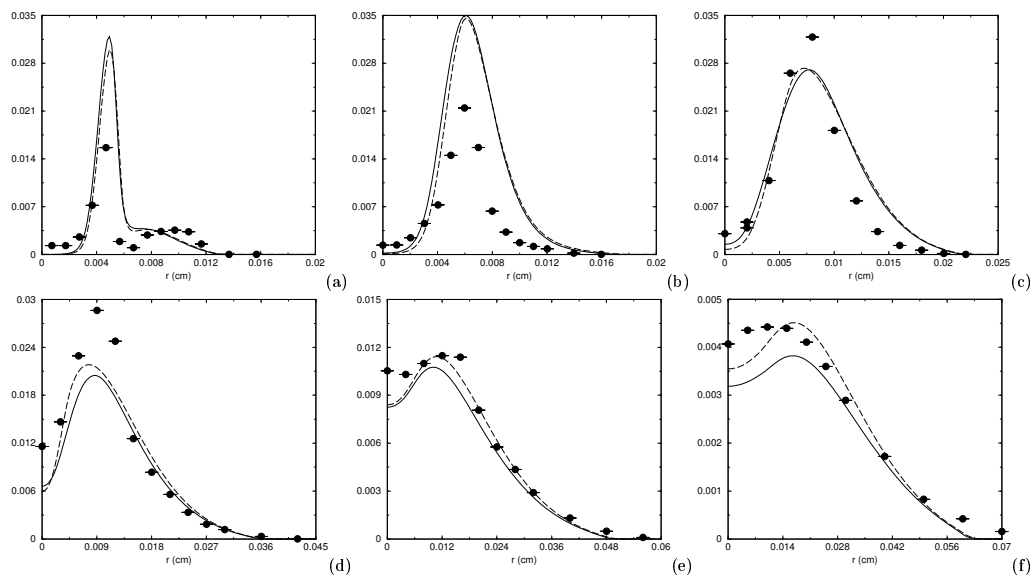


FIG. 1.12 – Profils radiaux de la variance de la fraction de mélange \tilde{Z}^2 . Pointillés : approximation au premier ordre. Trait : approximation au second ordre. (a) : $X/D=3.0$ (b) : $X/D=7.5$ (c) : $X/D=15$ (d) : $X/D=30$ (e) : $X/D=45$ (f) : $X/D=60$.

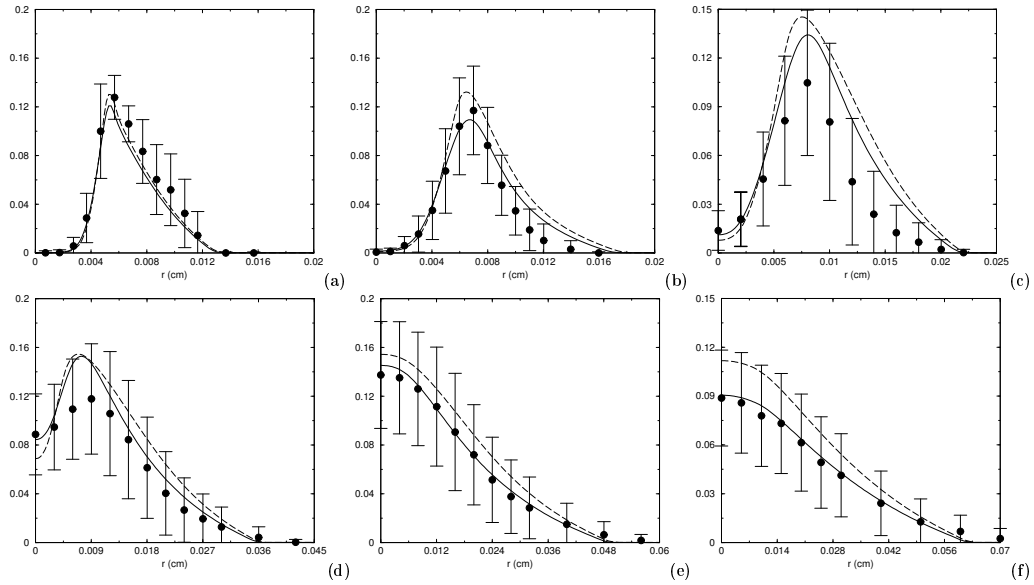


FIG. 1.13 – Profils radiaux de la variable de progrès \tilde{Y}_c . Pointillés : approximation au premier ordre. Trait : approximation au second ordre. (a) : $X/D=3.0$ (b) : $X/D=7.5$ (c) : $X/D=15$ (d) : $X/D=30$ (e) : $X/D=45$ (f) : $X/D=60$.

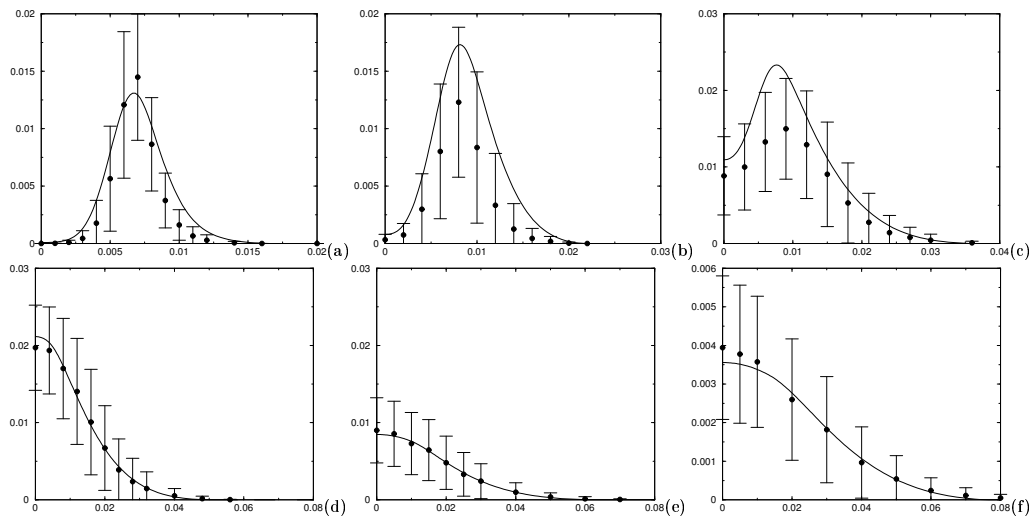


FIG. 1.14 – profils radiaux de la fraction massique moyenne $\widetilde{Y}_c \widetilde{Y}_c$. Trait : approximation au second ordre. (a) : $X/D=7.5$ (b) : $X/D=15$ (c) : $X/D=30$ (d) : $X/D=45$ (e) : $X/D=60$ (f) : $X/D=75$.

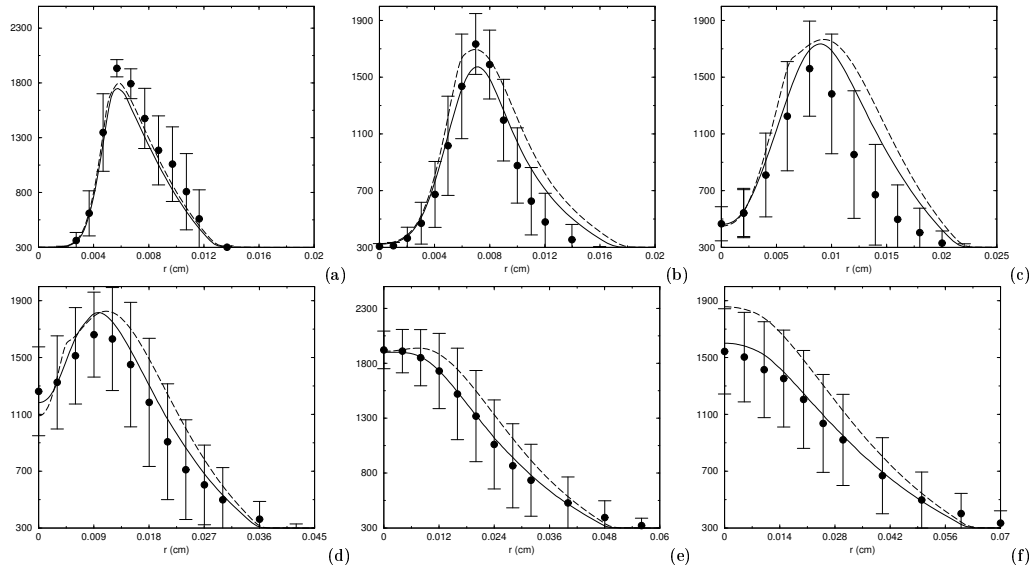


FIG. 1.15 – Profils de la température \tilde{T} (Kelvin). Pointillés : approximation au premier ordre. Trait : approximation au second ordre. (a) : $X/D=3.0$ (b) : $X/D=7.5$ (c) : $X/D=15$ (d) : $X/D=30$ (e) : $X/D=45$ (f) : $X/D=60$.

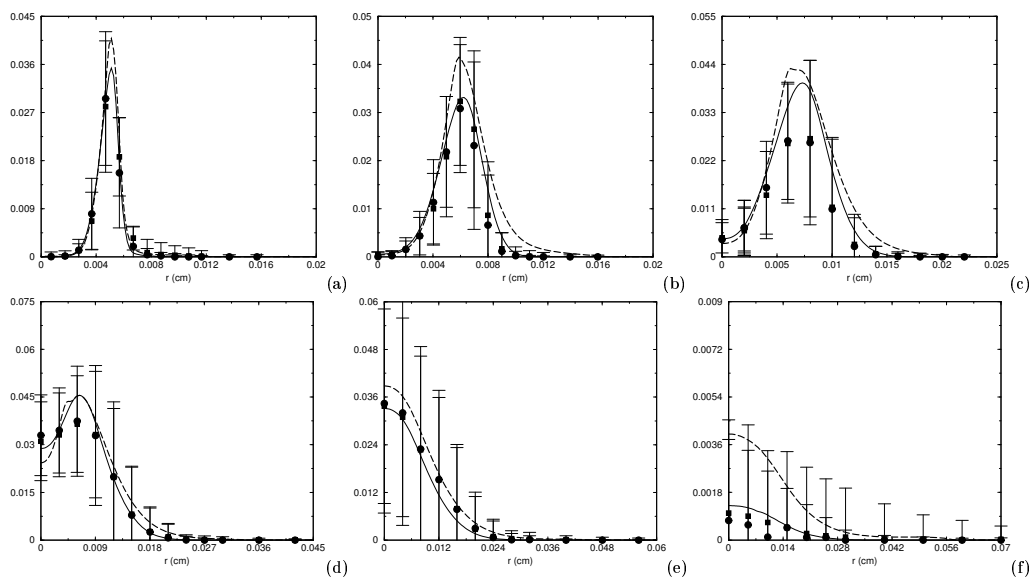


FIG. 1.16 – Profils radiaux de la fraction massique moyenne de CO \tilde{Y}_{CO} . Pointillés : approximation au premier ordre. Trait : approximation au second ordre. (a) : $X/D=3.0$ (b) : $X/D=7.5$ (c) : $X/D=15$ (d) : $X/D=30$ (e) : $X/D=45$ (f) : $X/D=60$.

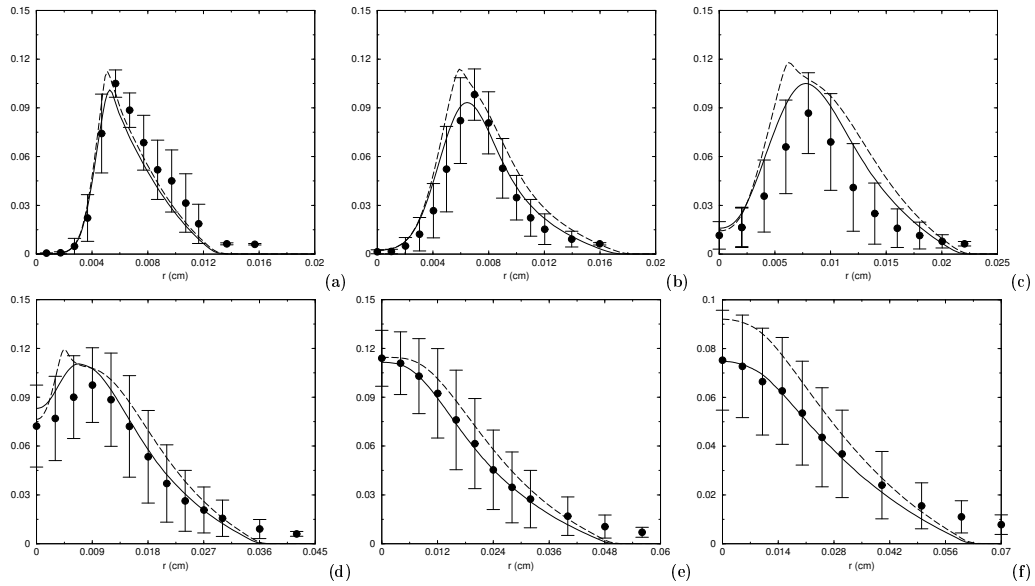


FIG. 1.17 – Profils radiaux de la fraction massique moyenne de H_2O $\tilde{Y}_{\text{H}_2\text{O}}$. Pointillés : approximation au premier ordre. Trait : approximation au second ordre. (a) : $X/D=3.0$ (b) : $X/D=7.5$ (c) : $X/D=15$ (d) : $X/D=30$ (e) : $X/D=45$ (f) : $X/D=60$.

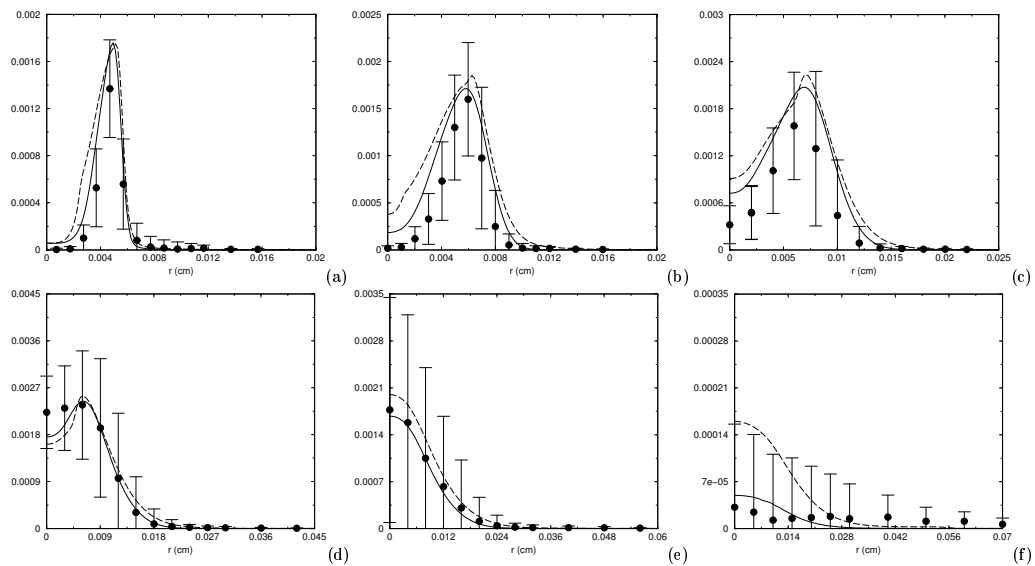


FIG. 1.18 – Profils radiaux de la fraction massique moyenne de H_2 \tilde{Y}_{H_2} . Pointillés : approximation au premier ordre. Trait : approximation au second ordre. (a) : $X/D=3.0$ (b) : $X/D=7.5$ (c) : $X/D=15$ (d) : $X/D=30$ (e) : $X/D=45$ (f) : $X/D=60$.

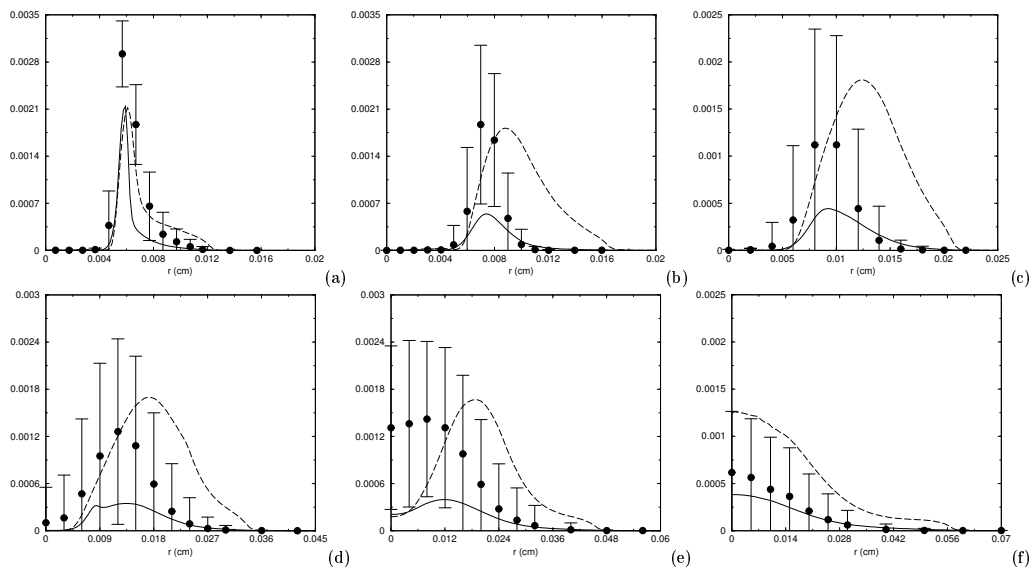


FIG. 1.19 – Profils radiaux de la fraction massique moyenne de OH \tilde{Y}_{OH} . Pointillés : approximation au premier ordre. Trait : approximation au second ordre. (a) : $X/D=3.0$ (b) : $X/D=7.5$ (c) : $X/D=15$ (d) : $X/D=30$ (e) : $X/D=45$ (f) : $X/D=60$.

Conclusion :

La méthode PCM-FTC est donc opérationnelle pour calculer, avec des temps CPU très faibles, un système non-prémélangé, en incluant la prise en compte des effets de chimie non infiniment rapide et la prédiction précise des niveaux de dégagement de chaleur, du champ de température et des concentrations en monoxyde de carbone (CO).

Chapitre 2

Flamme F

La différence entre les flammes D et F réside dans la vitesse d'injection du combustible et des flammes pilotes. Le nombre de Reynolds est de l'ordre de 44800. La turbulence agit fortement sur la zone de réaction et étire le front de flamme, ce qui provoque de nombreuses extinctions locales.

2.1 Moyennes conditionnées à Z^*

Les moyennes conditionnées sont tracées sur les figures 2.1 à 2.5. Les résultats des calculs au second ordre (traits) sont comparés aux données expérimentales (pointillés et symboles : rms). En raison des niveaux de turbulence nettement plus forts dans la flamme F que dans la flamme D, les différences entre ces deux configurations se résument par :

- des moyennes conditionnées plus faibles pour la température (figure 2.2) et les produits de combustion (figures 2.1),
- des niveaux de fluctuation autour de la moyenne conditionnée plus forts (bars).

Le modèle de combustion PCM-FTC capture ces deux principales caractéristiques et les niveaux de concentration du monoxyde de carbone (figure 2.3) sont prédites avec une tolérance acceptable pour des calculs RANS. On observe une surestimation du CO dans la zone pauvre et une sous-estimation dans la zone riche de la flamme.

La fraction massique de OH (figure 2.4) est généralement sous-estimée par les calculs.

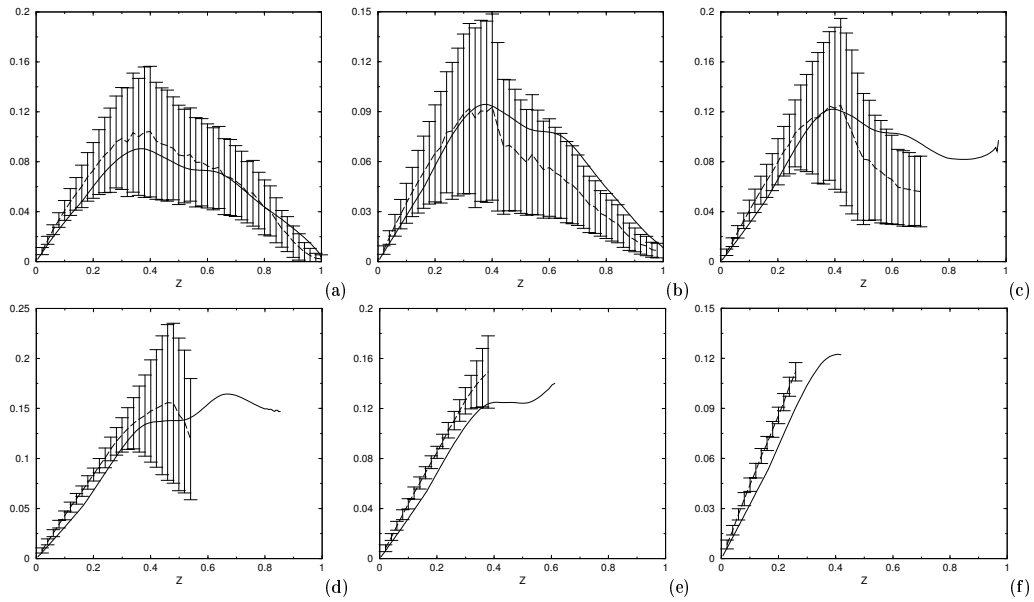


FIG. 2.1 – Moyennes conditionnées $(\overline{Y_c|Z^*})$ à différentes hauteurs dans la flamme F. Trait : PCM-FTC, approximation au second ordre. Pointillés et bars : Expérience et les rms. (a) : $X/D=7.5$ (b) : $X/D=15$ (c) : $X/D=30$ (d) : $X/D=45$ (f) : $X/D=60$. (g) : $X/D=75$.

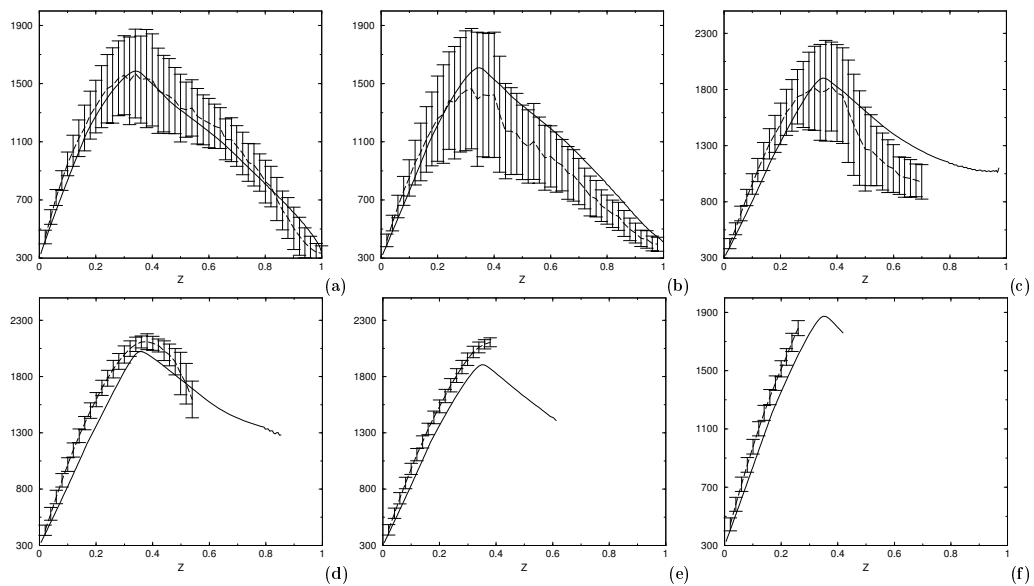


FIG. 2.2 – Moyennes conditionnées $(\overline{T|Z^*})$ à différentes hauteurs dans la flamme F. Trait : PCM-FTC, approximation au second ordre. Pointillés et bars : Expérience et les rms. (a) : $X/D=7.5$ (b) : $X/D=15$ (c) : $X/D=30$ (d) : $X/D=45$ (f) : $X/D=60$. (g) : $X/D=75$.

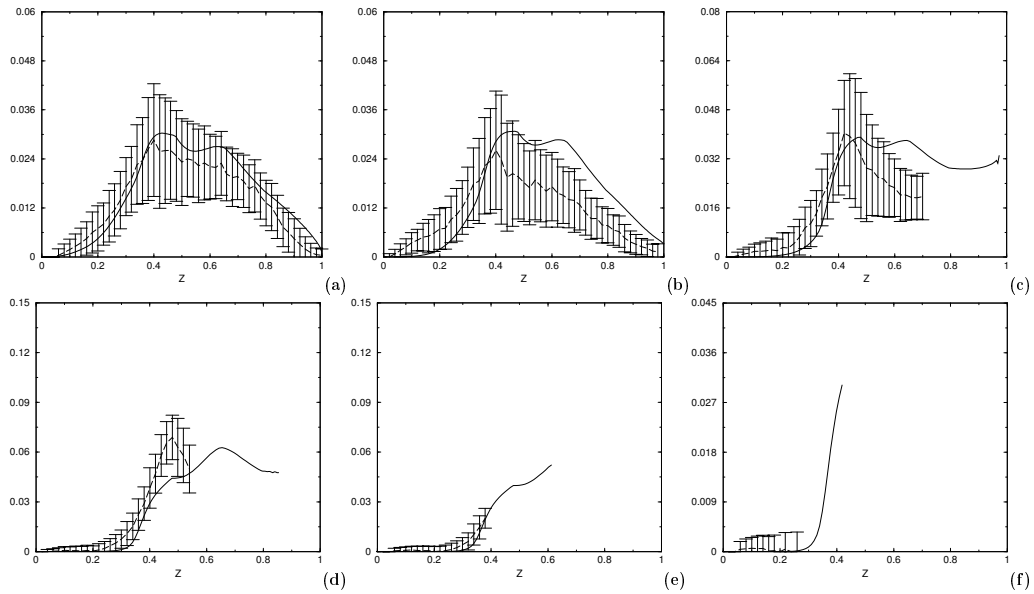


FIG. 2.3 – Moyennes conditionnées ($\overline{CO|Z^*}$) à différentes hauteurs dans la flamme F. Trait : PCM-FTC, approximation au second ordre. Pointillés et bars : Expérience et les rms. (a) : $X/D=7.5$ (b) : $X/D=15$ (c) : $X/D=30$ (d) : $X/D=45$ (e) : $X/D=60$. (g) : $X/D=75$.

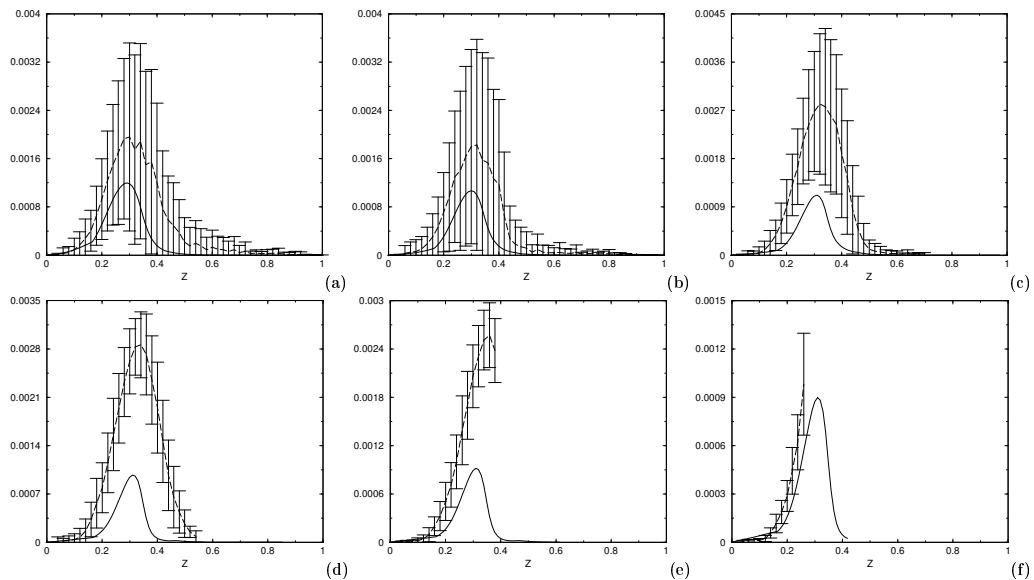


FIG. 2.4 – Moyennes conditionnées ($\overline{OH|Z^*}$) à différentes hauteurs dans la flamme F. Trait : PCM-FTC, approximation au second ordre. Pointillés et bars : Expérience et les rms. (a) : $X/D=7.5$ (b) : $X/D=15$ (c) : $X/D=30$ (d) : $X/D=45$ (e) : $X/D=60$. (g) : $X/D=75$.

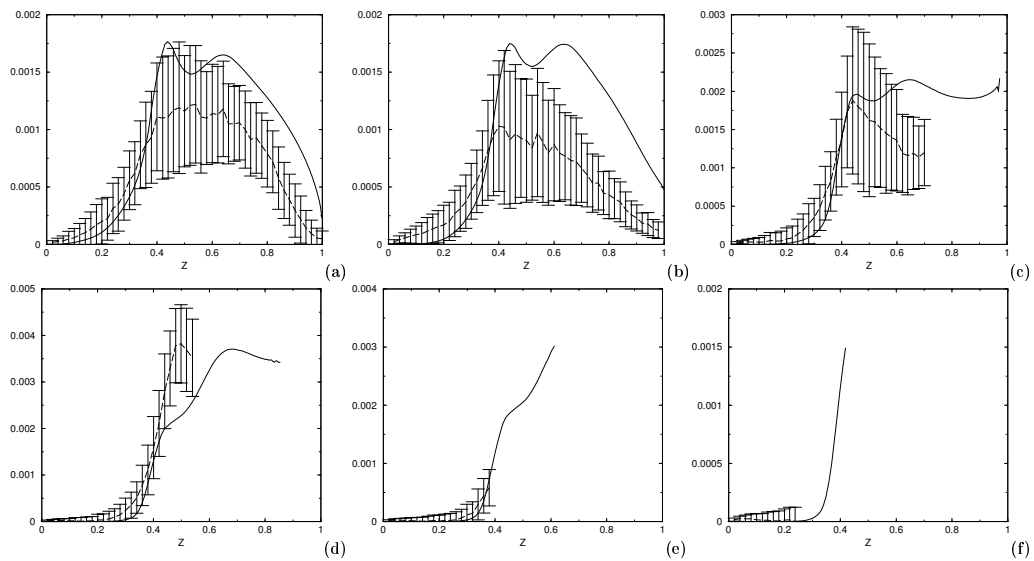


FIG. 2.5 – Moyennes conditionnées ($\overline{H_2|Z^*}$) à différentes hauteurs dans la flamme F. Trait : PCM-FTC, approximation au second ordre. Pointillés et bars : Expérience et les rms. (a) : $X/D=7.5$ (b) : $X/D=15$ (c) : $X/D=30$ (d) : $X/D=45$ (e) : $X/D=60$. (f) : $X/D=75$.

2.2 Moyennes de Favre

Dans les calculs de la flamme D, on a montré que l'approximation au second ordre permettait de capturer avec précision les fractions massiques des espèces chimiques. La prise en compte des fluctuations d'avancement était déjà un paramètre important dans la modélisation de la combustion turbulente.

Pour la flamme F, les niveaux de fluctuation d'avancement sont plus élevés en raison d'une plus grande fréquence d'extinctions locales de la flamme. Ainsi l'approximation au premier ordre ne peut pas convenir à ce type de configuration.

Les niveaux de fluctuation d'avancement sont suffisamment grands pour rendre la dissipation scalaire, χ_{Y_c} , importante dans la modélisation de la combustion turbulente. Ce terme est fermé par la relation

$$\chi_{Y_c} = \frac{\widetilde{Y_c''^2}}{\tau_t}$$

Avec $\tau_t = (1/C)k/\epsilon$ un temps caractéristique turbulent supposé proportionnel au temps caractéristique du scalaire. "C" est donc une constante qu'il est nécessaire de fixer. Dans les calculs de la flamme D, $C = 0.5$ est choisie afin d'optimiser la prédiction des espèces chimiques. Dans les calculs de la flamme F, cette constante reste inchangée. Un calcul supplémentaire est réalisé en fixant $C=0.2$ dans le but de mesurer son influence sur les

résultats.

– Le mélange

La fraction de mélange, \tilde{Z} , (figure 2.6) et les niveaux de fluctuation du mélange, $\widetilde{Z''^2}$ (figure 2.7) sont correctement reproduits avec des prédictions similaires aux calculs de la flamme D. L'influence du choix de la constante C est déjà visible sur ces résultats. Le mélange est modifié par les niveaux de température dans la flamme.

– La réaction

Les niveaux de variable de progrès, \tilde{Y}_c (figure 2.8), ainsi que $\widetilde{Y}_c\tilde{Y}_c$ (figure 2.9) sont nettement plus faibles dans la flamme F que dans la flamme D en raison des fluctuations d'avancement et de richesse plus élevées. Ce résultat est retrouvé avec le modèle PCM-FTC.

Une constante $C=0.5$ pour le modèle de dissipation scalaire de Y_c (identique à la flamme D) permet de prédire avec précision la majorité des points de mesure expérimentaux. Seule, aux positions proches de $X/D = 15$, la variable de progrès est fortement surestimée. Il en est de même pour le produit $\widetilde{Y}_c\tilde{Y}_c$ avec une surestimation importante entre les positions $X/D=7.5$ et 15 . Changer la valeur de la constante en supposant que la dissipation scalaire est trop forte ne permet pas d'améliorer les résultats sur l'ensemble de la flamme. En effet, les valeurs moyennes sont bien diminuées proche de $X/D = 15$ mais aussi en bout de flamme, là où les résultats étaient correctement prédits. Le modèle pour la dissipation scalaire est facilement préjudiciable et une équation de transport (Mura and Borghi, 2003) pourrait être une solution possible. Ce test n'a pas été développé au cours de cette thèse.

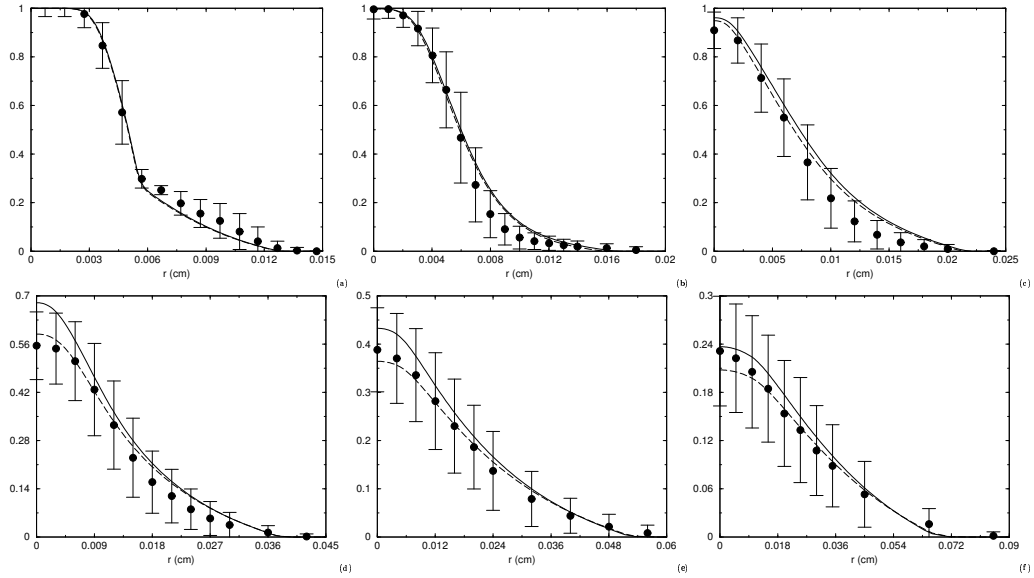


FIG. 2.6 – Profils radiaux de la fraction de mélange moyenne \tilde{Z} dans la flamme F. Poin-
tillés : $c=0.5$. Trait : $c=0.2$ (avec c la constante de χ_{Y_c}). (a) : $X/D=3.0$ (b) : $X/D=7.5$
(c) : $X/D=15$ (d) : $X/D=30$ (e) : $X/D=45$ (f) : $X/D=60$.

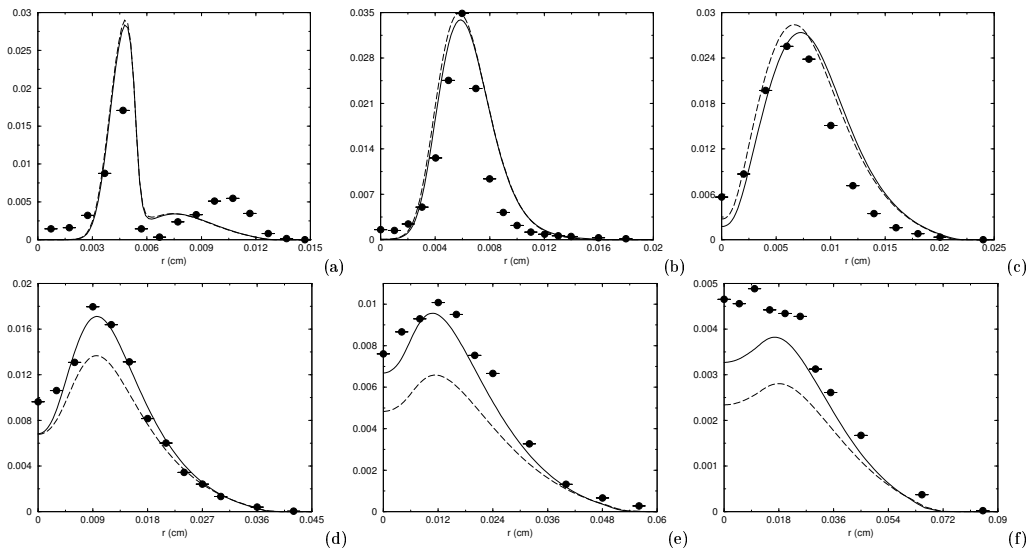


FIG. 2.7 – Profils radiaux de la variance de la fraction de mélange \tilde{Z}''^2 dans la flamme F.
Poinillés : $c=0.5$, trait : $c=0.2$ (avec c la constante de χ_{Y_c}). (a) : $X/D=3.0$ (b) : $X/D=7.5$
(c) : $X/D=15$ (d) : $X/D=30$ (e) : $X/D=45$ (f) : $X/D=60$.

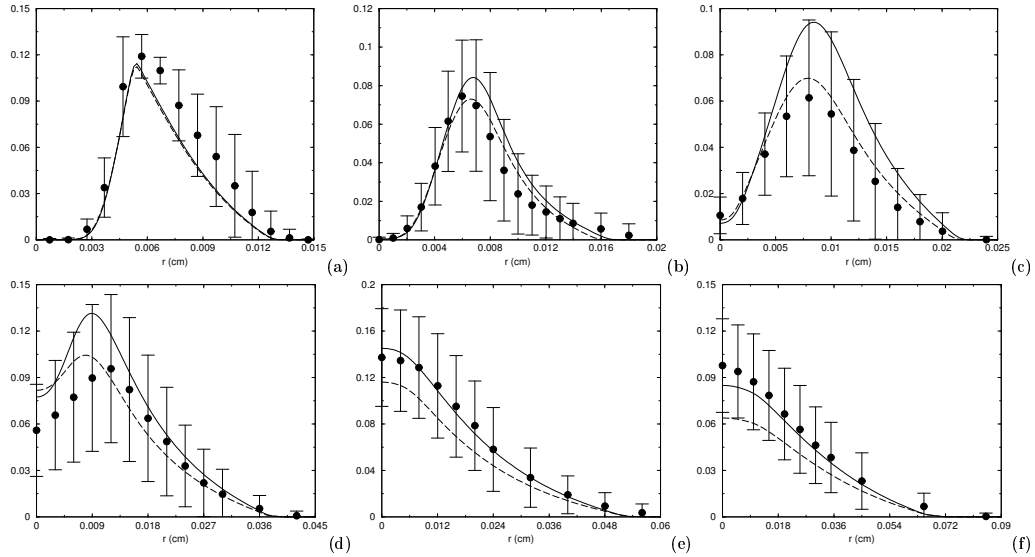


FIG. 2.8 – Profils radiaux de la variable de progrès moyenne \tilde{Y}_c dans la flamme F. Poin-
tillés : $c=0.5$, trait : $c=0.2$ (avec c la constante de χ_{Y_c}). (a) : $X/D=3.0$ (b) : $X/D=7.5$ (c) :
 $X/D=15$ (d) : $X/D=30$ (e) : $X/D=45$ (f) : $X/D=60$.

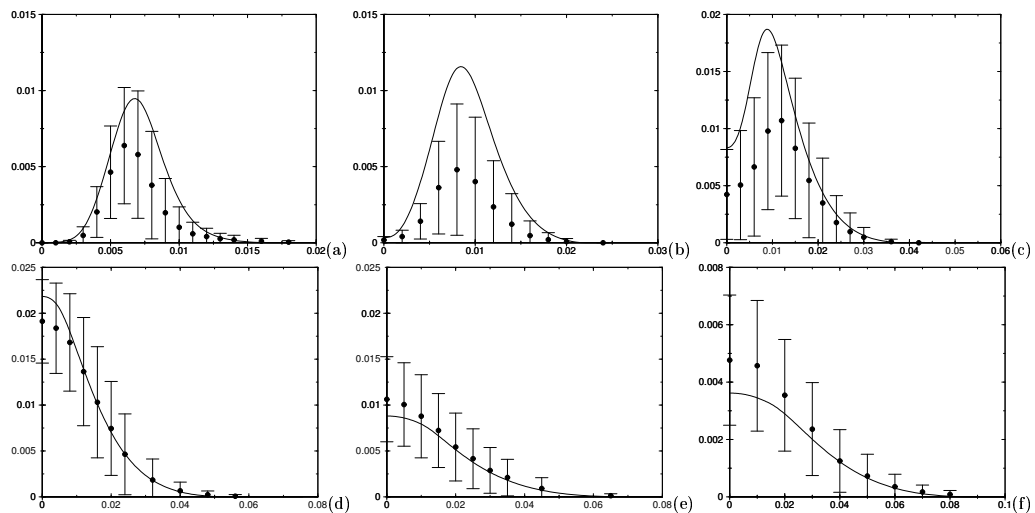


FIG. 2.9 – Profils radiaux de la fraction massique moyenne $\tilde{Y}_c \tilde{Y}_c$ dans la flamme F. Trait :
approximation au second ordre. (a) : $X/D=7.5$ (b) : $X/D=15$ (c) : $X/D=30$ (d) : $X/D=45$
(e) : $X/D=60$ (f) : $X/D=75$.

– Fraction massique de CO

La fraction massique de CO calculée par le modèle PCM-FTC (figure 2.10) est en bon accord avec l'expérience à l'exception des positions voisines de $X/D=15$. Ce résultat est complémentaire aux calculs de \tilde{Y}_c et cet écart à l'expérience peut être expliqué par les nombreuses extinctions locales de la flamme. Pour quantifier ces extinctions, on a construit la probabilité d'avoir un niveau de température aux points de mélange stœchiométrique. Pour une hauteur de flamme fixée ($X/D=\text{constante}$), il existe une collection de points de mélange stœchiométrique instantanés (Z_{st}). On stocke en mémoire les températures instantanées correspondantes pour ainsi construire la probabilité d'avoir une température T^* en Z_{st} . Le résultat est tracé sur la figure 2.11 pour les positions $X/D=15$ et 30. Dans le cas de la flamme D, les extinctions locales sont peu nombreuses, contrairement à la flamme F et principalement à la position $X/D=15$. À cette hauteur, il existe autant de chance d'avoir une température proche de 900 K que 1900 K.

- Pour la température (figure 2.12) et les autres espèces chimiques (H_2O , figure 2.13, H_2 figure 2.14, OH figure 2.15), les différences entre les profils obtenus par la méthode PCM-FTC et l'expérience sont du même ordre de grandeur que les espèces étudiées précédemment.

Conclusion :

Comme pour la flamme D, la comparaison entre les mesures et les calculs confirme la validité de la méthode PCM-FTC. Les résultats sont similaires à ceux précédemment disponibles dans la littérature, mais ils sont ici obtenus avec des temps CPU très modestes. La prédiction du CO côté riche reste un point dur pour toutes les approches, il est donc fort probable que les cinétiques chimiques ne soient pas totalement opérationnelles pour ces zones riches.

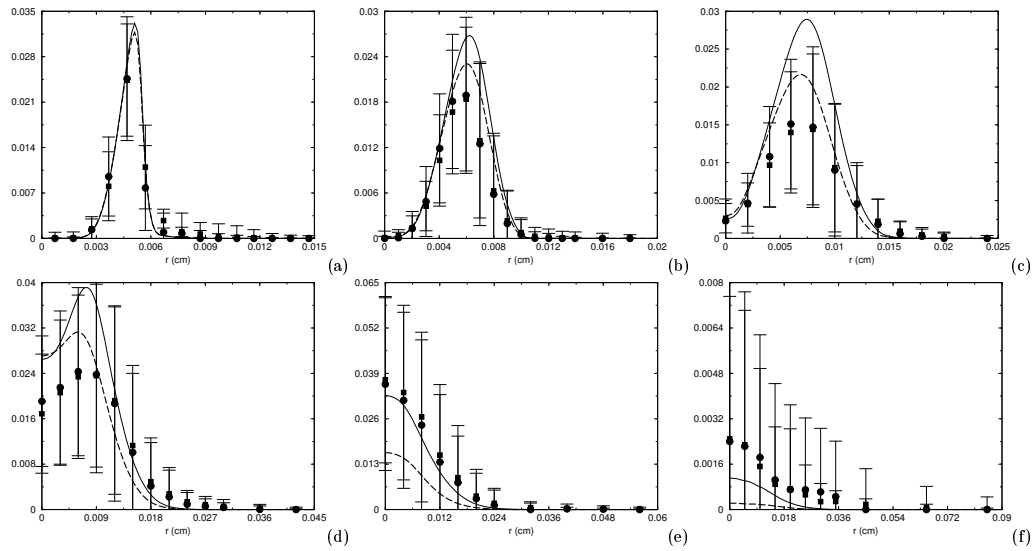


FIG. 2.10 – Profils radiaux de la fraction massique moyenne \tilde{Y}_{CO} dans la flamme F. Pointillés : $c=0.5$, trait : $c=0.2$ (avec c la constante de χ_{Y_c}). (a) : $X/D=3.0$ (b) : $X/D=7.5$ (c) : $X/D=15$ (d) : $X/D=30$ (e) : $X/D=45$ (f) : $X/D=60$.

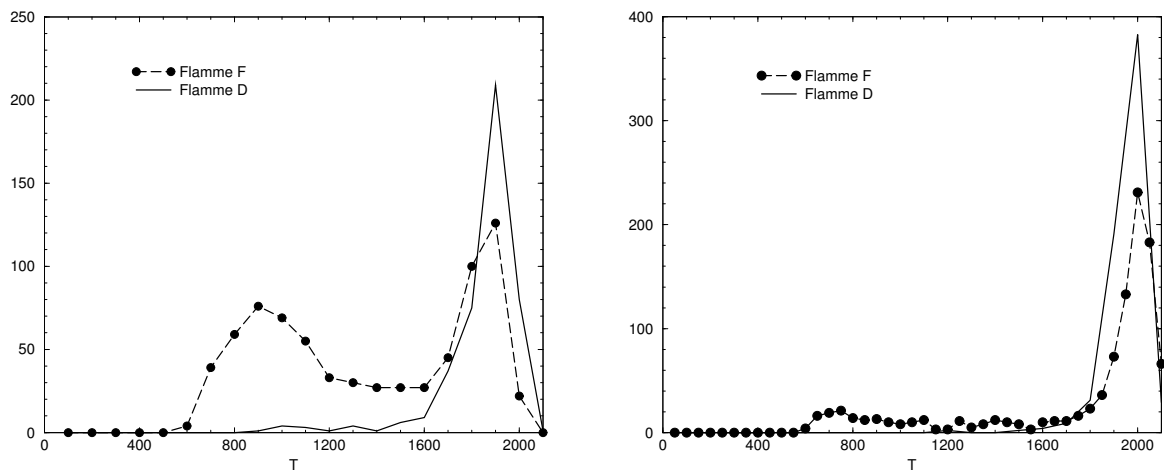


FIG. 2.11 – Profils des pdfs de T conditionnées à la stœchiométrie $\overline{T^* | Z_{st}}$ dans les flammes D et F. gauche : $X/D=15$ droite : $X/D=30$.

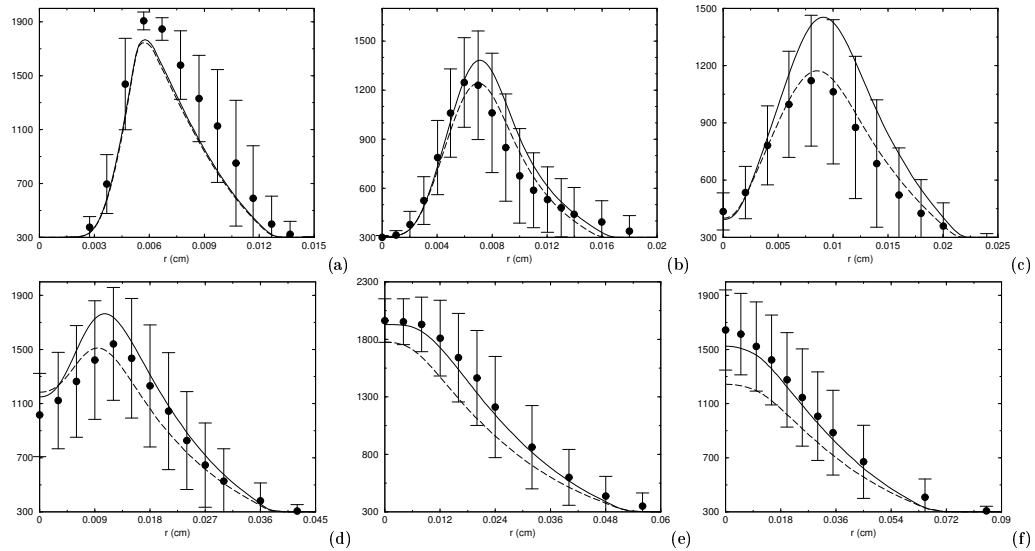


FIG. 2.12 – Profils radiaux de la température \tilde{T} (Kelvin) dans la flamme F. Pointillés : $c=0.5$, trait : $c=0.2$ (avec c la constante de χ_{Y_c}). (a) : $X/D=3.0$ (b) : $X/D=7.5$ (c) : $X/D=15$ (d) : $X/D=30$ (e) : $X/D=45$ (f) : $X/D=60$.

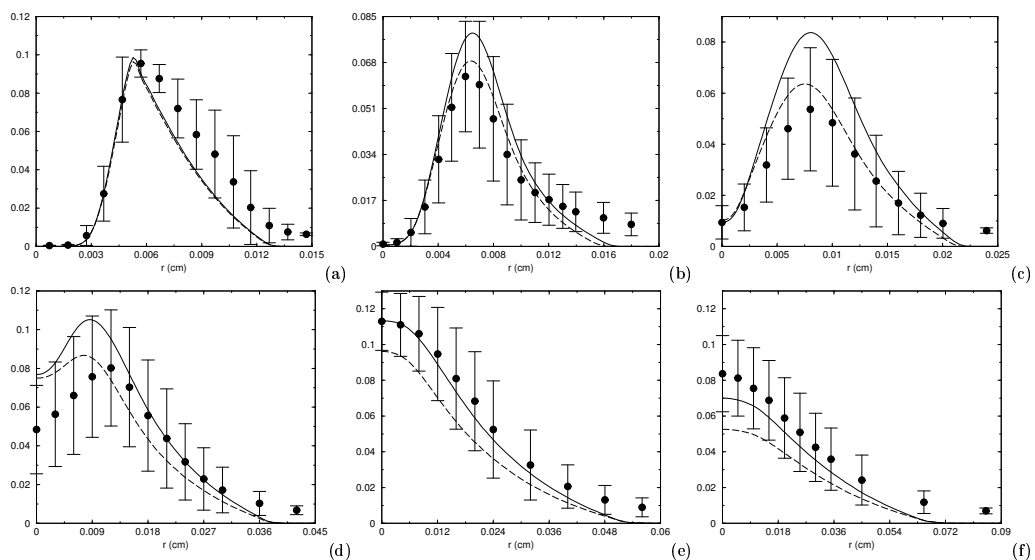


FIG. 2.13 – Profils radiaux de la fraction massique moyenne de H_2O \tilde{Y}_{H_2O} dans la flamme F. Pointillés : $c=0.5$, trait : $c=0.2$ (avec c la constante de χ_{Y_c}). (a) : $X/D=3.0$ (b) : $X/D=7.5$ (c) : $X/D=15$ (d) : $X/D=30$ (e) : $X/D=45$ (f) : $X/D=60$.

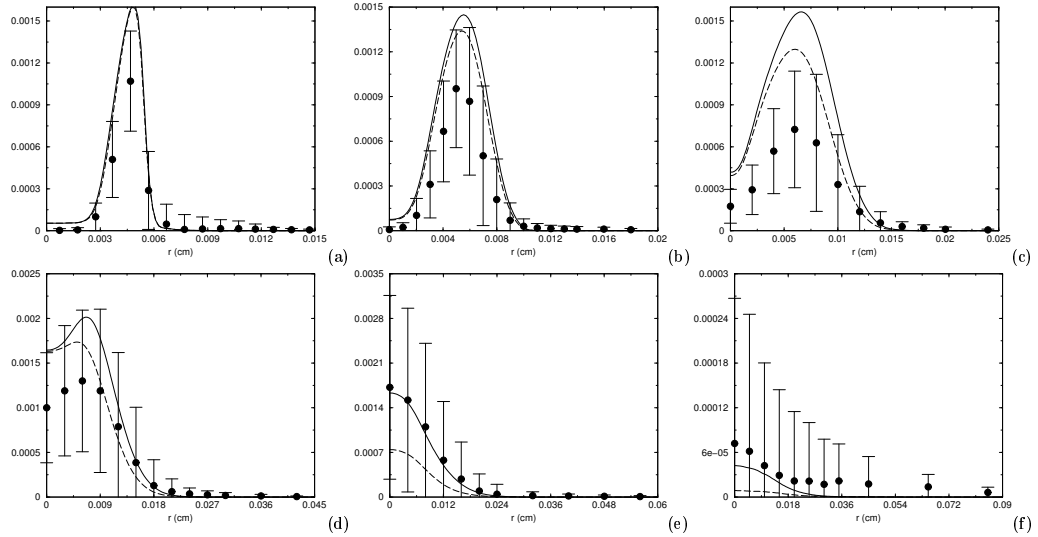


FIG. 2.14 – Profils radiaux de la fraction massique moyenne H_2 , \tilde{Y}_{H_2} dans la flamme F. Pointillés : $c=0.5$, trait : $c=0.2$ (avec c la constante de χ_{Y_c}). (a) : $X/D=3.0$ (b) : $X/D=7.5$ (c) : $X/D=15$ (d) : $X/D=30$ (e) : $X/D=45$ (f) : $X/D=60$.

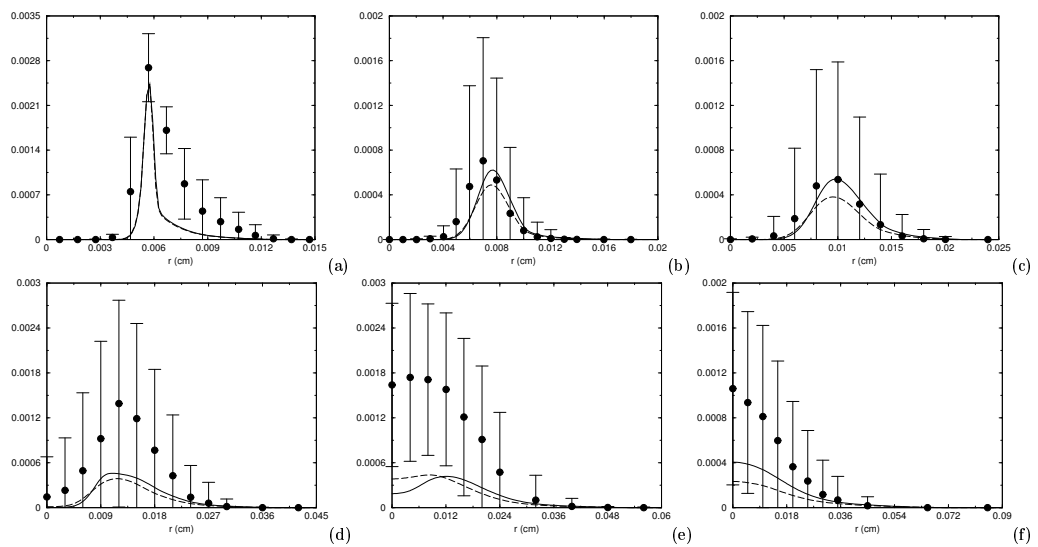


FIG. 2.15 – Profils radiaux de la fraction massique moyenne OH , \tilde{Y}_{OH} dans la flamme F. Pointillés : $c=0.5$, trait : $c=0.2$ (avec c la constante de χ_{Y_c}). (a) : $X/D=3.0$ (b) : $X/D=7.5$ (c) : $X/D=15$ (d) : $X/D=30$ (e) : $X/D=45$ (f) : $X/D=60$.

Chapitre 3

Flammes liftées

Les hauteurs de décollement des flammes jets turbulentes sont définies par la distance entre la base de la flamme et le brûleur. Ces hauteurs sont particulièrement difficiles à capturer sans tenir compte de la cinétique chimique complexe et des effets de prémélange partiel. La prédiction des hauteurs de décollement reste un point difficile de la modélisation de la combustion turbulente. L'objectif est de prédire avec précision les zones d'accrochage de la flamme et par conséquent sa forme générale, sa longueur contrôlant aussi la formation des polluants, in fine, la longueur de la chambre dans le cas des foyers aéronautiques. La méthode PCM-FTC, qui est basée sur une tabulation de flammes prémélangées avec la chimie détaillée est parfaitement adaptée à ce type de simulation. Le cas test retenu est l'expérience de Muñiz, qui a mesuré les hauteurs de décollement d'une flamme méthane / air en fonction de la vitesse débitante du combustible et pour plusieurs vitesses de l'écoulement d'air.

3.1 Expérience de Muñiz et Mungal

Le combustible est composé de méthane à 99.0 % de pureté. Il est éjecté d'un tube (6.35 mm de diamètre extérieur et $d_i=4.83$ mm de diamètre intérieur) dans la chambre de combustion à section carrée (30cm x 30cm). La longueur du tube de méthane vaut 280 fois le diamètre d_i , ce qui assure un jet turbulent parfaitement établi.

Les hauteurs de décollement sont mesurées instantanément avec une caméra CCD, Pulnix TDM540. Pour chaque point de mesure, 88 images sont acquises permettant de déterminer les hauteurs moyennes et les fluctuations (rms).

Les informations complémentaires sur la configuration et les méthodes de mesure expérimentales sont dans la thèse (Muniz, 2002).

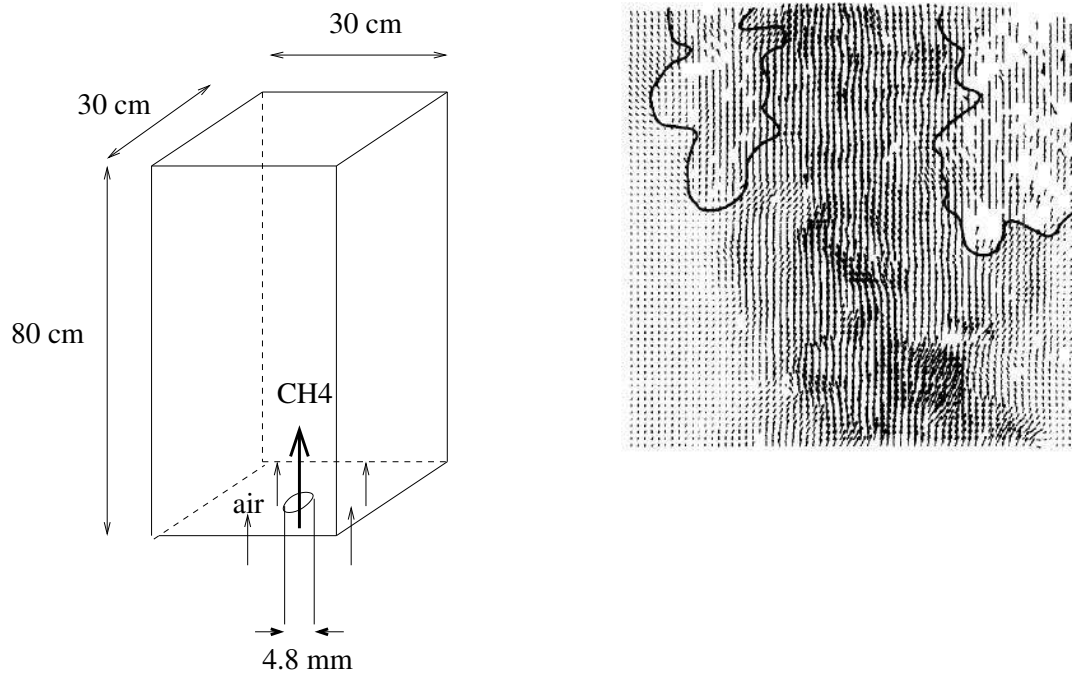


FIG. 3.1 – Configuration expérimentale de la flamme de Muñiz et champ de vitesse instantané à la base de la flamme (trait plein : front de flamme).

3.2 Configuration numérique

Modèle de combustion

Avec l'approximation PCM au premier ordre, la flamme est décollée du brûleur, mais les hauteurs de décollement restent de quelques diamètres, loin des mesures expérimentales. Avec l'approximation au second ordre, la convergence du calcul est difficile et il a été observé un comportement peu physique, puisqu'en augmentant le débit de combustible la flamme se rapproche du brûleur. Ce phénomène est supposé provenir de la fermeture de la dissipation scalaire de Y_c dans l'équation de transport pour $\widetilde{Y_c Y_c}$ (équation 21). Les problèmes sont directement liés à la structure spécifique de la base de la flamme. Le front partiellement prémélangé est mince et la dissipation de la variable d'avancement est fortement influencée par le passage des flammelettes. Des études utilisant la simulation numérique directe ont confirmé que, dans ce régime, le niveau de fluctuations d'avancement est très élevé (Domingo et al., 2002).

Pour ces raisons, un calcul a été réalisé, non pas en recalant la constante pour la dissipation scalaire, mais en fixant directement à une valeur élevée le facteur de ségrégation

de la variable réactive,

$$S_c = \frac{\overline{c''^2}}{\bar{c}(1 - \bar{c})}$$

Les résultats sont présentés dans la section suivante avec $S_c = 0,95$. Cette valeur sera discutée dans la dernière partie, sur les prédictions de soufflage de flamme.

Maillage

Le logiciel "Fluent" version 6.1 est utilisé avec le modèle de turbulence $k - \epsilon$ réalisable. Le calcul est axi-symétrique et la correction de Pope pour les jets ronds est ajoutée dans l'équation pour ϵ . Le schéma numérique est implicite et au second ordre.

Le maillage non structuré est constitué de 27136 triangles pour une géométrie de (0.15 m x 1 m). Les temps de calculs sont très rapides (quelques minutes sur un mono-processeur Xeon).

Convergence et influence des conditions initiales

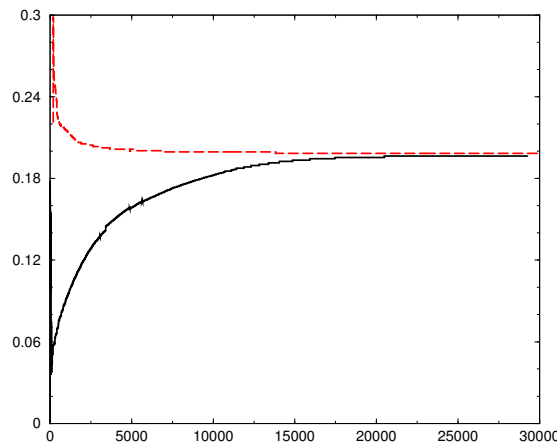


FIG. 3.2 – Hauteurs de décollement L (en m) au cours des itérations pour deux allumages différents (équilibre chimique sur tout le domaine ou à partir de $x=0.3$ m).

Le calcul est convergé lorsque la position du taux de réaction maximum de la variable de progrès est fixé. La figure 3.2 montre la position axiale de ce maximum au cours des itérations. Il faut donc environ 20000 itérations pour converger les calculs.

L'influence de la condition initiale a été testé en allumant la flamme en amont et en aval de la solution convergé. La figure 3.2 indique la position du maximum du taux de

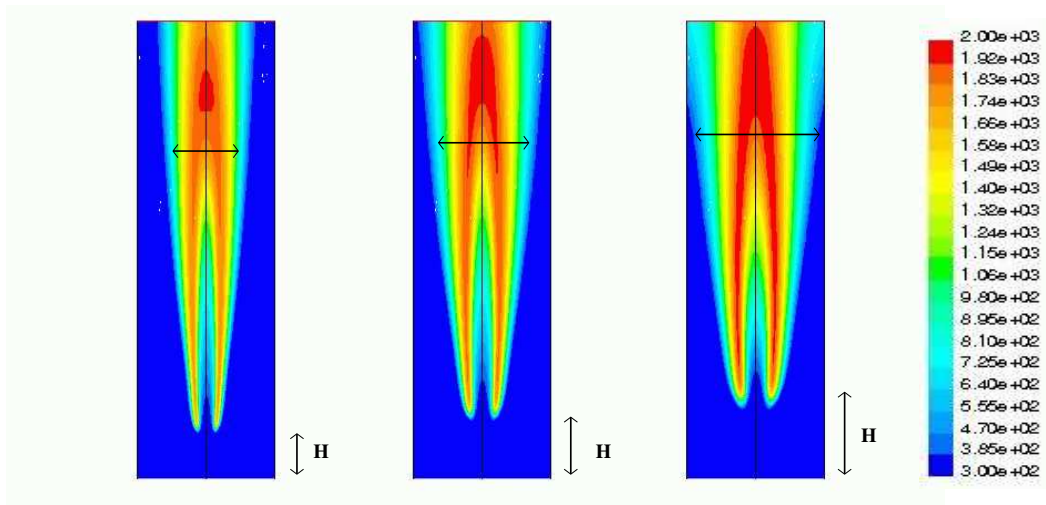


FIG. 3.3 – Champ de température (en Kelvin). gauche : $U=15$ m/s centre : $U=38$ m/s droite : $U=51$ m/s

réaction pour deux conditions initiales différentes. Ces calculs montrent que la hauteur de décollement du calcul convergé est indépendante de la condition d'allumage de la flamme.

Etude qualitative

Les résultats du champ de température (figure 3.3) et du taux de réaction chimique (figure 3.4) sont présentés pour 3 vitesses débitantes du combustible. La vitesse de l'air est fixée à 0.34 m/s. On observe la compétition entre l'écoulement et la propagation de la flamme qui entraîne des hauteurs de décollement plus importantes avec une vitesse d'injection du méthane plus forte. Sur la figure 3.5 sont tracés les vecteurs vitesses, le taux de réaction sur la figure de gauche et la densité sur la figure de droite. On observe alors le contournement de l'écoulement proche de la zone de réaction.

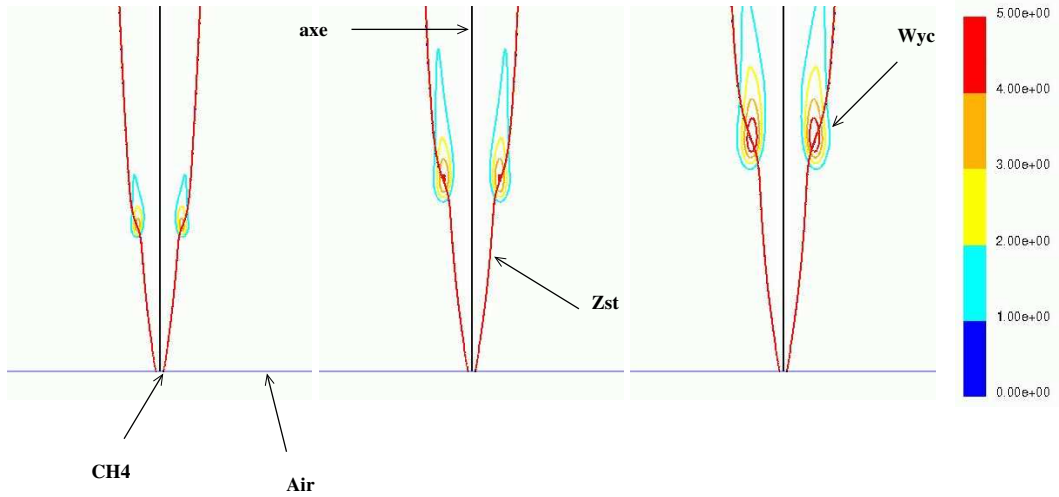


FIG. 3.4 – Taux de réaction de Y_c (en s^{-1}). gauche : $U=15$ m/s centre : $U=38$ m/s droite : $U=51$ m/s

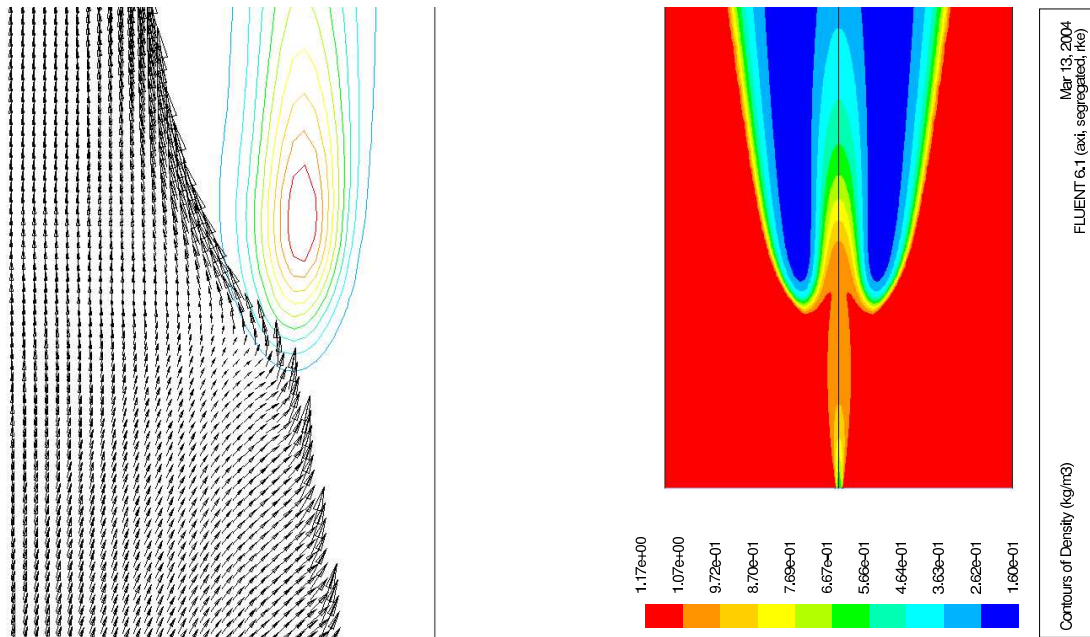


FIG. 3.5 – Champ de vitesse et densité. $U = 51$ m/s, $U_{coflow} = 0.34$ m/s.

3.3 Hauteurs de décollement

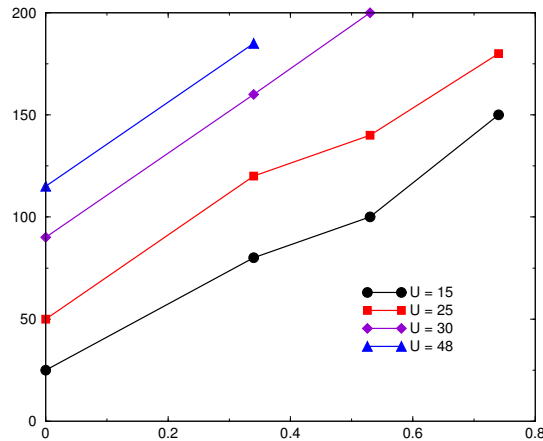


FIG. 3.6 – Hauteurs de décollement (en mm) en fonction de la vitesse de l'air pour différentes vitesses débitantes U de combustible (m/s) (expérience de Muñiz).

Muñiz et Mungal ont étudié l'influence de la vitesse de l'air sur les hauteurs de décollement. La figure 3.6 montre ces hauteurs en fonction de la vitesse de l'air pour différentes vitesses du combustible. Un comportement linéaire est observé. Celui-ci permet de définir d'autres données (hauteurs de décollement), pour des vitesses de l'air comprises entre 0 et 0.34 (Les résultats avec une vitesse d'écoulement d'air nulle étant difficilement exploitables numériquement en raison des conditions limites). Ainsi, la courbe bleue figure 3.7 ($U_{coflow} = 0.24$ m/s) est obtenue par interpolation linéaire des mesures expérimentales en $U_{coflow} = 0.34$ m/s et $U_{coflow} = 0$.

En 1998, Bradley (Bradley et al., 1998) a réalisé des calculs de flammes jets turbulentes de méthane / air. La vitesse du co-courant était nulle, mais la flamme était à l'air libre (pas de confinement). Il détermina une expression analytique des hauteurs de décollement, qui est reportée sur la figure 3.7 (pointillé orange).

$$\log(L/D) = 0.15(U/U_i)Re^{-0.35} + 0.6$$

Avec L la hauteur de décollement, D le diamètre intérieur du tube de combustible, U la vitesse débitante du combustible, U_i la vitesse de propagation de la flamme laminaire à la stœchiométrie (ici 0.34 m/s) et Re le nombre de Reynolds ($Re = \rho DU/\nu$, avec $\rho = 0.6679$ kg/m³ : la densité dans le méthane et $\nu = 1,057 \cdot 10^{-5}$: la viscosité du méthane). Cette relation est valable tant que $(U/U_i)Re^{-0.35} < 2.75$. Cette courbe est proche des résultats de Muñiz (courbe orange) avec néanmoins une sous-estimation de la pente.

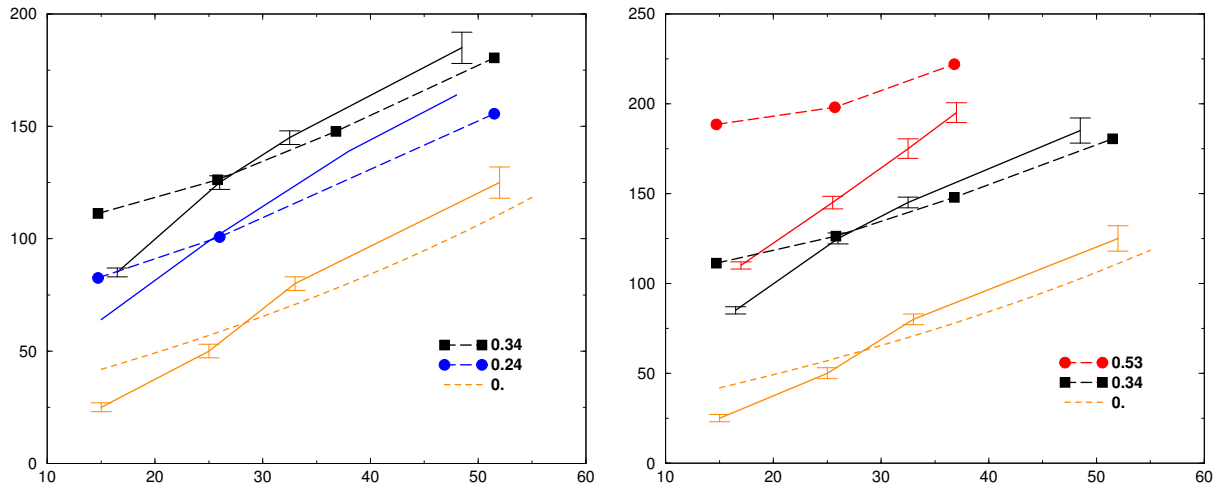


FIG. 3.7 – Hauteurs de décollement en fonction de la vitesse débitante du combustible. Trait plein : expérience bars : incertitudes. Longs pointillés : PCM-FTC, symboles : calculs Petits pointillés orange : "théorie" de Bradley (Bradley et al., 1998). La courbe bleue expérimentale sur la figure de gauche ($u_{c/o} = 0.24$) est obtenue par interpolation linéaire entre la courbe noire ($u_{c/o} = 0.34$) et la courbe orange ($u_{c/o} = 0.$).

Les hauteurs de décollement que l'on calcule avec la méthode PCM-FTC sont proches des résultats expérimentaux, avec une pente très voisine de l'expression de Bradley (voir figure gauche 3.7). Les écarts sont en revanche plus marqués avec l'augmentation de la vitesse de l'air (courbes rouges 3.7, droite).

3.4 Extinction

Les phénomènes d'extinction de flamme n'ont pas pu être observés dans ces simulations. Bien que Bradley ait pu les capturer dans ses calculs (Bradley et al., 1990), ils restent des phénomènes fortement influencés par les instationnarités de la flamme. Par conséquent, il est fort probable que, numériquement, la prédiction des extinctions soit retardée, c'est-à-dire observée pour des hauteurs de décollement plus grande qu'expérimentalement. En revanche, dans nos calculs, aucune extinction a été obtenue.

Nous sommes sans doute ici aux limites des possibilités des calculs RANS. Les simulations des grandes structures (LES) devraient, très rapidement, permettre une analyse fine de ces mécanismes de stabilisation (Domigo et al., 2002), qui sont fortement dépendants

des effets instationnaires.

Conclusion

La prédiction de la position de la zone de réaction où la flamme s'accroche est un point très sensible lors de la conception des foyers aéronautiques. La méthode PCM-FTC autorise le calcul de cette zone avec une prédiction honorable, mais qui peut être améliorée. En raison du caractère fortement instationnaire du phénomène de stabilisation, seul la LES permettra d'aborder ce point avec fiabilité.

Toutefois, la précision de la position d'accrochage, obtenue avec la formulation PCM-FTC, est suffisante pour assurer la prédiction du rendement global de combustion ainsi que des polluants majoritaires, ces phénomènes étant contrôlés par l'écoulement en aval de la zone d'accrochage.

De plus, les phénomènes d'extinction pauvre étant aussi contrôlés par la carte de richesse, à une pression donnée, PCM-FTC est un bon candidat pour capturer ces points de fonctionnement limites des foyers aéronautiques.

Chapitre 4

Conclusion sur la validation

Trois flammes turbulentes ont été calculées avec la méthode PCM-FTC, Presumed Conditional Moment - Flame Tabulated Chemistry.

- Les résultats sur la flamme D ($Re=22000$) du laboratoire de Sandia ont montré que les prédictions sont proches des résultats expérimentaux. Les niveaux du monoxyde de carbone sont correctement retrouvés.
- Les résultats sur la flamme F ($Re=44000$) sont aussi prédictifs sur les majorités des hauteurs étudiées. Une surestimation des produits de combustion et du monoxyde de carbone pour la hauteur $X=15$ D est attribuée aux extinctions locales de la flamme qui, à cette position, sont extrêmement fréquentes. Un post-traitement des résultats expérimentaux a montré une équi-probabilité d'avoir une température de 900 K et 1900 K lorsque le mélange est stœchiométrique.
- Une analyse des hauteurs de décollement des flammes turbulentes de méthane / air a été réalisée. Les comparaisons sont faites avec les simulations de Bilger et les données expérimentales de Muñiz. Les calculs avec l'approximation au premier ordre sous-estiment ces hauteurs de décollement et les calculs au second ordre ont difficilement été convergés. De plus, les résultats étaient peu prédictifs dans le sens où les hauteurs de flammes pouvaient diminuer lorsque la vitesse débitante du combustible était augmentée. Les niveaux de fluctuations de l'avancement dans ce type de configuration sont élevés, ce qui nous a amené à fixer la ségrégation de l'avancement à 0.95. Les prédictions des hauteurs de décollement tant que l'écoulement d'air n'est pas trop élevé sont identiques aux simulations de Bradley et proches des données expérimentales. En revanche, les extinctions de la flamme ne sont pas prédites ce qui montrent les limites des calculs stationnaires RANS.

Conclusion générale

Le travail présenté dans ce mémoire était concentré sur la modélisation de la combustion turbulente dans les foyers aéronautiques. La chimie détaillée et les temps de calculs faibles représentent l'intérêt de la nouvelle méthode. L'objectif principal était la prédiction des espèces chimiques polluantes, et particulièrement le monoxyde de carbone (CO), en sortie de chambre de combustion. Les méthodes de tabulation de la chimie et le caractère présumé du comportement statistique de la flamme turbulente ont donc été retenus.

Ce manuscrit a été organisé en trois parties :

- Recherche et développement des méthodes de tabulation de la cinétique chimique,
- Modélisation de la combustion turbulente,
- Tests sur des flammes jets turbulentes expérimentales et application à un foyer aéronautique.

Dans la première partie, les résultats des calculs en chimie complexe, des flammes laminaires de diffusion et de prémélange ont été discutés. Les différences entre ces deux méthodes de tabulation ont été mises en évidence.

La méthode de tabulation par des flammes prémélangées laminaires FPI, Flame Prolongation ILDM (Gicquel, 1999), a été testée sur des flammes laminaires à contre-courant non-prémélangées. Les résultats ont montré les limites de cette méthode, notamment dans la prédiction des espèces chimiques polluantes NO et CO.

Dans les foyers aéronautiques, comme dans la majorité des applications industrielles, le combustible est initialement séparé du comburant pour des raisons de sécurité. Le régime de combustion n'est pas pour autant pleinement non-prémélangé puisque des phénomènes de prémélange partiel interviennent lorsque la chambre de combustion est une enceinte fermée et que les niveaux de turbulence sont élevés. Cette observation a encouragé une étude plus approfondie des flammes partiellement prémélangées. Les résultats ont montré l'importance du prémélange partiel sur les niveaux des fractions massiques des espèces

chimiques et sur la température. Cependant, une tabulation complète de ce type de régime est trop coûteuse en temps de calcul puisqu'elle fait intervenir de nombreux paramètres indépendants (richesse et avancement des prémélanges) et par conséquent de nombreuses flammes doivent être calculées. Cette méthode de tabulation a donc été abandonnée et on s'est donc intéressé à tester les méthodes de tabulation simples (prémélange et diffusion) dans des flammes partiellement prémélangées expérimentales.

Cette étude est réalisée sur des flammes jets turbulentes du laboratoire de Sandia (Flamme D et F). Le caractère chimique des flammes a été isolé en post-traitant les données expérimentales instantanées. Ce test a permis de quantifier les limites de prédiction des espèces chimiques des flammes turbulentes par des méthodes de tabulation des flammes laminaires. Il en résulte les points suivants :

- Les flammes à contre-courant non-prémélangées capturent les bons niveaux des espèces chimiques dans leur domaine d'application. Cependant, elles sont limitées par l'extinction prématurée des flammelettes et ne permettent pas de retrouver le comportement général des flammes turbulentes.
- La méthode FPI corrige ce problème et capture les phénomènes de prémélange partiel. Les niveaux de concentration de certaines espèces chimiques (CO, NO) ne sont pourtant pas retrouvés principalement dans la zone riche de la flamme. Ce résultat est attribué au fait que les flux d'espèces chimiques et de température à travers les iso-surfaces de fraction de mélange ne sont pas intégrés dans la méthode.

Au vu de ces résultats, une méthode de tabulation, FTC, Flame Tabulated Chemistry a été proposée. Les méthodes de tabulation des flammes prémélangées et de diffusion ont donc été combinées pour décrire les phénomènes cinétiques dans les flammes partiellement prémélangées. Cette méthode a été testée de la même manière que la tabulation FPI sur les flammes D et F. Les résultats ont montré qu'il était possible d'affiner la prédiction des concentrations d'espèces chimiques et notamment le CO.

Dans la deuxième partie, une modélisation de la combustion turbulente PCM, Presumed Conditional Moment est proposée en utilisant la méthode de tabulation FTC. Les fonctions de densité de probabilité présumées par la forme Beta sont introduites. Ce modèle est basé sur l'hypothèse d'indépendance statistique des paramètres de contrôle de la tabulation : la fraction de mélange, Z et la variable d'avancement, c . Cette hypothèse est discutée et vérifiée dans le cas des flammes jets turbulentes expérimentales, quand la

variable d'avancement est construite à partir de la somme des fractions massiques du CO et du CO_2 . Deux fermetures sont proposées avec prise en compte ou non des niveaux de fluctuations d'avancement.

Dans la dernière partie, cette modélisation est couplée au logiciel Fluent. Les cas tests étudiés sont les suivants :

– Flamme D :

Les résultats ont permis de quantifier les possibilités de prédiction des espèces chimiques par la méthode PCM-FTC. Les résultats sont en bon accord avec l'expérience.

– Flamme F :

Les résultats sont aussi prédictifs lorsque la turbulence est élevée avec toutefois une surestimation des produits de combustion et du polluant CO au voisinage de la hauteur $X/D=15$. Cet écart avec l'expérience est attribué à la fréquence élevée des extinctions locales de la flamme turbulente. Des résultats similaires sont retrouvés avec des modèles de combustion complexes et coûteux en temps CPU tel que le transport de pdf.

– Flamme liftées de méthane / air :

La prédiction des hauteurs de décollement d'une flamme jet turbulente est correctement retrouvée dans les limites de ce qui peut être attendu dans les simulations RANS. L'influence de l'écoulement d'air a été étudiée. Le comportement prédictif des hauteurs de décollement est d'autant plus précis que les vitesses de l'air sont faibles. Les extinctions globales de la flamme n'ont pas été retrouvées. Ce phénomène fortement instationnaire dans ces simulations en est sûrement la principale raison.

– Foyer aéronautique M88 :

L'application au foyer M88, qui équipe actuellement le *Rafale*, est discutée dans un document complémentaire dont le contenu est classifié "Confidentiel industrie".

Les résultats ont été comparés aux simulations numériques réalisées à Snecma avec le code de calcul N3S-natur et le modèle de combustion CLE-EDC ainsi qu'avec les résultats expérimentaux en sortie de chambre.

Perspectives

Le modèle de combustion turbulente PCM-FTC, Presumed Conditional Moment - Flame Tabulated Chemistry est, aujourd'hui, une méthode opérationnelle pour les simulations numériques RANS avec un faible coût CPU. Il est donc applicable à des géométries complexes de grandes tailles et donc à des applications industrielles. Cependant, il est possible d'apporter des améliorations importantes dans ce type d'application.

La première est l'introduction des pertes thermiques. Cette approche est étudiée par Fiorina (Fiorina et al., 2000). Cette formulation nécessite le calcul d'une équation de transport pour l'énergie et ajoute une dimension supplémentaire à la tabulation : l'enthalpie. Ceci engendre un coût cpu supplémentaire dans les calculs des flammes prémélangées laminaires.

La deuxième amélioration que l'on peut apporter au modèle est un calcul plus précis pour la dissipation scalaire χ_{Y_c} de la variable de progrès Y_c . Une équation de transport peut être une solution intéressante, ne contribuant que faiblement à l'augmentation du temps de calcul.

Au point de vue simulation, le modèle a été testé et validé sur différentes flammes de laboratoire et appliqué au foyer aéronautique M88. Bien que ces premiers calculs soient encourageants, il est nécessaire de continuer les simulations de géométries complexes et d'approfondir les comparaisons avec l'expérience et les autres méthodes de calcul. Notamment, des simulations à des pressions plus élevées et les prédictions des limites d'extinction n'ont pu être traitées dans le cadre de cette étude.

Enfin, la formulation développée dans le cadre des écoulements moyens peut être étendue aux simulations des grandes échelles (LES). Des tests en cours sont réalisés sur le banc ORACLES, flammes prémélangées turbulentes. La figure 4.1 est le résultat de la fraction massique de CO instantané pour une richesse $\phi = 0.75$. Les figures 4.2 et 4.3 sont respectivement les comparaisons avec les données expérimentales des vitesses moyennes.

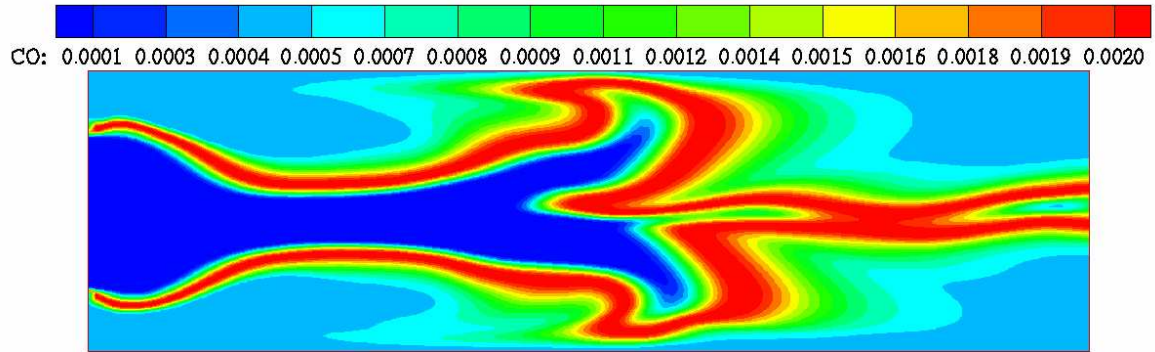


FIG. 4.1 – ORACLE : Fraction massique de CO. $\phi = 0.75$.

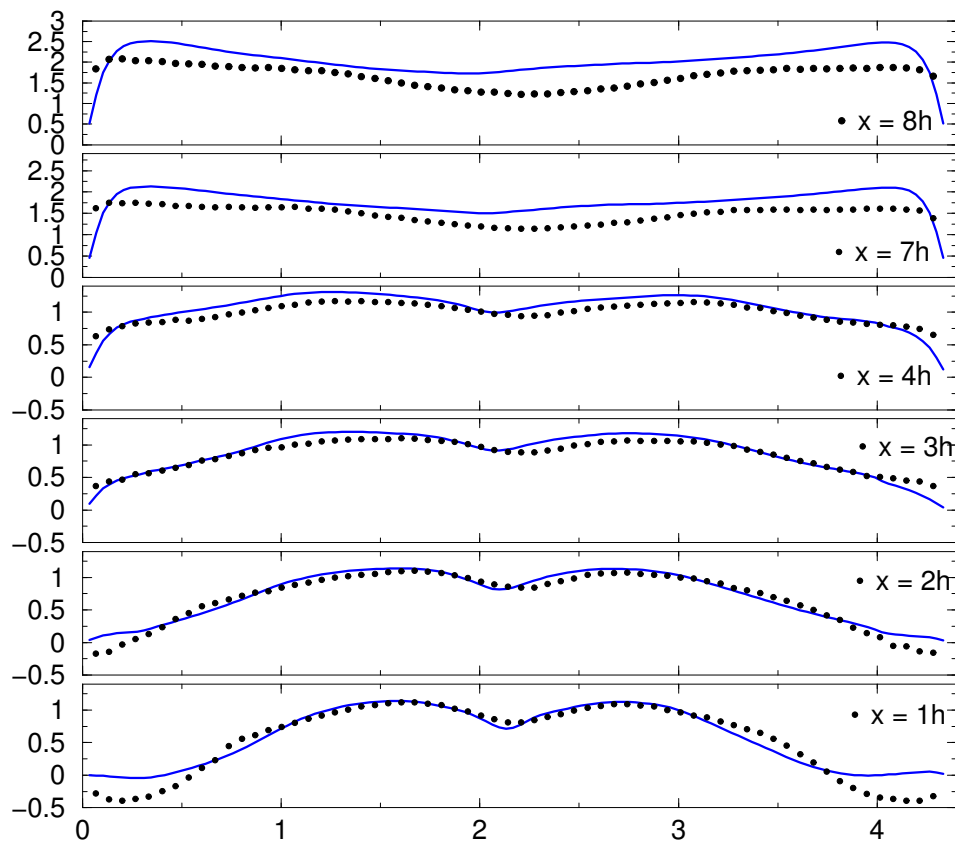


FIG. 4.2 – ORACLE : Vitesse moyenne axiale. $\phi = 0.75$. Cercles : expérience. Trait bleu : Simulation LES avec la tabulation FPI.

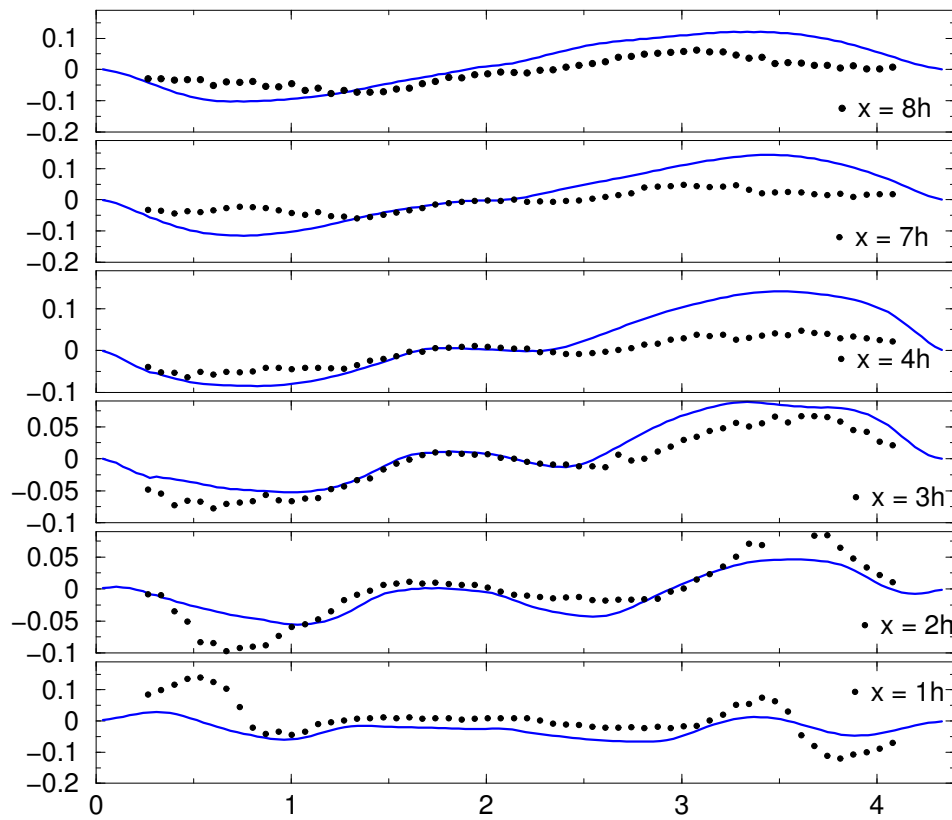


FIG. 4.3 – ORACLE : Vitesse moyenne radiale. $\phi = 0.75$. Cercles : expérience. Trait bleu : Simulation LES avec la tabulation FPI.

Chapitre 5

Le schéma cinétique GRI II

CHEMKIN INTERPRETER OUTPUT: CHEMKIN-II Version 3.6 Apr. 1994									
DOUBLE PRECISION									
ELEMENTS		ATOMIC		ELEMENT COUNT					
CONSIDERED	WEIGHT	CONSIDERED	WEIGHT	O	H	C	N	AR	
1. C	12.0112	1. C	12.0112	0	0	0	0	0	0
2. H	1.00797	2. H	1.00797	0	1	0	0	0	0
3. O	15.9994	3. O	15.9994	0	0	0	0	0	0
4. CH	13.01912	4. CH	13.01912	0	0	0	0	0	0
5. HCOH	42.03764	5. HCOH	42.03764	0	0	0	0	0	0
6. CH2O	50.02649	6. CH2O	50.02649	0	0	0	0	0	0
7. CO2	44.00985	7. CO2	44.00985	0	0	0	0	0	0
8. CO	28.01055	8. CO	28.01055	0	0	0	0	0	0
9. H2	2.01594	9. H2	2.01594	0	0	0	0	0	0
10. H	1.00797	10. H	1.00797	0	0	0	0	0	0
11. O2	31.99888	11. O2	31.99888	0	0	0	0	0	0
12. OH	17.00737	12. OH	17.00737	0	0	0	0	0	0
13. OH	17.00737	13. OH	17.00737	0	0	0	0	0	0
14. OH	17.00737	14. OH	17.00737	0	0	0	0	0	0
15. H2O	33.00677	15. H2O	33.00677	0	0	0	0	0	0
16. H2O	33.00677	16. H2O	33.00677	0	0	0	0	0	0
17. H2O	33.00677	17. H2O	33.00677	0	0	0	0	0	0
18. H2O	33.00677	18. H2O	33.00677	0	0	0	0	0	0
19. C2H6	30.07012	19. C2H6	30.07012	0	0	0	0	0	0
20. C2H4	28.05418	20. C2H4	28.05418	0	0	0	0	0	0
21. C2H2	26.03824	21. C2H2	26.03824	0	0	0	0	0	0
22. C2H2	26.03824	22. C2H2	26.03824	0	0	0	0	0	0
23. C2H2	26.03824	23. C2H2	26.03824	0	0	0	0	0	0
24. HCOO	41.02967	24. HCOO	41.02967	0	0	0	0	0	0
25. C	12.01115	25. C	12.01115	0	0	0	0	0	0
26. HCOO	41.02967	26. HCOO	41.02967	0	0	0	0	0	0
27. CH3O	32.03446	27. CH3O	32.03446	0	0	0	0	0	0
28. CH3OH	31.03446	28. CH3OH	31.03446	0	0	0	0	0	0
29. CH3OH	31.03446	29. CH3OH	31.03446	0	0	0	0	0	0
30. CH2(S)	32.04243	30. CH2(S)	32.04243	0	0	0	0	0	0
31. N2	28.01327	31. N2	28.01327	0	0	0	0	0	0
32. N	14.00670	32. N	14.00670	0	0	0	0	0	0
33. N	14.00670	33. N	14.00670	0	0	0	0	0	0
34. NH	15.01467	34. NH	15.01467	0	0	0	0	0	0
35. NH2	16.02264	35. NH2	16.02264	0	0	0	0	0	0
36. NH3	17.03051	36. NH3	17.03051	0	0	0	0	0	0
37. NH3	17.03051	37. NH3	17.03051	0	0	0	0	0	0
38. NH3	17.03051	38. NH3	17.03051	0	0	0	0	0	0
39. NO2	46.00550	39. NO2	46.00550	0	0	0	0	0	0
40. NO2	46.00550	40. NO2	46.00550	0	0	0	0	0	0
41. NO	30.00610	41. NO	30.00610	0	0	0	0	0	0
42. NO	30.00610	42. NO	30.00610	0	0	0	0	0	0
43. HCN	27.02582	43. HCN	27.02582	0	0	0	0	0	0
44. HCN	27.02582	44. HCN	27.02582	0	0	0	0	0	0
45. HCN	27.02582	45. HCN	27.02582	0	0	0	0	0	0
46. HCN	27.02582	46. HCN	27.02582	0	0	0	0	0	0
47. HCN	27.02582	47. HCN	27.02582	0	0	0	0	0	0
48. HCN	27.02582	48. HCN	27.02582	0	0	0	0	0	0
49. NCO	43.02125	49. NCO	43.02125	0	0	0	0	0	0

REACIONS CONSIDERED									
1.	20AH=>O2+H								
1.	20AH=>O2+H	Enhanced by	2.400E+00						
	H2	Enhanced by	1.540E+01						
	H2O	Enhanced by	2.000E+00						
	CH4	Enhanced by	1.500E+00						
	CO2	Enhanced by	3.600E+00						
	C2H6	Enhanced by	3.000E+00						
	AR	Enhanced by	8.300E-01						
2.	0+H+M=>OH+M	Enhanced by	2.000E+00						
	H2	Enhanced by	6.000E+00						
	H2O	Enhanced by	2.000E+00						
	CH4	Enhanced by	1.500E+00						
	CO	Enhanced by	2.000E+00						
	CO2	Enhanced by	2.000E+00						
	AR16	Enhanced by	7.000E-01						
3.	0+H2=>H+OH	Enhanced by	2.000E+00						
4.	0+H2O2=>OH+HO2	Enhanced by	6.000E+00						
5.	0+H2O2=>OH+HO2	Enhanced by	5.000E+00						
6.	0+H2O2=>OH+HO2	Enhanced by	1.500E+00						
7.	0+CH2=>H+HCO	Enhanced by	3.500E+00						
8.	0+CH2(S)<=>H2+CO	Enhanced by	5.000E+00						
9.	0+CH2(S)<=>H+HCO	Enhanced by	3.000E+00						
10.	0+CH2<=>H+CH2O	Enhanced by	2.000E+00						
11.	0+CH2O=>H+CO	Enhanced by	2.000E+00						
12.	0+CO+M=>CO2+M	Enhanced by	7.000E-01						
13.	0+H2O<=>OH+CO	Enhanced by	2.000E+00						
14.	0+HCO<=>H+CO2	Enhanced by	6.000E+00						
15.	0+CH2O<=>OH+HCO	Enhanced by	5.000E+00						
16.	0+CH2O<=>OH+CH2O	Enhanced by	1.500E+00						
17.	0+CH2O<=>OH+CH2O	Enhanced by	3.500E+00						
18.	0+CH2O<=>OH+CH2O	Enhanced by	5.000E+00						
19.	0+CH3OH<=>OH+CH3O	Enhanced by	3.000E+00						
20.	0+C2H4<=>CH+CO	Enhanced by	5.000E+00						
21.	0+C2H2<=>H+HCO	Enhanced by	6.000E+00						
22.	0+C2H2<=>H+HCO	Enhanced by	5.000E+00						
23.	0+C2H2<=>H+CH2O	Enhanced by	1.500E+00						
24.	0+C2H3<=>H+CH2O	Enhanced by	3.500E+00						
25.	0+C2H4<=>CH3+HCO	Enhanced by	5.000E+00						
26.	0+C2H5<=>CH3+CH2O	Enhanced by	2.000E+00						
27.	0+CH2O<=>H+CO	Enhanced by	2.000E+00						
28.	0+CH2O<=>H+CO	Enhanced by	2.000E+00						
29.	0+CH2O<=>H+CO	Enhanced by	2.000E+00						
30.	0+CH2CO<=>CH2+CO2	Enhanced by	0.000E+00						
31.	02+CO<=>O+CO2	Enhanced by	7.500E-01						
32.	02+CO<=>O+CO2	Enhanced by	1.500E+00						
33.	H+O2+M=>HO2+M	Enhanced by	0.000E+00						
	O2	Enhanced by	7.500E-01						
	CO	Enhanced by	1.500E+00						
	CO2	Enhanced by	1.500E+00						
	C2H6	Enhanced by	0.000E+00						
	N2	Enhanced by	0.000E+00						
	AR	Enhanced by	0.000E+00						
34.	H+O2<=>HO2+O2	Enhanced by	3.00E+20						
35.	H+O2<=>HO2+O2	Enhanced by	3.00E+20						
36.	H+O2<=>HO2+O2	Enhanced by	3.00E+20						
37.	H+O2+AR<=>HO2+AR	Enhanced by	7.00E+17						
38.	H+O2<=>O+OH	Enhanced by	8.30E+13						
39.	2H+M=>H2+M	Enhanced by	1.00E+18						
	H2O	Enhanced by	0.000E+00						
	H2O	Enhanced by	0.000E+00						

(k = A T**b exp(-E/RT))									
A	b	E							
1.20E+17	-1.0	0.0							
5.00E+17	-1.0	0.0							
5.00E+04	2.7	6290.0							
2.00E+13	0.0	0.0							
9.52E+06	2.0	4000.0							
3.00E+13	0.0	0.0							
8.00E+13	0.0	0.0							
1.50E+13	0.0	0.0							
1.50E+13	0.0	0.0							
9.52E+13	0.0	0.0							
9.52E+13	0.0	0.0							
6.02E+14	0.0	3000.0							
3.00E+13	0.0	0.0							
3.00E+13	0.0	0.0							
3.90E+13	0.0	3540.0							
1.00E+13	0.0	0.0							
3.00E+03	2.5	3100.0							
1.30E+05	2.5	5000.0							
5.00E+13	0.0	0.0							
1.02E+07	2.0	1900.0							
4.02E+07	2.0	1900.0							
1.02E+07	2.0	1900.0							
3.00E+13	0.0	0.0							
1.52E+07	1.8	220.0							
1.52E+14	0.0	0.0							
9.52E+07	0.0	560.0							
1.00E+14	0.0	0.0							
1.00E+13	0.0	8000.0							

H2	Enhanced by	2.000E+00			
H2O	Enhanced by	6.000E+00			
CH4	Enhanced by	2.000E+00			
CO	Enhanced by	1.500E+00			
CO2	Enhanced by	2.000E+00			
C2H6	Enhanced by	3.000E+00			
60. H-CH2OH<=>H2+CH2O		2.00E+13	0.0	0.0	0.0
61. H-CH2OH<=>OH+CH3		1.20E+13	0.0	0.0	0.0
62. H-CH2OH<=>CH2(S)+H2O		6.00E+12	0.0	0.0	0.0
63. H-CH3O(+M)<=>CH3OH(+M)		5.00E+13	0.0	0.0	0.0
Low pressure limit:		0.30250E+04			
TROE centering:		0.28380E+04			0.45569E+05
H2	Enhanced by	0.86000E+29			
H2O	Enhanced by	0.14400E+03			
CH4	Enhanced by	6.000E+00			
CO	Enhanced by	2.000E+00			
CO2	Enhanced by	1.500E+00			
C2H6	Enhanced by	2.000E+00			
64. H-CH3O<=>H+CH2OH		3.40E+06	1.6	0.0	0.0
65. H-CH3O<=>H2+CH2O		2.00E+13	0.0	0.0	0.0
66. H-CH3O<=>OH+CH3		3.20E+13	0.0	0.0	0.0
67. H-CH3O<=>CH2(S)+H2O		1.60E+13	0.0	0.0	0.0
68. H-CH3OH<=>CH2O+H2		1.70E+07	2.1	4870.0	0.0
69. H-CH3OH<=>CH3O+H2		4.20E+06	2.1	4870.0	0.0
70. H-C2H(+M)<=>C2H2(+M)		1.00E+17	-1.0	0.0	0.0
Low pressure limit:		0.37500E+34			
TROE centering:		0.64640E+00			0.13200E+03
H2	Enhanced by	2.000E+00			
H2O	Enhanced by	6.000E+00			
CH4	Enhanced by	2.000E+00			
CO	Enhanced by	2.000E+00			
CO2	Enhanced by	2.000E+00			
C2H6	Enhanced by	3.000E+00			
AR	Enhanced by	7.000E-01			
71. H-C2H2(+M)<=>C2H3(+M)		0.38000E+41			0.72200E+01
Low pressure limit:		0.75070E+00			0.98500E+02
TROE centering:		0.72700E+01			0.13020E+04
H2	Enhanced by	2.000E+00			
H2O	Enhanced by	6.000E+00			
CH4	Enhanced by	2.000E+00			
CO	Enhanced by	1.500E+00			
CO2	Enhanced by	2.000E+00			
C2H6	Enhanced by	3.000E+00			
AR	Enhanced by	7.000E-01			
72. H-C2H3(+M)<=>C2H4(+M)		5.60E+12	0.0	2400.0	0.0
Low pressure limit:		0.14000E+31			0.33200E+04
TROE centering:		0.78200E+00			0.26630E+04
H2	Enhanced by	2.000E+00			
H2O	Enhanced by	6.000E+00			
CH4	Enhanced by	2.000E+00			
CO	Enhanced by	1.500E+00			
CO2	Enhanced by	2.000E+00			
C2H6	Enhanced by	3.000E+00			
AR	Enhanced by	7.000E-01			
73. H-C2H3<=>H2+CH2		6.08E+12	0.3	280.0	0.0
74. H-C2H4(+M)<=>C2H5(+M)		0.12000E+43			0.76200E+01
Low pressure limit:		0.97530E+00			0.21000E+03
TROE centering:		0.78200E+00			0.69700E+04
H2	Enhanced by	2.000E+00			
H2O	Enhanced by	6.000E+00			
CH4	Enhanced by	2.000E+00			
CO	Enhanced by	1.500E+00			
CO2	Enhanced by	2.000E+00			
C2H6	Enhanced by	3.000E+00			
AR	Enhanced by	7.000E-01			
75. H-C2H4<=>C2H3+H2		3.00E+13	0.0	0.0	0.0
76. H-C2H5(+M)<=>C2H6(+M)		1.08E+12	0.5	1820.0	0.0
Low pressure limit:		0.84220E+00			0.98400E+03
TROE centering:		0.12500E+03			0.43740E+04
H2	Enhanced by	2.000E+00			
H2O	Enhanced by	6.000E+00			
CH4	Enhanced by	2.000E+00			
CO	Enhanced by	1.500E+00			
CO2	Enhanced by	2.000E+00			
C2H6	Enhanced by	3.000E+00			
AR	Enhanced by	7.000E-01			
75. H-C2H4<=>C2H3+H2		1.33E+06	2.5	12240.0	0.0
76. H-C2H5(+M)<=>C2H6(+M)		5.21E+17	-1.0	1580.0	0.0
Low pressure limit:		0.222190E+04			0.68820E+04
TROE centering:		0.19900E+42			0.70800E+01
H2	Enhanced by	2.000E+00			
H2O	Enhanced by	6.000E+00			
CH4	Enhanced by	2.000E+00			
CO	Enhanced by	1.500E+00			
CO2	Enhanced by	2.000E+00			

CH4	Enhanced by	2.000E+00			
CO2	Enhanced by	0.000E+00			
C2H6	Enhanced by	3.000E+00			
AR	Enhanced by	6.300E-01			
40. 2H+H2<=>2H2		9.00E+16	-0.6	0.0	0.0
41. 2H+H2O<=>H2+H2O		6.00E+19	-1.3	0.0	0.0
42. 2H+CO2<=>H2+CO2		5.50E+20	-2.0	0.0	0.0
43. H+OH+H<=>H2O+H		2.20E+22	-2.0	0.0	0.0
H2	Enhanced by	7.300E-01			
H2O	Enhanced by	3.650E+00			
CH4	Enhanced by	2.000E+00			
C2H6	Enhanced by	3.000E+00			
AR	Enhanced by	3.800E-01			
44. H+HO2<=>O+H2O		3.97E+12	0.0	671.0	0.0
45. H+HO2<=>O2+H2		2.80E+13	0.0	1068.0	0.0
46. H+HO2<=>2OH		1.34E+14	0.0	635.0	0.0
47. H+H2O2<=>HO2+H2		1.21E+07	2.0	5200.0	0.0
48. H+H2O2<=>OH+H2O		1.00E+13	0.0	3600.0	0.0
49. H+CH<=>C+H2		1.10E+14	0.0	0.0	0.0
50. H+CH2(+M)<=>CH3(+M)		2.50E+16	-0.8	0.0	0.0
Low pressure limit:		0.12300E+04			
TROE centering:		0.31400E+01			0.55900E+04
H2	Enhanced by	0.68000E+00			
H2O	Enhanced by	2.000E+00			
CH4	Enhanced by	6.000E+00			
CO	Enhanced by	2.000E+00			
CO2	Enhanced by	1.500E+00			
C2H6	Enhanced by	2.000E+00			
AR	Enhanced by	3.000E+00			
51. H+CH2(S)<=>CH+H2		3.00E+13	0.0	0.0	0.0
52. H+CH3(+M)<=>CH4(+M)		6.35E+16	-0.6	383.0	0.0
Low pressure limit:		0.24400E+04			
TROE centering:		0.29410E+04			0.69640E+04
H2	Enhanced by	2.000E+00			
H2O	Enhanced by	6.000E+00			
CH4	Enhanced by	2.000E+00			
CO	Enhanced by	1.500E+00			
CO2	Enhanced by	2.000E+00			
C2H6	Enhanced by	3.000E+00			
AR	Enhanced by	7.000E-01			
53. H+CH4<=>CH3+H2		6.60E+08	1.6	10840.0	0.0
54. H+HCO(+M)<=>CH2O(+M)		1.09E+12	0.5	-260.0	0.0
Low pressure limit:		0.14250E+04			
TROE centering:		0.27550E+04			0.65700E+04
H2	Enhanced by	2.000E+00			
H2O	Enhanced by	6.000E+00			
CH4	Enhanced by	2.000E+00			
CO	Enhanced by	1.500E+00			
CO2	Enhanced by	2.000E+00			
C2H6	Enhanced by	3.000E+00			
AR	Enhanced by	7.000E-01			
55. H+HCO<=>H2+O		7.34E+13	0.0	0.0	0.0
56. H+CH2O(+M)<=>CH2O(+M)		5.40E+11	0.5	3600.0	0.0
Low pressure limit:		0.65300E+04			
TROE centering:		0.12910E+04			0.41600E+04
H2	Enhanced by	2.000E+00			
H2O	Enhanced by	6.000E+00			
CH4	Enhanced by	2.000E+00			
CO	Enhanced by	1.500E+00			
CO2	Enhanced by	2.000E+00			
C2H6	Enhanced by	3.000E+00			
AR	Enhanced by	7.000E-01			
57. H+HCO<=>H2+O		0.13500E+25			-0.25700E+01
58. H+CH2O(+M)<=>CH2O(+M)		0.78200E+00			0.27100E+03
Low pressure limit:		0.18700E+00			0.10300E+03
TROE centering:		0.71870E+00			0.65300E+03
H2	Enhanced by	2.000E+00			
H2O	Enhanced by	6.000E+00			
CH4	Enhanced by	2.000E+00			
CO	Enhanced by	1.500E+00			
CO2	Enhanced by	2.000E+00			
C2H6	Enhanced by	3.000E+00			
AR	Enhanced by	7.000E-01			
57. H+CH2O(+M)<=>CH3O(+M)		5.40E+11	0.5	2600.0	0.0
Low pressure limit:		0.22000E+31			-0.48000E+01
TROE centering:		0.75800E+00			0.94000E+02
H2	Enhanced by	2.000E+00			
H2O	Enhanced by	6.000E+00			
CH4	Enhanced by	2.000E+00			
CO	Enhanced by	1.500E+00			
CO2	Enhanced by	2.000E+00			
C2H6	Enhanced by	3.000E+00			
AR	Enhanced by	7.000E-01			
57. H+CH2O(+M)<=>CH3O(+M)		5.40E+11	0.5	2600.0	0.0
Low pressure limit:		0.22000E+31			-0.48000E+01
TROE centering:		0.75800E+00			0.94000E+02
H2	Enhanced by	2.000E+00			
H2O	Enhanced by	6.000E+00			
CH4	Enhanced by	2.000E+00			
CO	Enhanced by	1.500E+00			
CO2	Enhanced by	2.000E+00			
C2H6	Enhanced by	3.000E+00			
AR	Enhanced by	7.000E-01			
58. H+CH2O<=>HCO+H2		2.30E+10	1.1	3275.0	0.0
59. H+CH2OH(+M)<=>CH3OH(+M)		1.80E+13	0.0	0.0	0.0
Low pressure limit:		0.30000E+32			-0.48000E+01
TROE centering:		0.76790E+00			0.33800E+03
H2	Enhanced by	2.000E+00			
H2O	Enhanced by	6.000E+00			
CH4	Enhanced by	2.000E+00			
CO	Enhanced by	1.500E+00			
CO2	Enhanced by	2.000E+00			
C2H6	Enhanced by	3.000E+00			

202.	NH2+HK=>NH+H2O	4.00E+13	0.0	3650.0
203.	NH2+OH=>NH+H2O	9.00E+07	1.5	-460.0
204.	NNH<=>N2+H	3.30E+08	0.0	0.0
205.	NNH+M<=>N2+H+M	1.30E+14	-0.1	4980.0
	H2			
	Enhanced by	2.000E+00		
	H2O	6.000E+00		
	Enhanced by	2.000E+00		
	CH4	1.500E+00		
	Enhanced by	2.000E+00		
	CO	3.000E+00		
	Enhanced by	3.000E+00		
	CO2	7.000E+00		
	Enhanced by	7.000E+00		
	C2H6			
	AR			
206.	NNH+O2<=>H2O+N2	5.00E+12	0.0	0.0
207.	NNH+O<=>OH+N2	2.50E+13	0.0	0.0
208.	NNH+O<=>NH+N2	7.00E+13	0.0	0.0
209.	NNH+H<=>H2+N2	5.00E+13	0.0	0.0
210.	NNH+OH<=>H2O+N2	2.00E+13	0.0	0.0
211.	NNH+CH3<=>CH4+N2	2.50E+13	0.0	0.0
212.	H+NO+M<=>HNO+M	8.95E+19	-1.3	740.0
	H2			
	Enhanced by	2.000E+00		
	H2O	6.000E+00		
	Enhanced by	2.000E+00		
	CH4	1.500E+00		
	Enhanced by	2.000E+00		
	CO	3.000E+00		
	Enhanced by	3.000E+00		
	CO2	7.000E+00		
	Enhanced by	7.000E+00		
	C2H6			
	AR			
213.	HNO+O<=>NO+OH	2.50E+13	0.0	0.0
214.	HNO+H<=>H2+NO	4.50E+11	0.7	660.0
215.	HNO+OH<=>NO+H2O	1.30E+07	1.9	-950.0
216.	HNO+O2<=>H2O+NO	1.00E+13	0.0	13000.0
217.	CN+O<=>CO+N	7.70E+13	0.0	0.0
218.	CN+OH<=>NCO+H	4.00E+13	0.0	0.0
219.	CN+H2O<=>HCN+OH	8.00E+12	0.0	7460.0
220.	CN+O2<=>NCO+O	6.14E+12	0.0	-440.0
221.	CN+H2<=>HCN+H	2.10E+13	0.0	4710.0
222.	NCO+O<=>NO+CO	2.35E+13	0.0	0.0
223.	NCO+H<=>NH+CO	5.40E+13	0.0	0.0
224.	NCO+OH<=>NO+HCO	2.50E+12	0.0	0.0
225.	NCO+N<=>N2+CO	2.00E+13	0.0	20000.0
226.	NCO+O2<=>NO+CO2	2.00E+12	0.0	48000.0
227.	NCO+M<=>N+CO+M	8.80E+16	-0.5	
	H2			
	Enhanced by	2.000E+00		
	H2O	6.000E+00		
	Enhanced by	2.000E+00		
	CH4	1.500E+00		
	Enhanced by	2.000E+00		
	CO	3.000E+00		
	Enhanced by	3.000E+00		
	CO2	7.000E+00		
	Enhanced by	7.000E+00		
	C2H6			
	AR			
228.	NO+NO<=>N2O+CO	2.85E+17	-1.5	740.0
229.	NO+NO<=>N2+CO2	5.70E+18	-2.0	800.0
230.	HCN+M<=>H+CN+M	1.04E+29	-3.3	126600.0
	H2			
	Enhanced by	2.000E+00		
	H2O	6.000E+00		
	Enhanced by	2.000E+00		
	CH4	1.500E+00		
	Enhanced by	2.000E+00		
	CO	3.000E+00		
	Enhanced by	3.000E+00		
	CO2	7.000E+00		
	Enhanced by	7.000E+00		
	C2H6			
	AR			
231.	HCN+O<=>NCO+H	1.11E+04	2.6	4980.0
232.	HCN+O<=>NH+CO	2.77E+03	2.6	4980.0
233.	HCN+O<=>CN+OH	2.13E+09	1.6	26600.0
234.	HCN+OH<=>HCN+H	1.10E+06	2.0	13370.0
235.	HCN+OH<=>HNC+H	4.40E+03	2.3	6400.0
236.	HCN+OH<=>NH2+CO	1.60E+02	2.6	9000.0
237.	HCN+M<=>H2CN+M	1.40E+26	-3.4	1900.0
	H2			
	Enhanced by	2.000E+00		
	H2O	6.000E+00		
	Enhanced by	2.000E+00		
	CH4	1.500E+00		
	Enhanced by	2.000E+00		
	CO	3.000E+00		
	Enhanced by	3.000E+00		
	CO2	7.000E+00		
	Enhanced by	7.000E+00		
	C2H6			
	AR			
238.	HCN+M<=>N2+CH2	6.00E+13	0.0	400.0
239.	CH2<=>CN+H	6.30E+13	0.0	46020.0
240.	CH+N2<=>HCN+H	2.86E+08	1.1	20400.0

159.	2CH5<=>HHC2H5	4.99E+12	0.1	10600.0
160.	CH3+HCO<=>CH4+CO	2.65E+13	0.0	0.0
161.	CH3+CH2O<=>HCO+CH4	3.32E+03	2.8	5860.0
162.	CH3+CH3OH<=>CH3O+CH4	1.00E+07	1.5	9940.0
163.	CH3+CH3OH<=>CH3O+CH4	2.27E+05	2.0	9200.0
164.	CH3+C2H4<=>C2H5+CH4	6.14E+06	1.7	10450.0
165.	CH3+C2H6<=>C2H5+CH4	2.24E+18	-1.0	17000.0
166.	FCO+H2O<=>H+CO+H2O	1.87E+17	-1.0	17000.0
167.	H2			
	Enhanced by	2.000E+00		
	H2O	0.000E+00		
	Enhanced by	2.000E+00		
	CH4	1.500E+00		
	Enhanced by	2.000E+00		
	CO	3.000E+00		
	Enhanced by	3.000E+00		
	CO2	7.000E+00		
	Enhanced by	7.000E+00		
	C2H6			
168.	HCO+O2<=>HO2+CO	7.60E+12	0.0	400.0
169.	CH2OH+O2<=>HO2+CH2O	1.80E+13	0.0	900.0
170.	CH3O+O2<=>HO2+CH2O	4.28E-13	7.6	-3530.0
171.	C2H5+O2<=>HCO+CO	5.00E+13	0.0	1500.0
172.	C2H5H2<=>H+H+C2H2	4.07E+05	2.4	200.0
173.	C2H5+O2<=>HCO+CH2O	3.98E+12	0.0	-240.0
174.	C2H4 (+M) <=> H2+C2H2 (+M)	8.00E+12	0.4	88770.0
	Low pressure limit:	0.99860E+05		
	TROE centering:	0.73450E+00		
	H2	0.10350E+04	0.54170E+04	
	Enhanced by	2.000E+00		
	H2O	6.000E+00		
	Enhanced by	2.000E+00		
	CH4	1.500E+00		
	Enhanced by	2.000E+00		
	CO	3.000E+00		
	Enhanced by	3.000E+00		
	CO2	7.000E+00		
	Enhanced by	7.000E+00		
	C2H6			
	AR			
175.	C2H5+O2<=>HO2+C2H4	8.40E+11	0.0	3875.0
176.	HCO+O2<=>OH+2CO	1.60E+12	0.0	854.0
177.	2HCO<=>2CO+C2H2	1.00E+13	0.0	0.0
178.	N+NO<=>N2+O	3.50E+13	0.0	330.0
179.	N+O2<=>NO+O	2.65E+12	0.0	6400.0
180.	N+OH<=>NO+H	7.35E+13	0.0	1120.0
181.	N2O+O<=>N2+O2	1.40E+12	0.0	10810.0
182.	N2O+O<=>2NO	2.90E+13	0.0	23150.0
183.	N2O+H<=>N2+OH	4.40E+14	0.0	18880.0
184.	N2O+OH<=>N2+HO2	2.00E+12	0.0	21060.0
185.	N2O (+M) <=> N2+O (+M)	1.30E+11	0.0	59620.0
	Low pressure limit:	0.56100E+05		
	H2	0.00000E+00		
	Enhanced by	2.000E+00		
	H2O	6.000E+00		
	Enhanced by	2.000E+00		
	CH4	1.500E+00		
	Enhanced by	2.000E+00		
	CO	3.000E+00		
	Enhanced by	3.000E+00		
	CO2	7.000E+00		
	Enhanced by	7.000E+00		
	C2H6			
	AR			
186.	HO2+N0<=>NO2+OH	2.11E+12	0.0	-480.0
187.	NO+O+M<=>NO2+M	1.06E+20	-1.4	0.0
	H2			
	Enhanced by	2.000E+00		
	H2O	6.000E+00		
	Enhanced by	2.000E+00		
	CH4	1.500E+00		
	Enhanced by	2.000E+00		
	CO	3.000E+00		
	Enhanced by	3.000E+00		
	CO2	7.000E+00		
	Enhanced by	7.000E+00		
	C2H6			
	AR			
188.	NO2+O<=>NO+O2	3.90E+12	0.0	-240.0
189.	NO2+H<=>NO+OH	1.32E+14	0.0	360.0
190.	NH+O<=>NO+H	5.00E+13	0.0	0.0
191.	NH+H<=>NH+H2	3.20E+13	0.0	330.0
192.	NH+OH<=>HNO+H	2.00E+13	0.0	0.0
193.	NH+OH<=>NH+H2O	2.00E+09	1.2	0.0
194.	NH+O2<=>HNO+O	4.61E+05	2.0	6500.0
195.	NH+O2<=>NO+OH	1.28E+06	1.5	100.0
196.	NH+N<=>N2+H	1.50E+13	0.0	0.0
197.	NH+H2O<=>HNO+H2	2.00E+13	0.0	13850.0
198.	NH+NO<=>N2+OH	2.16E+13	-0.2	0.0
199.	NH+NO<=>N2O+H	4.16E+14	0.0	0.0
200.	NE2+O<=>OH+NH	7.00E+12	0.0	0.0
201.	NE2+O<=>H+HNO	4.60E+13	0.0	0.0

241.	CH+N2 (+M) <=> HCNN (+M)	0.13000E+26	-0.31600E+01	3.10E+12	0.2	0.0
	Low pressure limit:	0.66700E+00	0.23500E+03	0.74000E+03		
	TROE centering:	Enhanced by	0.21170E+04	0.45360E+04		
	H2	Enhanced by				
	H2O	Enhanced by				
	CH4	Enhanced by				
	CO	Enhanced by				
	CO2	Enhanced by				
	C2H6	Enhanced by				
	AR	Enhanced by				
242.	CH2+N2 <=> HCN+NH	1.00E+13	0.0	0.0		74000.0
243.	CH2 (S) +N2 <=> NH+HCN	1.00E+11	0.0	0.0		65000.0
244.	C+NO <=> CN+O	1.90E+13	0.0	0.0		0.0
245.	C+NO <=> CO+N	2.90E+13	0.0	0.0		0.0
246.	CH+NO <=> HCN+O	5.00E+13	0.0	0.0		0.0
247.	CH+NO <=> H+NCO	2.00E+13	0.0	0.0		0.0
248.	CH+NO <=> N+HCO	3.00E+13	0.0	0.0		0.0
249.	CH2+NO <=> H+HNCO	3.10E+17	-1.4	1270.0		
250.	CH2+NO <=> OH+HCN	2.90E+14	-0.7	760.0		
251.	CH2+NO <=> H+HCNO	3.80E+13	-0.4	580.0		
252.	CH2 (S) +NO <=> H+HNCO	3.10E+17	-1.4	1270.0		
253.	CH2 (S) +NO <=> OH+HCN	2.90E+14	-0.7	760.0		
254.	CH2 (S) +NO <=> H+HCNO	3.80E+13	-0.4	580.0		
255.	CH3+NO <=> HCN+H2O	9.60E+13	0.0	28800.0		
256.	CH3+NO <=> H2CN+OH	1.00E+12	0.0	21750.0		
257.	HCNN+O <=> CO+H+N2	2.20E+13	0.0	0.0		0.0
258.	HCNN+O <=> HCN+N2	2.00E+12	0.0	0.0		0.0
259.	HCNN+O2 <=> O+HCO+N2	1.20E+13	0.0	0.0		0.0
260.	HCNN+OH <=> H+HCO+N2	1.20E+13	0.0	0.0		0.0
261.	HCNN+H <=> CH2+N2	1.00E+14	0.0	0.0		0.0
262.	HNCO+O <=> NH+CO2	9.80E+07	1.4	8500.0		
263.	HNCO+O <=> HNO+CO	1.50E+08	1.6	44000.0		
264.	HNCO+O <=> NCO+OH	2.20E+06	2.1	11400.0		
265.	HNCO+H <=> NH2+CO	2.25E+07	1.7	3800.0		
266.	HNCO+H <=> H2+NCO	1.05E+05	2.5	13300.0		
267.	HNCO+OH <=> NCO+H2O	4.65E+12	0.0	6850.0		
268.	HNCO+OH <=> NH2+CO2	1.55E+12	0.0	6850.0		
269.	HNCO+M <=> NH+CO+M	1.18E+16	0.0	84720.0		
	H2	Enhanced by				
	H2O	Enhanced by				
	CH4	Enhanced by				
	CO	Enhanced by				
	CO2	Enhanced by				
	C2H6	Enhanced by				
	AR	Enhanced by				
270.	HCNO+H <=> H+HNCO	2.000E+00				
271.	HCNO+H <=> OH+HCN	6.000E+00				
272.	HCNO+H <=> NH2+CO	2.000E+00				
273.	HCCN+H <=> H+HNCO	1.500E+00				
274.	HCCO+NO <=> HCN+CO	2.000E+00				
275.	CH3+N <=> H2CN+H	3.35E+13	0.0	0.0		0.0
276.	CH3+N <=> HCN+H2	6.10E+14	-0.3	290.0		
277.	NH3+H <=> NH2+H2	3.70E+12	0.2	-90.0		
278.	NH3+OH <=> NH2+H2O	5.40E+05	2.4	-9915.0		
279.	NH3+O <=> NH2+OH	5.00E+07	1.6	-955.0		
		9.40E+06	1.9	6460.0		

NOTE: A units mole-cm-sec-K, E units cal/mole

Bibliographie

- Barlow, R. S. and Frank, J. H. (1998). Effects of turbulence on species mass fractions in methane/air jet flames. *In Twenty-Seventh Symposium (Int.) Symposium on combustion*, pages 1087–1095.
- Barlow, R. S. and Frank, J. H. (2003a). <http://www.ca.sandia.gov/tnf/lab.html>. *International Workshop*.
- Barlow, R. S. and Frank, J. H. (2003b). <http://www.ca.sandia.gov/tnf/dataarch/flamed.html>. *International Workshop*.
- Bilger, R. W., Starner, S. H., and Kee, R. J. (1990). On reduced mechanisms for methane-air combustion in nonpremixed flames. *Combustion and Flame*, 80 :135–149.
- Borghì, R. and Destriau, M. (1998). Combustion and flame, chemical and physical principles. *Editions TECHNIP*.
- Boulanger, J. (2002). *Caractérisation de l'extrémité d'une flamme de diffusion. Analyse asymptotique et simulation direct de la combustion partiellement prémélangée*. PhD thesis, Université de Rouen.
- Bowman, C. T., Hanson, R. K., Gardiner, W. C., Lissianski, V., Frenklach, M., Goldenberg, M., Smith, G. P., Crosley, D. R., and Golden, D. M. (1997). An optimized detailed chemical reaction mechanism for methane combustion and no formation and reburning. *Technical report, Gas Research Institute, Chicago, IL*, Report No. GRI-97/0020.
- Bradley, D., Gaskell, P. H., and Gu, X. J. (1998). The mathematical modeling of liftoff and blowoff of turbulent non-premixed methane jet flames at high strain rates. *Twenty-Seventh Symposium (international)/on Combustion/ The Combustion Institute*, pages 1199–1206.
- Bradley, D., Gaskell, P. H., and Lau, A. K. C. (1990). A mixedness-reactedness flamelet model for turbulent diffusion flames. *Twenty-Third Symposium (international)/on Combustion/ The Combustion Institute*, pages 685–692.
- Burke, P. and Schumann, T. (1928). Diffusion flame. *Industr. Eng. Chem.*, 20 :998–1004.

-
- Dally, B., Masri, A. R., Barlow, R. S., and Fiechtner, G. J. (2003). Two-photon laser-induced fluorescence measurement of co in turbulent non-premixed bluff body flames. *Combust. Flame*, 132 :272–274.
- Domigo, P., Vervisch, L., and Bray, K. (2002). Partially premixed flamelets in les of non-premixed turbulent combustion. *Combust. Theory and modeling*, 6(4).
- Domingo, P., Vervisch, L., and Bray, K. (2002). Partially premixed flamelets in les of nonpremixed turbulent combustion. *Combust. Theory and Modeling*, 6(4).
- Eswaran, V. and Pope, S. (1988). Direct numerical simulations of the turbulent mixing of a passive scalar. *Physics of fluids*, 31 :506–520.
- Favier, V. and Vervisch, L. (2001). Edge flames and partially premixed combustion in diffusion flame quenching. *Combust. Flame*, 125(1/2) :788–803.
- Fiorina, B., Baron, R., Gicquel, O., Thevenin, D., Carpenter, S., and Darabiha, N. (2000). Modelling non-adiabatique partially-premixed flames using flame-prolongation of ildm. *Combust. Theory Modelling*.
- Gicquel, O. (1999). *Développement d'une nouvelle méthode de réduction des schémas cinétiques : Application au méthane*. PhD thesis, Ecole Centrale Paris.
- Gicquel, O., Darabiha, N., and Thevenin., D. (2000). Laminar premixed hydrogen / air counterflow flame simulations using flame prolongation of ildm with differential diffusion. *Proc. Comb. Inst.*, 28 :1901–1908.
- Hauguel, R. (2003). *Flamme en V turbulente : Simulation Numérique Directe et modélisation de la combustion turbulente prémélangée*. PhD thesis, INSA de rouen.
- Hilbert, R., Tap, F., El-Rabii, H., and Thévenin, D. (2004). Impact of detailed chemistry and transport models on turbulent combustion simulations. *Progress in Energy and Combustion Science*, 30 :61–117.
- Jones, W. P. (1994). Turbulence modelling and numerical solution methods for variable density and combusting flows. In *P.A. Libby and F.A. Williams, editors, Turbulent Reacting Flows. Academic Press London*, pages 309–368.
- Kee, R. J., Rupley, F. M., and Meeks, E. (1996). Chemkin-iii : A fortran chemical kinetics package for the analysis of gas-phase chemical and plasma kinetics. *Technical report, Sandia National Laboratories*.
- Klimenko, A. Y. and Bilger, R. W. (1999). Conditional moment closure for turbulent combustion. *Prog. Energ. Combust. Sci.*, 25(6) :595 – 687.
- Landenfeld, T., Sadiki, A., and Janicka., J. (2002). A turbulence-chemistry interaction model based on a multivariate presumed beta-pdf method for turbulent flames. *Flow, Turbulence and Combustion*, 68(2) :111–135.

-
- Libby, P. A. and Williams, F. A. (1994). Turbulent combustion : Fundamental aspects and a review. in p.libby and f.williams (eds.). *Turbulent Reacting Flows*, pages 2–61.
- Lindstedt, P. (2004). Is dns including detailed chemistry possible? *A combustion DNS theme day, 15 april 2004, Imperial College London*.
- Lutz, A. E., Grcar, J. F., and Rupley, F. M. (2000). *PREMIX : A program for modeling steady, laminar, one-dimensional premixed flames*.
- Lutz, A. E., Kee, R. J., Grcar, J. F., and Rupley, F. M. (1997). *OPPDIF : A fortran program for computeing opposed-flow diffusion flames*.
- Maas, U. and Pope, S. (1992a). Implementation of simplified chemical kinetics based on intrinsic low-dimensional manifolds. *Twenty-Fourth Symposium (international)/on Combustion/ The Combustion Institute*, pages 1349–1356.
- Maas, U. and Pope, S. (1992b). Simplifying chemical kinetics : Intrinsic low-dimensional manifolds in composition space. *Combust. Flame*, pages 239–264.
- Mizobuchi, Y., Shinjo, J., and Tachibana, S. (2003). Numerical analysis on stabilisation of a lifted flame. *CFD Technology Center National Aerospace Laboratory of Japan*.
- Moin, P. (2002). Advances in large eddy simulation methodology for complex flows. *Int. J. Heat Fluid Flow*, 23(6) :710–720.
- Muniz, L. (2002). *particule image velocimetry studies of turbulent nonpremixed flames*. PhD thesis, Mechanical Engineering Departement Stanford University.
- Muniz, L. and Mungal, G. (1997). Instantaneous flame-stabilization velocities in lifted-jet diffusion flames. *Combustion and Flame* 111, pages 16–31.
- Mura, A. and Borghi, R. (2003). Towards an extended scalar dissipation equation for turbulent premixed combustion. *Combust. and Flame*, 133 :193–196.
- Peters, N. (1984). Laminar diffusion flamelet models in non-premixed turbulent combustion. *Prog. Energy Combust. Sci.*, 10 :319–339.
- Peters, N. (1986). Laminar flamelet concepts in turbulent combustion. *Twenty-First Symposium (international)/on Combustion/ The Combustion Institute Pittsburgh*, pages 1231–1250.
- Peters, N. (2000). *Turbulent Combustion*. Cambridge University Press.
- Pitsch, H. and Steiner, H. (2000). Large-eddy simulation of a turbulent piloted methane/air diffusion flame (sandia flame d). *Physics of Fluids*, 12(10) :2541–2554.
- Pope, S. B. (1978). An explanation of the turbulent round-jet/plane-jet anomaly. *AIAA J.*, 16(3) :279–281.
- Pope, S. B. (1997). Computationally efficient implementation of combustion chemistry using in situ adaptive tabulation. *Combust. Theory Modelling*, 1 :41–63.

-
- Ravet, F. and Vervisch, L. (1998). Modeling non-premixed turbulent combustion in aeronautical engines using pdf-generator. In *36th Aerospace Sciences Meeting and Exhibit AIAA paper 98-1027*, Reno, NV.
- Reveillon, J. (2003). *Simulation dynamique des grandes structures appliquée aux flammes turbulentes non-prémélangées*. PhD thesis, Université de Rouen.
- Roomina, M. R. and Bilger, R. W. (2001). Conditional moment closure (cmc) predictions of a turbulent methane-air jet flame. *Combust. Flame*, 125(3) :1176–1195.
- Rullaud, M. and Vervisch, L. (2002). Partially premixed flame tabulated chemistry for rans modeling of nonpremixed turbulent combustion. *Ninth International conference on numerical combustion. Sorrento*.
- Selle, L. (2004). *Simulation aux grandes échelles des interactions flamme / acoustique dans un écoulement vrillé*. PhD thesis, Institut National Polytechnique de toulouse.
- Soete, G. D. (1997). Kinetics of combustion and combustion related nitrogen chemistry. *Cours de DEA, université de Rouen*.
- Takahashi, F., Schmoll, W., Trump, D., and Goss, L. (1996). Vortex-flame interactions and extinction in turbulent jet diffusion flames. *Twenty-sixth symposium (International) on combustion*.
- Valino, L. (1998). A field monte carlo formulation for calculating the probability density function of a single scalar in a turbulent flow. *Flow, turbulence and combustion*, 60 :157–172.
- van Oijen, J. A., Lammers, F. A., and de Goey, L. P. H. (2001a). Modeling of complex premixed burner systems by using flamelet-generated manifolds. *Combust. Flame*, 127(3) :2124–2134.
- van Oijen, J. A., Lammers, F. A., and de Goey, L. P. H. (2001b). Modeling of complex premixed burner systems by using flamelet-generated manifolds. *Combust. Flame*, 127(3) :2124–2134.
- Vervisch, L. (1992). Study and modeling of finite rate chemistry effects in turbulent non-premixed flames. In *Annual Research Briefs CTR, Standord U.*, pages 411–429.
- Vervisch, L., Hauguel, R., Domingo, P., and Rullaud, M. (2004a). Three facets of turbulent combustion modeling : Dns of premixed v-flame, les of lifted nonpremixed flame and rans of jet-flame. *Journal Of Turbulence*.
- Vervisch, L., Labegorre, B., and Réveillon, J. (2004b). Hydrogen-sulphur oxy-flame analysis and single-step flame tabulated chemistry. *Fuel*, 83(4-5) :605–614.
- Veynante, D. and Poinso, T. (2001). *Theoretical and Numerical Combustion*. Edwards.

- Veynante, D. and Vervisch., L. (2002). Turbulent combustion modeling. *Prog Energy Combust Sci*, 28 :193–266.
- Villermaux, J. (1986). Micromixing phenomena in stirred reactors. *Encyclopedia of Fluid Mechanics* 707.
- Xu, J. and Pope, S. B. (2000). Pdf calculations of turbulent nonpremixed flames with local extinctions. *Combust. Flame*, 123(3) :281–307.
- Yamashita, H., Shimada, M., and Takeno, T. (1996). A numerical study on flame stability at the transition point of jet diffusion flames. *Proc. Combust. Inst*, 26 :27–34.
- Zurbach, S. (1998). *Modélisation de la combustion turbulente non prémélangée avec prise en compte d'une cinétique détaillée*. PhD thesis, Département Laboratoire National d'hydraulique.